

Одношаговые явные методы численного интегрирования

Задача численного интегрирования

Найти численное значение функции $x(t)$, пользуясь некоторой функцией ее производной:

$$x(t) \xrightarrow{f} x(t+h)$$

$$\dot{x} = f(x)$$

Одношаговые методы работают тем способом, что при вычислении значения функции в точке $x(t+h)$ используют исключительно значение $x(t)$ (то есть значение на предыдущем шаге) и некоторое количество вызовов функции $f(x)$.

Такое семейство методов называется методами Рунге-Кутты.

Явные методы Рунге-Кутты: общий принцип

Общий принцип таков: есть s этапов, на каждом из которых происходит один вызов функции f .

$$k_1 = f(x(t))$$

$$k_2 = f(x(t) + ha_{21}k_1)$$

$$k_3 = f(x(t) + ha_{31}k_1 + ha_{32}k_2)$$

...

$$k_s = f(x(t) + h \sum_{i=1}^{s-1} a_{si}k_i)$$

Тогда окончательное значение функции $x(t+h)$:

$$x(t+h) = x(t) + h \sum_{i=1}^s b_i k_i [+ \varepsilon]$$

Как правило, эта формула неточна, это численная аппроксимация с некоторой ошибкой, которую обозначаем как ε .

Таблицы Бутчера

Для упрощения записи конкретных методов семейства Рунге-Кутты существуют таблицы Бутчера – это таблицы коэффициентов:

	0			
a_{21}	0			
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	
a_{s1}	a_{s2}	\dots	0	
b_1	b_2	\dots	b_s	

В общепринятом виде таблица имеет еще один столбец слева, используемый для коэффициента при h в аргументе t , то есть в неавтономных уравнениях, но в данном конспекте будут записаны таблицы без этого столбца.

Для понимания того, как записывается таблица, стоит внимательно посмотреть на общий принцип в предыдущем пункте.

На i -том этапе имеем $i - 1$ коэффициентов, которые участвуют в линейной комбинации для вычисления k_i . Также имеем члены b_1, b_2, \dots, b_s , которые используются при вычислении $x(t + h)$.

Нули на диагонали символизируют тот факт, что при обращении к f в линейной комбинации, которая подается ей как аргумент, не используем результат самой функции f . Если бы было не так, то получилась бы система уравнений относительно k_i . Именно так происходит в методах, которые называются *неявными*, более того, в этих методах значения выше диагонали также могут быть ненулевыми.

Явные методы Рунге-Кутты: примеры

Метод Эйлера

Таблица Бутчера для метода:

0
1

Функция f вызывается всего один раз. Метод имеет *первый порядок*.

Восстановим по таблице формулу для $x(t + h)$.

- Первая строка характеризует вычисление единственного коэффициента k_1 :

$$k_1 = f(x(t))$$

- Вторая строка содержит значение b_1 для окончательной формулы:

$$x(t + h) = x(t) + hb_1 k_1 = x(t) + hf(x(t)) + o(h)$$

$o(h)$ - порядок ошибки.

Метод средней точки

Таблица Бутчера для метода:

0	
1/2	0
0	1

Функция f вызывается два раза. Метод имеет *порядок 2*.

Восстановим по таблице формулу для $x(t + h)$:

- Первая строка характеризует вычисление k_1 (как можно заметить, во всех методах вычисление k_1 одинаково)

$$k_1 = f(x(t))$$

- Вторая строка содержит коэффициенты для вычисления k_2

$$k_2 = f\left(x(t) + \frac{1}{2}hk_1\right) = f\left(x(t) + \frac{h}{2}f(x(t))\right)$$

- Третья строка содержит коэффициенты b_1, b_2 для окончательной формулы:

$$x(t+h) = x(t) + hf\left(x(t) + \frac{h}{2}f(x(t))\right) + o(h^2)$$

$o(h^2)$ - порядок ошибки.

Классический метод Рунге-Кутты 4-го порядка (РК4)

Таблица Бутчера для метода:

	0			
	1/2	0		
	0	1/2	0	
	0	0	1	0
	1/6	1/3	1/3	1/6

Запишем уравнения для k_1, k_2, k_3, k_4 :

$$k_1 = f(x(t))$$

$$k_2 = f\left(x(t) + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(x(t) + \frac{h}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = f(x(t) + hk_3)$$

Конечная формула для $x(t+h)$:

$$x(t+h) = x(t) + h\left(\frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4\right) + o(h^4)$$

Многообразие явных методов Рунге-Кутты

Методов одинакового порядка может быть множество – можно варьировать значения коэффициентов в таблице Бутчера. Приведем несколько примеров.

Метод Хойна (порядок 2)

Таблица Бутчера для метода:

	0	
	1	0
	1/2	1/2

Метод Ралстона (порядок 2)

Таблица Бутчера для метода:

0	
2/3	0
1/4	3/4

Отличается тем, что имеем минимальную теоретическую оценку ошибки среди методов 2-го порядка.

Метод Ралстона (порядок 3)

Таблица Бутчера для метода:

0		
1/2	0	
0	3/4	0
2/9	1/3	4/9

Также имеем минимальную теоретическую оценку ошибки среди методов 3-го порядка.

Количество вызовов правых частей f называется *рангом* метода, который, однако, не всегда совпадает с порядком.

Метод 3/8 (порядок 4)

Таблица Бутчера для метода:

0			
1/3	0		
-1/3	1	0	
1	-1	1	0
1/8	3/8	3/8	1/8

Имеет лучшую теоретическую оценку ошибки, чем классический РК4, рассмотренный ранее.

Стоит отметить, что это в любом случае $o(h^4)$, но математически оценка коэффициентов для ошибки меньше.

Метод Ралстона (порядок 4)

Таблица Бутчера для метода:

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
$\frac{263+24\sqrt{5}}{1812}$	$\frac{125-1000\sqrt{5}}{3828}$	$\frac{1024(3346+1623\sqrt{5})}{5924787}$	$\frac{30-4\sqrt{5}}{123}$

Выглядит не очень презентабельно, но метод имеет минимальную теоретическую оценку ошибки среди методов 4-го порядка.

Явные методы Рунге-Кутты высших порядков

Отметим несколько важных свойств:

- При порядке $n > 4$ **обязательно** ранг $s > n$
- При $n > 6$ **обязательно** $s > n + 1$
- При $n > 7$ **обязательно** $s > n + 2$

Метод Рунге-Кутты-Фельберга 5-го порядка

Таблица Бутчера для метода:

$\frac{1}{4}$					
$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				
$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$			
$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$		
$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	
$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$

Метод Дормана-Принса 5-го порядка

Таблица Бутчера для метода:

	$\frac{1}{5}$					
	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				
	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$			
	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$		
	$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$	
	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$

Является более выгодным с точки зрения ошибки, чем метод РКФ5.

Другие явные методы высших порядков

Также известны методы:

- Метод Фельберга 8-го порядка
- Метод Дормана-Принса 8-го порядка (DOPRI8)
- Методы 10-го порядка (редко применяются)

На практике для порядков выше 8 используются неявные методы Рунге-Кутты или неявные многошаговые методы. Причина заключается в том, что при увеличении порядка явные методы сталкиваются с проблемами численной неустойчивости и численных артефактов.