Неявные методы Рунге-Кутты

Неявные методы Рунге-Кутты применяются для так называемых «жестких» систем ОДУ — системы, в которых применение явных методов Рунге-Кутты приводит к проблемам с устойчивостью.

Общий вид неявных методов Рунге-Кутты

При вычислении правых частей $\mathbf{k}_i$ могут использоваться все $\mathbf{k}_j, j = 1..s$:

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{f}\left(\mathbf{x}(t) + h\sum\nolimits_{j=1}^{s} a_{ij}\mathbf{k}_j\right), \quad i = 1..s$$

Значение вектора состояния на следующем шаге:

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

Данное выражение является аппроксимацией с некоторой ошибкой ε.

В связи с тем, что $\mathbf{k}_i$ нельзя найти по явным формулам, для их нахождения рекомендуются методы нахождения корней уравнений: метод простой итерации, метод Ньютона.

Для краткой записи неявных методов Рунге-Кутты, как и для явных, используются таблицы Бутчера. Общий вид таблицы:

$$\begin{array}{|cccc}
a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\
a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\
\hline
b_1 & b_2 & \dots & b_s
\end{array}$$

Неявный метод Эйлера

Неявный метод Эйлера также называют обратным, а явный — прямым.

Таблица Бутчера для метода:

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

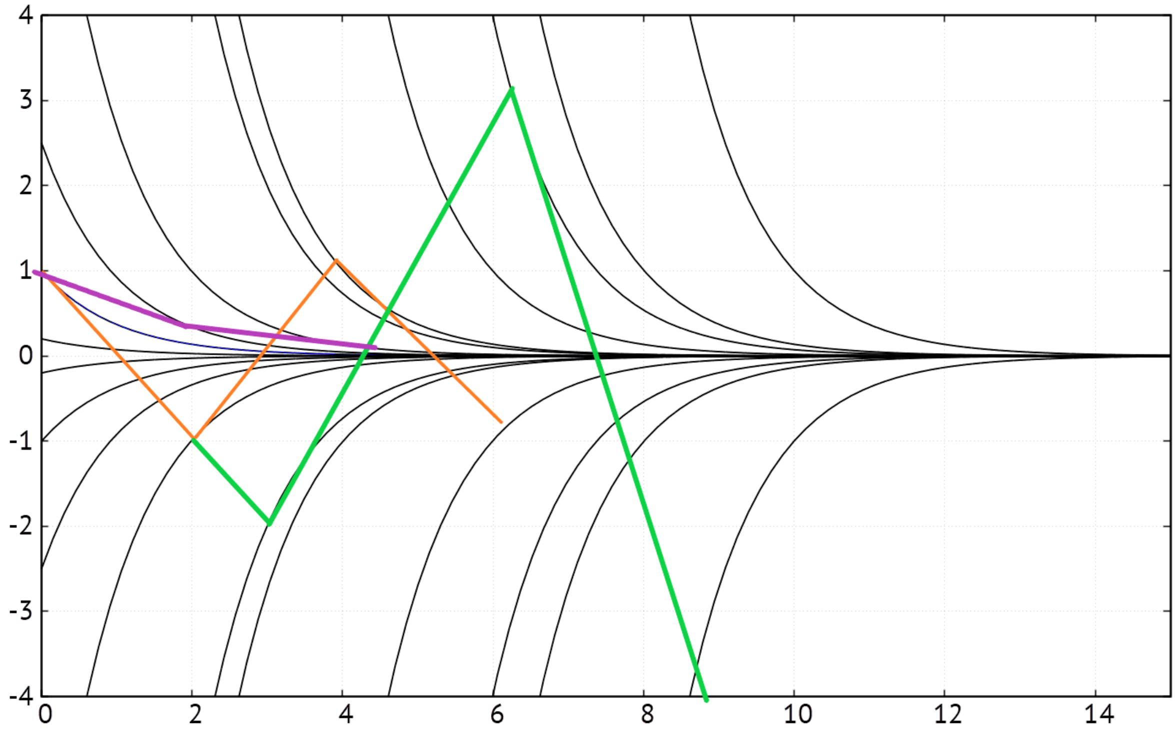
Формула для $\mathbf{x}(t+h)$:

$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + h\mathbf{f}(\mathbf{x}(t+h)) + O(h^2)$$

Несложно увидеть, что если рассмотреть уравнение как разложение в ряд Тейлора функции $\mathbf{x}$ в окрестности точки $t+h$, то значение в точке t именно так и будет выражаться с ошибкой $O(h^2)$ или $o(h)$. Метод имеет порядок 1.

Пример

Рассмотрим динамическую систему с уравнением $f(x) = -kx$. Задача Коши данной системы имеет тривиальное математическое решение вида $x(t) = x_0 e^{-k/t}$. Отобразим фазовый портрет данной системы:



По оси абсцисс — время t, по оси ординат — x. Здесь отображены кривые математического решения при разном значении x_0.

Обратим внимание, что это уравнение имеет решение и в отрицательной области. Смены знака x не должно происходить, но в численном методе это случается.

