1.4. Rungės ir Kuto metodas

1.4.1. Prediktoriaus-korektoriaus metodas

Palyginkime išreikštinį ir simetrinį Eulerio metodus. Pirmojo iš jų pagrindinis privalumas tas, kad išreikštinio metodo realizacija yra daug ekonomiškesnė, tai ypač svarbu, kai sprendžiame dideles PDL sistemas. Tačiau simetrinio Eulerio metodo tikslumo eilė yra antroji, todėl norėdami apskaičiuoti PDL pradinio uždavinio (1.1) sprendinį numatytu tikslumu, galime naudoti didesnį žingsnį τ nei išreikštiniu Eulerio metodu, tai yra sumažiname žingsnių skaičių.

Šiame poskyryje sukonstruosime naują išreikštinį baigtinių skirtumų metodą, kurio aproksimacijos tikslumo eilė irgi yra antroji. Pirmiausia pažymėsime, kad simetrinio Eulerio metodo aproksimacijos tikslumo eilė nepasikeis, jei naudosime lygtį

$$\frac{Y^{n+1}-Y^n}{\tau_{n+1}} = \frac{F(t_n, Y^n) + F(t_n, Y^*)}{2}\,, \tag{1.35}$$

kurioje pagalbinė funkcija Y^* apskaičiuojama taip, kad imdami diferencialinio uždavinio sprendinį U gausime nelygybę

$$\|F(t_{n+1}, U^{n+1}) - F(t_{n+1}, U^*)\| \le C\tau^2\,.$$

Parodysime, kad Y^* galima apskaičiuoti išreikštiniu Eulerio metodu

$$Y^* = Y^n + \tau_{n+1} F(t_n, Y^n)\,. \tag{1.36}$$

Pirmąjį algoritmo žingsnį (1.36) vadinsime *prediktoriumi* (angl. *predict* – prognozuoti). Antrasis šio algoritmo žingsnis (1.35) taip pat yra išreikštinis, jis vadinamas *korektoriumi* (angl. *correct* – ištaisyti).

Tarkime, kad funkcija $F(t, U)$ yra Lipšico funkcija. Be to, papildomai pareikalaukime, kad PDL pradinio uždavinio sprendinio antroji išvestinė būtų aprėžta iš viršaus

$$|u_i''(t)| \le C_2, \quad i = 1, 2, \cdots, M. \tag{1.37}$$

Tada iš (1.15) ir (1.36) nelygybių gausime tokius įverčius

$$\begin{aligned}\|F(t_{n+1}, U^{n+1}) - F(t_{n+1}, U^*)\| &\le L\,\|U^{n+1} - U^*\| \\ &\le L\,\|\,U^{n+1} - U^n - \tau_{n+1} F(t_n, U^n)\,\| \\ &= L\,\|\,U^{n+1} - U^n - \tau_{n+1} U'(t_n)\,\|\,.\end{aligned}$$

Išskleidę U^{n+1} Teiloro eilute ir pasinaudoję (1.37) sąlyga gausime reikalingą aproksimavimo paklaidos įvertį

$$\|F(t_{n+1}, U^{n+1}) - F(t_{n+1}, U^*)\| \le \frac{LC_2}{2}\,\tau^2.$$

Skaičiavimo eksperimento rezultatai, kai sprendžiame šilumos spinduliavimo uždavinį pateikti 1.5 lentelėje. Palyginkite šiuos rezultatus su simetrinio Eulerio metodo sprendinio paklaidomis, pateiktomis 1.4 lentelėje.

1.5 lentelė. Prediktoriaus-korektoriaus metodo tikslumo analizė

τ	$E(\tau)$	$E(2\tau)/E(\tau)$
1,000	3,523E-6	4,031
0,500	8,770E-7	4,017
0,250	2,188E-7	4,009
0,125	5,461E-8	4,006

Prediktoriaus-korektoriaus metodu iš pradžių prognozuojame sprendinio reikšmę, apskaičiuojame ją išreikštiniu Eulerio metodu, o paskui, remdamiesi didesnio tikslumo skaitinio integravimo formule ir naudodami šią reikšmę, patiksliname sprendinį.

