Обобщения методов Рунге-Кутты

Ранее были рассмотрены методы Рунге-Кутты, доказаны некоторые их свойства в том случае, если метод работает с одним дифференциальным уравнением одной переменной.

Обобщим эти доказательства на случай многомерных систем дифференциальных уравнений от нескольких переменных и неавтономных систем, в которых явно участвует переменная времени.

Метод Рунге-Кутты для функции многих переменных

Повторение одномерного случая

Рассмотрим метод Рунге-Кутты порядка 2 в общем виде с разложением промежуточных значений функции в ряд Тейлора:

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{x})$$
$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(\mathbf{x} + h\alpha\mathbf{k}_1) = \mathbf{f} + h\alpha\mathbf{f}'\mathbf{f} + \frac{h^2\alpha^2}{2}\mathbf{f}''\mathbf{f}\,\mathbf{f} + O(h^3)$$

Взвешенно суммируем разложения из $\mathbf{k}_i$ в ряд Тейлора и сравниваем с разложением в ряд Тейлора самой функции $\mathbf{x}$:

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

Если они совпали с точностью до некоторого порядка разложения в ряд Тейлора, то считается, что этот порядок и есть порядок метода. Все это не вызывает сомнений, если правая часть – это функция от одной переменной.

Многомерный случай

Рассмотрим ситуацию, когда $\mathbf{x}$ – m-мерный вектор, а $\mathbf{f}$, соответственно, является m-мерной функцией от m-мерных векторов.

Разложение в ряд Тейлора функции многих переменных:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}+\mathbf{u}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k!}\left(u_1\frac{\partial}{\partial x_1} + \dots + u_m\frac{\partial}{\partial x_m}\right)^k\mathbf{f} + o(||u||^n)$$

Здесь $\mathbf{u}$ – тоже m-мерный вектор малого приращения.

Примеры:

$$k=1: \quad \sum_{i=1}^{m}\frac{\partial\mathbf{f}}{\partial x_i}u_i = \nabla\mathbf{f}\,\mathbf{u} \equiv \mathbf{f}'\mathbf{u}$$
$$k=2: \quad \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\frac{\partial^2\mathbf{f}}{\partial x_i\partial x_j}u_iu_j \equiv \mathbf{f}''\mathbf{u}\mathbf{u}$$
$$k=3: \quad \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial^3\mathbf{f}}{\partial x_i\partial x_j\partial x_k}u_iu_ju_k \equiv \mathbf{f}'''\mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u}$$

В случае $k=1$ получается матрица. При $k=2$ – квадратичная форма. В общем, возникающие объекты можно описать как тензоры возрастающих порядков. В конце для каждого k приписана компактная запись суммы.

Общая формула для $\mathbf{f}^{(p)}$:

$$\mathbf{f}^{(p)} \equiv \sum_{|\alpha|=m} \frac{|\alpha|!}{\alpha!} \frac{\partial^{|\alpha|}\mathbf{f}}{\partial x^{\alpha}}$$

Таким образом, получено обобщение разложения в ряд Тейлора функции многих переменных. Далее это обобщение нужно связать с разложением функции $\mathbf{x}$ в ряд Тейлора.

Дифференцирование по времени

Производная по времени $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{f}^{(p)}$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{f}^{(p)} = \sum_{|\alpha|=m} \frac{|\alpha|!}{\alpha!} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial^{|\alpha|}\mathbf{f}}{\partial x^{\alpha}} = \sum_{|\alpha|=m} \frac{|\alpha|!}{\alpha!} \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial^{|\alpha+1|}\mathbf{f}}{\partial x^{\alpha} \partial x_i} f_i \equiv \mathbf{f}^{(p+1)}\mathbf{f}$$

Пример

Порядок 1, первая производная по времени

$$\dot{\mathbf{f}} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_i} f_i \equiv \mathbf{f}'\mathbf{f}$$

Порядок 2, вторая производная по времени

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{f}} = (\mathbf{f}'\mathbf{f})^{\cdot} &= \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_i} \dot{f}_i + \frac{\partial \dot{\mathbf{f}}}{\partial x_i} f_i \right) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_i} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} f_j + \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial x_i \partial x_j} f_i f_j = \\ &= \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \frac{f_j \partial f_i \partial}{\partial x_i \partial x_j} \right) \mathbf{f} + \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \frac{f_i f_j \partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right) \mathbf{f} \equiv \mathbf{f}'\mathbf{f}'\mathbf{f} + \mathbf{f}''\mathbf{f}\,\mathbf{f} \end{aligned}$$

Здесь применяется правило дифференцирования произведения.

Если рассмотреть суммы как оператор, который применяется к функции $\mathbf{f}$, то внутри суммирования имеет место симметрия: есть возможность менять местами суммы и/или индексы. Поэтому можно использовать не зависящую от порядка суммирования запись (после $\equiv$).

Взятие второй производной по времени функции $\mathbf{f}$ подчиняется обычным законам дифференцирования, как если бы она была функцией от одной переменной. Аналогично получается и с производными высших порядков.

Таким образом, все доказательства в методах Рунге-Кутты, которые работали для одномерных функций, будут работать и для m-мерных.

Неавтономные уравнения

В данных системах на функцию правой части влияет некоторый глобальный и изменчивый во времени процесс, не зависящий от самой системы.

Модификация методов заключается в изменении вычисления $\mathbf{k}_i$ с учетом зависимостей правой части:

$$\begin{gathered} \mathbf{f} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \\ \mathbf{k}_i = \mathbf{f}\big(t + hc_i, \mathbf{x}(t) + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \mathbf{k}_j\big) \end{gathered}$$

Коэффициенты c_i указываются в таблице Бутчера – они располагаются в крайнем левом столбце. В литературе, как правило, таблицы Бутчера записываются всегда с данной колонкой.

$$
\begin{array}{c|cccc}
c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\
c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_s
\end{array}
$$

В связи с модификацией возникает вопрос о порядке локальной ошибки в методе.

Введем вектор $\tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ t \end{pmatrix}$. Также введем функцию $\tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \begin{pmatrix} \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \\ 1 \end{pmatrix}$.

В такой измененной нотации имеем:

$$\tilde{\mathbf{k}}_i = \tilde{\mathbf{f}}\left(\tilde{\mathbf{x}}(t) + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \tilde{\mathbf{k}}_j\right)$$

Таким образом, неавтономная система была преобразована в автономную на одну размерность больше, для которой порядок локальной ошибки уже был доказан ранее.

Здесь стоит отметить, что указание в таблице Бутчера c_i несколько избыточно, потому что эти коэффициенты выражаются через другие (являются суммой элементов справа в соответствующей строке):

$$c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij}$$