Например, в явном методе Эйлера при выборе большого шага, например $h = 2, x_0 = 1$. Производная при $t = 0$ равна -1, соответственно, после первого шага метод окажется в точке $(2, -1)$. В дальнейшем метод будет «прыгать» между разными по знаку и одинаковыми по величине x и никогда не придет к $x = 0$. На графике поведение метода при данном шаге изображено оранжевой ломаной.

Если выбрать шаг $h = 3$, то метод после первого шага окажется в точке $(2, -2)$, и далее значения x_i будут не только постоянно менять знак, но еще и становиться больше по модулю, то есть метод разойдется, траектория получится осциллирующей. Так и проявляется неустойчивость прямого метода Эйлера на этой задаче. Задача является жесткой и в ней стоит использовать неявный метод Эйлера. На графике поведение метода при данном шаге изображено зеленой ломаной.

В случае, если при том же $x_0 = 1$ брать шаг $h < 2$, то явный метод сойдется:

$$x(t+h) \approx x(t)(1-kh)$$
$$x(t) \approx x(0)(1-kh)^{t/h}$$

Таким образом, метод сходится при $|1-kh| < 1$.

Неявный метод Эйлера вне зависимости от выбора шага не уйдет в отрицательную область и на каждом шаге будет получаться значение меньше значения на предыдущем.

$$x(t+h) \approx x(t)/(1+kh)$$
$$x(t) \approx x(0)(1+kh)^{-t/h}$$

Метод сходится при $k > 0, h > 0$

На графике поведение метода при данном шаге изображено фиолетовой ломаной.

Неявный метод средней точки

Таблица Бутчера для метода:

$$\begin{array}{|c} 1/2 \\ \hline 1 \end{array}$$

Уравнение для коэффициента $\mathbf{k}_1$:

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}\left(\mathbf{x}(t) + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1\right)$$

Формула для $x(t+h)$:

$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + h\mathbf{k}_1 + o(h^2)$$

Разложим в ряд Тейлора выражение для $\mathbf{k}_1$:

$$\begin{aligned} \mathbf{k_1} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \tfrac{h}{2}\mathbf{f}'(\mathbf{x})\mathbf{k}_1 + O(h^2) \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \tfrac{h}{2}\mathbf{f}'(\mathbf{x})(\mathbf{f}(\mathbf{x}) + O(h)) \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \tfrac{h}{2}\mathbf{f}'(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x}) + O(h^2) \end{aligned}$$

Сопоставим с разложением $\mathbf{x}(t+h)$ в ряд Тейлора в окрестности точки $t+h$:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t+h) &= \mathbf{x}(t) + h\dot{\mathbf{x}}(t) + \tfrac{h^2}{2}\ddot{\mathbf{x}}(t) + o(h^2) \\ &= \mathbf{x}(t) + h\mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + \tfrac{h^2}{2}\mathbf{f}'(\mathbf{x}(t))\mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + o(h^2) \\ &= \mathbf{x}(t) + h\mathbf{k}_1 + o(h^2) \end{aligned}$$

Это доказывает, что метод имеет порядок 2.

Метод неявных трапеций

Таблица Бутчера для метода:

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

Уравнения для коэффициентов:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 = &\quad \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) \\ \mathbf{k}_2 = &\quad \mathbf{f}(\mathbf{x}(t) + \tfrac{h}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)) \end{aligned}$$

Формула для $x(t+h)$:

$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + \frac{h}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)$$

Покажем, что метод имеет порядок 2, используя разложение в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{2}(\mathbf{k_1} + \mathbf{k_2}) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + \tfrac{h}{4}\mathbf{f}'(\mathbf{x}(t))(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + O(h^2) \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + \tfrac{h}{4}\mathbf{f}'(\mathbf{x}(t))(2\mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + O(h)) + O(h^2) \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + \tfrac{h}{2}\mathbf{f}'(\mathbf{x}((t))\mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + O(h^2) \end{aligned}$$

Далее доказательство аналогично доказательству порядка неявного метода средней точки.

Другие неявные одношаговые методы

Большая часть более интересных методов основана на аппроксимации функции правой части некоторым многочленом, построенным по значениям f на некоторой сетке точек, и дальнейшем интегрировании этого многочлена с целью получения следующего вектора состояния системы. В зависимости от вида сетки точек более продвинутые методы распадаются на три вида:

- Методы Лобатто (порядки 2, 4, 6)
- Методы Радо (RADAU)
  - Метод Эверхарта до 15-го порядка (изначально создан для интегрирования систем небесной механики)
- Методы Гаусса-Лежандра
  - Метод Гаусса-Эверхарта (GAUSS15) до 15-го порядка

Применение того или иного метода сильно зависит от задачи и от того, как данный метод хорошо или плохо на данной задаче аппроксимирует решение, насколько хорошо сходится. Немаловажным является то, насколько требователен метод к вычислительным ресурсам. Неявные методы в целом намного более требовательны к ним, чем явные, так как на каждом шаге необходимо решать некоторую систему уравнений.