Pateiksime dar vieną antrosios tikslumo eilės prediktoriaus-korektoriaus metodą. Šį kartą (1.9) formulėje integralą apskaičiuosime pagal vidurinių reikšmių algoritmą:

$$\begin{cases} Y^* = Y^n + \dfrac{1}{2}\tau_{n+1} F(t_n, Y^n)\,, \\ \dfrac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = F(t_{n+0,5}, Y^*)\,. \end{cases} \tag{1.38}$$

Pažymėtina, kad prediktoriaus etape prognozuojame sprendinio reikšmę intervalo vidurio taške $t = t_{n+0,5}$.

1.4.2. Rungės ir Kuto metodo bendroji schema

Prediktoriaus-korektoriaus metode realizuodami vieną jo žingsnį vektoriaus $F(t,U)$ reikšmę skaičiavome dviejuose kiekvieno intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ taškuose. Šitaip pavyko sukonstruoti išreikštinį antrosios tikslumo eilės metodą. Dabar pateiksime metodo apibendrinimą, kai viename žingsnyje funkcijos $F(t,U)$ reikšmės skaičiuojamos keliuose taškuose. Juos parenkame taip, kad gautojo artinio tikslumas būtų kuo didesnis. Toks metodas vadinamas *Rungės ir Kuto* (*Runge - Kutta*) metodu.

m- pakopis išreikštinis Rungės ir Kuto metodas

Sakykime, kad turime koeficientų lentelę, kuri dar vadinama Rungės ir Kuto metodo matrica:

$$
\begin{array}{c|ccccc}
a_2 & b_{21} & & & & \\
a_3 & b_{31} & b_{32} & & & \\
\vdots & \dots & \dots & \dots & & \\
a_m & b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{m,m-1} & \\
\hline
 & \sigma_1 & \sigma_2 & \cdots & \sigma_{m-1} & \sigma_m
\end{array}
$$

Tada nuosekliai apskaičiuojame išraiškas

$$
\begin{cases}
K_1 = F(t_n, Y^n)\,, \\
K_2 = F(t_n + a_2\tau_{n+1}, Y^n + \tau_{n+1} b_{21} K_1)\,, \\
K_3 = F\big(t_n + a_3\tau_{n+1}, Y^n + \tau_{n+1}(b_{31}K_1 + b_{32}K_2)\big)\,, \\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\
K_m = F\big(t_n + a_m\tau_{n+1}, Y^n + \tau_{n+1}\sum\limits_{j=1}^{m-1} b_{mj}K_j\big)\,.
\end{cases}
\tag{1.39}
$$

Sprendinio Y^{n+1} reikšmė apskaičiuojama išreikštine formule

$$
Y^{n+1} = Y^n + \tau_{n+1}\sum_{j=1}^{m}\sigma_j K_j\,. \tag{1.40}
$$

Taigi realizuodami m-pakopio Rungės ir Kuto metodo algoritmą funkcijos $F(t, U)$ reikšmes skaičiuojame m skirtinguose intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ taškuose.

1.4 pavyzdys. Dvipakopis Rungės ir Kuto metodo algoritmas. Prediktoriaus-korektoriaus metodo algoritmai (1.35) – (1.36) ir (1.38) yra atskiri dvipakopio Rungės ir Kuto metodo atvejai. Jų koeficientų lentelės ir realizavimo formulės tokios:

(1.35) – (1.36) *algoritmas*

$$
\begin{array}{c|cc}
1 & 1 & \\
\hline
 & 0,5 & 0,5
\end{array}
$$

$$
\begin{cases}
K_1 = F(t_n, Y^n)\,, \\
K_2 = F(t_n + \tau_{n+1}, Y^n + \tau_{n+1}K_1)\,, \\
\dfrac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = \dfrac{K_1 + K_2}{2}\,.
\end{cases}
$$

