Ошибки методов Рунге-Кутты

Рассмотрим один из методов Рунге-Кутты.

Общий явный метод Рунге-Кутты 2-го порядка

Таблица Бутчера для метода:

$$\begin{array}{|cc} 0 & \\ \alpha & 0 \\ \hline b_1 & b_2 \end{array}$$

Коэффициенты рассчитываются следующим образом:

$$\begin{array}{rcl} \mathbf{k}_1 & = & \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) \\ \mathbf{k}_2 & = & \mathbf{f}(\mathbf{x}(t) + h\alpha\mathbf{k}_1) \end{array}$$

В методе средней точки, который является частным случаем общего метода, $\alpha = 1/2$.

Формула для $\mathbf{x}(t+h)$:

$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + h(b_1\mathbf{k}_1 + b_2\mathbf{k}_2) + O(h^3) \qquad (1)$$

Используем разложение в ряд Тейлора для коэффициентов:

$$\begin{array}{rcl} \mathbf{k}_1 & = & \mathbf{f} \\ \mathbf{k}_2 & = & \mathbf{f} + h\alpha\mathbf{f}'\mathbf{f} + O(h^2) \end{array}$$

Также разложим в ряд Тейлора $\mathbf{x}(t+h)$:

$$\begin{array}{rcl} \mathbf{x}(t+h) & = & \mathbf{x} + h\dot{\mathbf{x}} + \frac{h^2}{2}\ddot{\mathbf{x}} + O(h^3) \\ & = & \mathbf{x} + h\mathbf{f} + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}'\mathbf{f} + O(h^3) \end{array} \qquad (2)$$

Приравнивая (1) и (2), составим СЛАУ с неизвестными b_1, b_2

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ b_2\alpha = 1/2 \end{cases}$$

Решение этой системы уравнений:

$$\begin{array}{rcl} b_1 & = & 1 - \frac{1}{2\alpha} \\ b_2 & = & \frac{1}{2\alpha} \end{array}$$

Таким образом, явных методов Рунге-Кутты 2-го порядка может быть бесконечно много, и их многообразие определяется различным выбором значения α.

Таблицу Бутчера в таком случае можно записать, используя только α:

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

Примеры

$$\alpha = 1 : \begin{array}{c|cc} & 0 & \\ & 1 & 0 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}$$ – Метод Хойна

$$\alpha = \tfrac{1}{2} : \begin{array}{c|cc} & 0 & \\ & 1/2 & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$ – Метод средней точки

Оценка ошибки

Используем разложение в ряд Тейлора для коэффициентов $\mathbf{k_1}, \mathbf{k_2}$ до второго члена ряда:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f} \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f} + h\alpha \mathbf{f}'\mathbf{f} + \tfrac{h^2\alpha^2}{2}\mathbf{f}''\mathbf{f}\,\mathbf{f} + O(h^3) \end{aligned}$$

С учетом таких разложений коэффициентов запишем уравнение для $\mathbf{x}(t+h)$:

$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + h\mathbf{f} + \tfrac{h^2}{2}\mathbf{f}'\mathbf{f} + \tfrac{h^3\alpha}{4}\mathbf{f}''\mathbf{f}\,\mathbf{f} + O(h^4) \qquad (3)$$

Сопоставим полученное уравнение с разложением в ряд Тейлора до 3-го члена:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t+h) &= \mathbf{x} + h\dot{\mathbf{x}} + \tfrac{h^2}{2}\ddot{\mathbf{x}} + \tfrac{h^3}{6}\dddot{\mathbf{x}} + O(h^4) \\ &= \mathbf{x} + h\mathbf{f} + \tfrac{h^2}{2}\mathbf{f}'\mathbf{f} + \tfrac{h^3}{6}(\mathbf{f}''\mathbf{f}\,\mathbf{f} + \mathbf{f}'\mathbf{f}'\mathbf{f}) + O(h^4) \end{aligned} \qquad (4)$$

Четвертый член суммы отличается, соответственно, имеет место ошибка, которая определяется вычитанием (3) из (4):

$$\varepsilon = \left(\frac{h^3}{6} - \frac{h^3\alpha}{4}\right)\mathbf{f}''\mathbf{f}\,\mathbf{f} + \frac{h^3}{6}(\mathbf{f}'\mathbf{f}'\mathbf{f})$$

Итак, выбором α можно уменьшить значение ошибки, так как первый член суммы зависит от α. Несложно увидеть, что при выборе $\alpha = 2/3$, то первый член суммы станет равен 0.

