Одношаговые явные методы численного интегрирования

Задача численного интегрирования

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

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

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

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

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 $\mathbf{f}$.

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t))$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t) + ha_{21}\mathbf{k}_1)$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t) + ha_{31}\mathbf{k}_1 + ha_{32}\mathbf{k}_2)$$

$$\dots$$

$$\mathbf{k}_s = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t) + h\sum_{i=1}^{s-1} a_{si}\mathbf{k}_i)$$

Тогда окончательное значение функции $\mathbf{x}(t+h)$:

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

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

Таблицы Бутчера

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

$$\begin{array}{|cccc}
0 & & & \\
a_{21} & 0 & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \\
a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\
\hline
b_1 & b_2 & \dots & b_s
\end{array}$$

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 $\mathbf{k}_i$. Также имеем члены $b_1, b_2, \ldots b_s$, которые используются при вычислении $\mathbf{x}(t+h)$.

> Нули на диагонали символизируют тот факт, что при обращении к $\mathbf{f}$ в линейной комбинации, которая подается ей как аргумент, не используем результат самой функции $\mathbf{f}$. Если бы было не так, то получилась бы система уравнений относительно $\mathbf{k}_i$. 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:

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

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

Восстановим по таблице формулу для $\mathbf{x}(t+h)$.

- Первая строка характеризует вычисление единственного коэффициента $\mathbf{k}_1$:

$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t))$

- Вторая строка содержит значение b_1 для окончательной формулы:

$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + hb_1\mathbf{k}_1 = \mathbf{x}(t) + h\mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + o(h)$

$o(h)$ - порядок ошибки.

Метод средней точки

Таблица Бутчера для метода:

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

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

Восстановим по таблице формулу для $\mathbf{x}(t+h)$:

- Первая строка характеризует вычисление $\mathbf{k}_1$ (как можно заметить, во всех методах вычисление $\mathbf{k}_1$ одинаково)

$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t))$

- Вторая строка содержит коэффициенты для вычисления $\mathbf{k}_2$

$\mathbf{k}_2 = f\left(\mathbf{x}(t) + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_1\right) = f\left(\mathbf{x}(t) + \frac{h}{2}h\mathbf{f}(\mathbf{x}(t))\right)$

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

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

$o(h^2)$ - порядок ошибки.

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

Таблица Бутчера для метода:

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

Запишем уравнения для $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$:

$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t))$

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

$\mathbf{k}_3 = f\left(\mathbf{x}(t) + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2\right)$

$\mathbf{k}_4 = f\left(\mathbf{x}(t) + h\mathbf{k}_3\right)$

Конечная формула для $\mathbf{x}(t+h)$:

$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + h\left(\frac{1}{6}\mathbf{k}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_3 + \frac{1}{6}\mathbf{k}_4\right) + o(h^4)$

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:

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

Метод Ралстона (порядок 2)

Таблица Бутчера для метода:

$$
\begin{array}{|cc}
0 & \\
2/3 & 0 \\
\hline
1/4 & 3/4
\end{array}
$$

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

Метод Ралстона (порядок 3)

Таблица Бутчера для метода:

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

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:

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

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:

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

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:

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

Метод Дормана-Принса 5-го порядка

Таблица Бутчера для метода:

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

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.