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.

$k_1 = f(x(t))$

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

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

$\ldots$

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

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 ошибой, которую обозначаем как ε.

Таблицы Бутчера

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

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

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:

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

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:

$x(t+h) = x(t) + hb_1k_1 = x(t) + hf(x(t)) + o(h)$

$o(h)$ - 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 *второй порядок*.

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

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

- 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:

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

Запишем уравнения для k_1, k_2, k_3, k_4:

$k_1 = f(x(t))$

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

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

$k_4 = f\left(x(t) + hk_3\right)$

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:

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

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:

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

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.