Метод с таким α называется методом Ралстона, его таблица Бутчера:

$$\alpha = \frac{2}{3} : \begin{array}{c|cc} & 0 & \\ & 2/3 & 0 \\ \hline & 1/4 & 3/4 \end{array}$$

Ошибка метода Ралстона с учетом некоторых ограничений на функцию:

$$||\mathbf{f}|| < M,\ ||\mathbf{f}'|| < L \ \Rightarrow\ \varepsilon < Ch^3ML^2, \quad C = \frac{1}{6}$$

Аналитические оценки ошибок методов Рунге-Кутты

Если $\exists M, L\ :\ \left\|\frac{\partial^i \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}^i}\right\| < \frac{L^i}{M^{i-1}}$, то как раз выполняются условия $||\mathbf{f}|| < M, ||\mathbf{f}'|| < L$.

Вообще говоря, если найдены такие M, L, что данное неравенство выполняется, то для метода Рунге-Кутты порядка p:

$$\varepsilon < Ch^{p+1}ML^p$$

Примеры

Возьмем классический метод Рунге-Кутты 4-го порядка с таблицей Бутчера:

$$
\begin{array}{|cccc}
0 & & & \\
1/2 & 0 & & \\
0 & 1/2 & 0 & \\
0 & 0 & 1 & 0 \\
\hline
1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6
\end{array}
$$

Известно теоретически рассчитанное значение константы C для этого метода:

$$C \approx 10.14 \times 10^{-2}$$

Для метода 3/8 с таблицей Бутчера:

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

$$C \approx 9.91 \times 10^{-2}$$

Метод Ралстона 4-го порядка с таблицей Бутчера:

$$
\begin{array}{|cccc}
0 & & & \\
2/5 & 0 & & \\
\frac{-2889+1428\sqrt{5}}{1024} & \frac{3875-1620\sqrt{5}}{1024} & 0 & \\
\frac{-3365+2094\sqrt{5}}{6040} & \frac{-975-3046\sqrt{5}}{2552} & \frac{467040+203968\sqrt{5}}{240845} & 0 \\
\hline
\frac{263+24\sqrt{5}}{1812} & \frac{125-1000\sqrt{5}}{3828} & \frac{1024(3346+1623\sqrt{5})}{5924787} & \frac{30-4\sqrt{5}}{123}
\end{array}
$$

Имеет минимально возможное для методов Рунге-Кутты значение C:

$$C \approx 5.46 \times 10^{-2}$$

Отметим, что данная оценка ошибки не использует реальные значения функции, поэтому настоящая ошибка может быть значительно меньше этой оценки. Метод, который оптимален с точки зрения константы C может оказаться менее оптимальным на практике.

Попробуем оценивать ошибку, исходя из значений, рассчитанных по ходу работы метода.

Вложенные методы Рунге-Кутты

Данные методы – некоторое расширение обычных методов Рунге-Кутты. Для их определения в таблицу Бутчера добавляется строка с другими коэффициентами $\hat{b}_i$:

$$
\begin{array}{|cccc}
0 & & & \\
a_{21} & 0 & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \\
a_{s1} & a_{s2} & \dots & 0 \\
\hline
b_1 & b_2 & \dots & b_s \\
\hline
\hat{b}_1 & \hat{b}_2 & \dots & \hat{b}_s
\end{array}
$$

Соответственно, $\mathbf{x}(t+h)$ вычисляется двумя способами:

$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + \sum_{i=1}^{s} b_i \mathbf{k}_i + \varepsilon, \ \ \varepsilon = O(h^{p+1})$$
$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + \sum_{i=1}^{s} \hat{b}_i \mathbf{k}_i + \hat{\varepsilon}, \ \ \hat{\varepsilon} = O(h^{\hat{p}+1})$$

Таким образом, в методе совмещается два обычных метода. Как правило, при этом порядки $p, \hat{p}$ отличаются на 1.