(1.38) *algoritmas*

$$\begin{array}{c|cc} 0,5 & 0,5 & \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

$$\begin{cases} K_1 = F(t_n, Y^n), \\ K_2 = F\big(t_n + \dfrac{1}{2}\tau_{n+1}, Y^n + \dfrac{1}{2}\tau_{n+1}K_1\big), \\ \dfrac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = K_2\,. \end{cases}$$

Pateiksime m-pakopio Rungės ir Kuto metodo algoritmą.

procedure `Rungės ir Kuto metodo algoritmas`
begin
1. `Pradinės sąlygos skaičiavimas`
   $t = 0, \quad n = 0$
   for $i = 1$ **to** M
   $\quad YN[i] = U_0[i]$
   end for

2. `Sprendinio skaičiavimas nauju laiku` t_{n+1}
   while $\big((t + \tau_{n+1}) \le T\big)$
   $\quad$**for** $i = 1$ **to** M
   $\quad\quad YS[i] = YN[i]$
   $\quad$**end for**

   $\quad$3. `Tarpinių vektorių` K_j `skaičiavimas`
   $\quad$**for** $i = 1$ **to** M
   $\quad\quad K_1[i] = f_i(t, YS)$
   $\quad$**end for**
   $\quad$**for** $j = 2$ **to** m
   $\quad\quad$**for** $i = 1$ **to** M
   $\quad\quad\quad YN[i] = YS[i]$
   $\quad\quad\quad$**for** $k = 1$ **to** $j - 1$
   $\quad\quad\quad\quad YN[i] = YN[i] + \tau_{n+1} b_{jk} K_k[i]$
   $\quad\quad\quad$**end for**
   $\quad\quad$**end for**

```
            for  i = 1  to  M
                K_j[i] = f_i(t + τ_{n+1} a_j, YN)
            end for
        end for
        4. Vektoriaus Y^{n+1} skaičiavimas
        for  i = 1  to  M
            YN[i] = YS[i]
            for  j = 1  to  m
                YN[i] = YN[i] + τ_{n+1} σ_j K_j(i)
            end for
        end for
        t = t + τ_{n+1}
        n = n + 1
    end while
end
```

1.4.3. Rungės ir Kuto metodo koeficientų radimas

Algoritmo koeficientai a_i, b_{ij}, σ_i parenkami taip, kad metodo aproksimacijos tikslumas būtų didžiausias. Išnagrinėsime dvipakopį Rungės ir Kuto metodą. Iš šio pavyzdžio bus aišku, kaip koeficientai randami ir bendruoju atveju.

Imsime vienos diferencialinės lygties atvejį, kai $M = 1$. Lygčių sistemų analizė atliekama visiškai taip pat, be to, tik Rungės ir Kuto metodams, kurių tikslumo eilė didesnė už ketvirtąją, atsiranda papildomų lygčių, kurias turi tenkinti metodo koeficientai. Kadangi paprastai randame ne konkretų vienintelį nurodyto tikslumo Rungės ir Kuto metodą, o metodų šeimą, priklausančią nuo kelių laisvų parametrų, tai dažniausiai pavyksta patenkinti ir šias papildomas lygtis.

Dvipakopio Rungės ir Kuto metodo formulėse yra keturi laisvi parametrai a_2, b_{21}, σ_1, σ_2:

$$\begin{aligned}
&K_1 = f(t_n, y^n),\\
&K_2 = f(t_n + a_2\tau, y^n + b_{21}\tau K_1),\\
&y^{n+1} = y^n + \tau(\sigma_1 K_1 + \sigma_2 K_2)\,.
\end{aligned}$$

Perrašykime paskutiniąją lygybę standartine forma:

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = \sigma_1 f(t_n, y^n) + \sigma_2 f\big(t_n + a_2\tau, y^n + b_{21}\tau f(t_n, y^n)\big)\,.$$

Metodo aproksimacijos tikslumo analizė. Priminsime, kad aproksimavimo paklaida vadinamas dydis, gaunamas įrašius į baigtinių skirtumų lygtį PDL pradinio uždavinio sprendinį, taigi Rungės ir Kuto algoritmo aproksimavimo paklaida yra

$$\psi^n = \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} - \sigma_1 f(t_n, u^n) - \sigma_2 f\big(t_n + a_2\tau, u^n + \tau b_{21} f(t_n, u^n)\big)\,.$$

Tarkime, kad diferencialinio uždavinio (1.1) sprendinys ir funkcija $F(t, U)$ tenkina tokias glodumo sąlygas (jas užrašome bendrajam PDL sistemos atvejui):

$$|u_i'''(t)| \le C_3, \quad i = 1, 2, \cdots, M, \;\; t \in [0, T]\,,$$
$$\Big|\frac{\partial^2 f_i(t, U)}{\partial t^\alpha\, \partial u_j^\beta\, \partial u_k^\gamma}\Big| \le M_2, \quad \alpha + \beta + \gamma = 2\,.$$

Tada teisingi tokie Teiloro skleidiniai:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = u'(t_n) + \frac{\tau}{2} u''(t_n) + \mathcal{O}(\tau^2)\,,$$

$$f\big(t_n + a_2\tau, u^n + \tau b_{21} f(t_n, u^n)\big) = f(t_n, u^n) + \tau a_2 \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial t} + \tau b_{21} f(t_n, u^n) \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial u} + \mathcal{O}(\tau^2)\,.$$

Diferencijuodami (1.1) lygtį t atžvilgiu, išreiškiame sprendinio išvestinę:

$$u'' = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u} u' = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u} f\,.$$

Įrašę šiuos skleidinius į aproksimavimo paklaidos išraišką, gausime lygybę

$$\psi^n = (1 - \sigma_1 - \sigma_2) f(t_n, u^n) + \tau\big(0,5 - \sigma_2 a_2\big) \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial t} + \tau(0,5 - \sigma_2 b_{21}) f(t_n, u^n) \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial u} + \mathcal{O}(\tau^2)\,.$$

Norėdami gauti antrosios tikslumo eilės aproksimaciją, sudarome lygčių sistemą

$$\begin{cases} \sigma_1 + \sigma_2 = 1\,, \\ \sigma_2 a_2 = 0,5\,, \\ \sigma_2 b_{21} = 0,5\,. \end{cases}$$

Taigi keturiems dvipakopio Rungės ir Kuto metodo koeficientams nustatyti gavome tris lygtis. Todėl vienas parametras lieka laisvas, tai yra sukonstravome Rungės ir Kuto metodų šeimą, priklausančią nuo parametro σ:

$$\begin{array}{c|cc} \dfrac{1}{2\sigma} & \dfrac{1}{2\sigma} & \\ \hline & 1-\sigma & \sigma \end{array}$$

Jos skaičiavimo formulės diferencialinių lygčių sistemoms yra tokios:

$$\begin{cases} K_1 = K(t_n, Y^n)\,, \\ K_2 = F\big(t_n + \dfrac{\tau}{2\sigma}, Y^n + \dfrac{\tau}{2\sigma}K_1\big)\,, \\ Y^{n+1} = Y^n + \tau\big((1-\sigma)K_1 + \sigma K_2\big). \end{cases}$$

Imdami $\sigma = 1$ ir $\sigma = 0,5$ gauname du atskirus šios Rungės ir Kuto metodo šeimos algoritmus, išnagrinėtus 1.4 pavyzdyje.

Jeigu Teiloro skleidiniuose būtume išrašę ir $\mathcal{O}(\tau^2)$ eilės narius, tai būtume galėję įsitinkinti, kad vieno papildomo parametro neužteks visus juos prilyginti nuliui.