Теперь можно рассчитать оценку ошибки, вычитая уравнения:

$$\sum_{i=1}^{s} (\hat{b}_i - b_i)\mathbf{k}_i = \varepsilon - \hat{\varepsilon} = \varepsilon + O(h^{\hat{p}+1})$$

Таким образом можно получать оценку той ошибки, которую мы хотим контролировать.

Для $p, \hat{p}$ метод называется вложенным методом порядка $p(\hat{p})$, где p – порядок аппроксимации значения на следующем шаге, а $\hat{p}$ используется именно для оценки ошибки.

Примеры

Метод Хойна-Эйлера 2(1). Число вычислений в правой части на каждом шаге $s = 2$.

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

Метод Богацкого-Шампина 3(2), $s = 4$. FSAL (first same as last) – наличие у метода повторяющихся строк в таблице Бутчера позволяет использовать по 3 вызова правой части на шаг.

$$\begin{array}{|cccc} 0 & & & \\ 1/2 & 0 & & \\ 0 & 3/4 & 0 & \\ 2/9 & 1/3 & 4/9 & 0 \\ \hline 2/9 & 1/3 & 4/9 & 0 \\ \hline 7/24 & 1/4 & 1/3 & 1/8 \end{array}$$

Еще несколько вложенных методов:

- Метод Рунге-Кутты-Фельберга 4(5), $s = 6$
- Метод Дормана-Принса 5(4), $s = 7$, FSAL

Подбор шага

Шаг можно не держать постоянным на всем промежутке интегрирования, а увеличивать его или уменьшать с тем, чтобы ошибка держалась в требуемых пределах.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{x}(t) + \textstyle\sum_{i=1}^{s} b_i \mathbf{k}_i \\ \hat{\mathbf{x}}^{(n+1)} &= \mathbf{x}(t) + \textstyle\sum_{i=1}^{s} \hat{b}_i \mathbf{k}_i \end{aligned}$$

Оценка ошибки в этом случае может считаться так:

$$\varepsilon = \hat{\mathbf{x}}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n+1)} + O(h^{\hat{p}+1})$$

Задача: управлять шагом так, чтобы значение ε не стало слишком большим.

Должно быть

$$\left|\hat{x}_i^{(n+1)} - x_i^{(n+1)}\right| \leqslant \mathrm{tol}_i = \mathrm{Atol}_i + \max\left(\left|\hat{x}_i^{(n+1)}\right|, \left|x_i^{(n+1)}\right|\right) \cdot \mathrm{Rtol}_i$$

Ошибка разделяется на две компоненты: абсолютную Atol_i и относительную (второй член суммы). Относительная ошибка умножается на максимальное значение из $|\hat{x}_i^{(n+1)}|, |x_i^{(n+1)}|$, так как может произойти так, что одно из значений станет равно 0.

Абсолютные и относительные допуски Atol_i и Rtol_i задаются пользователем, это пределы, в которых должна держаться ошибка.

Если оценка ошибки больше допустимого, можно, например, делить шаг пополам, а если наоборот слишком маленькая, то увеличивать. Такой способ не самый оптимальный.

Оптимальный выбор шага заключается в рассмотрении выражения:

$$\mathrm{err} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\hat{x}_i^{(n+1)} - x_i^{(n+1)}}{\mathrm{tol}_i}\right)^2} \sim h^{\min(p,\hat{p})}$$

Данная величина асимптотически пропорциональная шагу в степени, наименьшей из $p, \hat{p}$. Пользуясь этим, можно подогнать err к 1. Для этого выбирается оптимальный шаг:

$$h_{\mathrm{opt}} = h\left(\frac{1}{\mathrm{err}}\right)^{\frac{1}{\min(p,\hat{p})+1}}$$

Таким образом, очередной шаг можно провести со значением оптимального шага, вновь посчитать ошибку, и велика вероятность, что она уже будет укладываться в заданные допуски.