Galima ir paprasčiau įrodyti, kad nėra tokio dvipakopio Rungės ir Kuto metodo, kurio tikslumo eilė būtų trečioji. Tam užtenka rasti bent vieną kontrapavyzdį. Nagrinėkite tokį uždavinį

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = u\,, \\ u(0) = 1\,, \end{cases}$$

kurio sprendinys yra $u(t) = e^t$. Jį aproksimuokime dvipakopiu Rungės ir Kuto metodu:

$$\frac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau} = (1-\sigma)Y^n + \sigma\big(Y^n + \frac{\tau}{2\sigma}Y^n\big) = \big(1 + \frac{\tau}{2}\big)Y^n\,.$$

ir ištirkite šio metodo aproksimavimo paklaidą (tokia analizė pateikta vadovėlyje, bet pabandykite ją atlikti savatankiškai).

1.4.4. Daugiapakopiai Rungės ir Kuto algoritmai

Panaši analizė rodo, kad ir kitoms m reikšmėms gauname ne vieną konkretų Rungės ir Kuto metodą, o metodų šeimą, priklausančią nuo vieno ar kelių parametrų. Šiuos parametrus parenkame remdamiesi papildomais kriterijais: algoritmo realizavimo ekonomiškumu, stabilumo reikalavimu ir kitais. Pažymėsime, kad Rungės ir Kuto metodo pakopų skaičius (o kartu ir funkcijos $F(t,U)$ reikšmių skaičiavimo skaičius) didėja greičiau nei metodo aproksimacijos tikslumo eilė. Šie duomenys pateikti 1.6 lentelėje.

1.6 lentelė. Rungės ir Kuto metodo aproksimacijos tikslumo eilės priklausomybė nuo etapų skaičiaus

Etapų skaičius	m	1	2	3	4	5	6	7	8
Tikslumo eilė	p	1	2	3	4	4	5	6	6

Pateiksime skaičiavimo praktikoje dažniausiai naudojamų Rungės ir Kuto algoritmų koeficientus:

$$m=3,\ p=3\ :$$

$$\begin{array}{c|ccc} 0{,}5 & 0{,}5 & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{4}{6} & \frac{1}{6} \end{array} \qquad \begin{array}{c|ccc} 0{,}5 & 0{,}5 & & \\ 0{,}75 & 0 & 0{,}75 & \\ \hline & \frac{2}{9} & \frac{1}{3} & \frac{4}{9} \end{array} \tag{1.41}$$

$$m=4,\ p=4\ :$$

$$\begin{array}{c|cccc} 0,5 & 0,5 & & & \\ 0{,}5 & 0 & 0{,}5 & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \qquad \begin{array}{c|cccc} 0{,}5 & 0{,}5 & & & \\ 0,5 & \frac{\sqrt{2}-1}{2} & \frac{2-\sqrt{2}}{2} & & \\ 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{2+\sqrt{2}}{2} & & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2-\sqrt{2}}{6} & \frac{2+\sqrt{2}}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Keturpakopiu Rungės ir Kuto metodu išspręsime diferencialinių lygčių sistemos, aprašančios dviejų planetų judėjimo uždavinį (žr. vadovėlį). 1.7 lentelėje pateikos diskrečiojo sprendinio globaliosios paklaidos $E(\tau)$ reikšmės taške $t = 1$.

1.7 lentelė. Keturpakopio Rungės ir Kuto metodo tikslumo analizė

τ	$E(\tau)$	$E(2\tau)/E(\tau)$
0,1000	3,799E-4	18,994
0,0500	2,052E-5	18,515
0,0250	1,170E-6	17,532
0,0125	6,951E-8	16,838

Matome, kad du kartus sumažinus integravimo žingsnį, diskrečiojo sprendinio globalioji paklaida sumažėja apie 16 kartų.