Runge-Kuttovy metody

- Chceme řešit obyčejnou diferenciální rovnici (ODE) prvního řádu

$$\frac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x} \;=\; f(x, y(x))$$

  s počáteční podmínkou např. $y(0) = 1$.

- Protože známe hodnotu $y(x)$ v bodu $x = 0$, můžeme provést Taylorův rozvoj v okolí tohoto bodu a dostaneme

$$y(0+h) \;=\; y(0) + h\,y'(0) + \ldots,$$

  kde za $y'(x)$ dosadíme ze zadání funkci $f(x, y(x))$ a členy s druhou a vyšší derivací zanedbáme:

$$y(0+h) \;=\; y(0) + h\,f(0, y(0)).$$

  Této metodě se říká Eulerova. Je to nejjednodušší numerická metoda pro řešení ODE, ale není moc přesná ani stabilní. Ze zadání úlohy známe derivaci funkce $y(x)$ v každém bodu a v Eulerově metodě tedy vždy uděláme krok o délce h v proměnné x a k dosavadní hodnotě funkce $y(x)$ přičteme h-krát derivaci funkce $y(x)$ (směrnici tečny).

- Ze zadání úlohy toho mnoho nevíme. Máme jen počáteční hodnoty funkce $y(x)$ a jsme schopni spočítat její derivaci $y' = f$ v libovolném bodu. Pokud chceme zkonstruovat lepší metodu, musíme tedy využít znalosti derivace funkce y a na pravé straně nahradit člen $f(0, y(0))$ nějakou lineární kombinací hodnot funkce f v několika bodech. Tím dostaneme směrnici přímky, která charakterizuje chování funkce y na zadaném intervalu délky h lépe než tečna v bodu $(0, y(0))$.

- Tato úvaha vede k Runge-Kuttovým metodám. Místo bodu $x = 0$ budeme nyní uvažovat obecný bod x_n, hodnotu $y(x_n)$ označíme y_n a funkci $f(0, y(0))$ na pravé straně nahradíme nějakou lineární kombinací hodnot f v několika bodech, kterou označíme $\Phi(x, y(x), h)$. Metoda tedy bude mít tvar

$$y(x_n + h) \;=\; y_n + h\,\Phi(x_n, y_n, h). \tag{1}$$

- Pro začátek budeme funkci $\Phi(x, y(x), h)$ brát jako kombinaci hodnot f ve dvou bodech, a to v (x_n, y_n) a v nějakém dalším bodu $(x_n + \alpha\,h, y_n + \beta\,h\,f(x_n, y_n))$. Tedy

$$\Phi\big(x, y(x), h\big) \;=\; p_1\,f\big(x_n, y_n\big) + p_2\,f\big(x_n + \alpha\,h, y_n + \beta\,h\,f(x_n, y_n)\big). \tag{2}$$

  Zbývá nám určit parametry p_1, p_2, α a β.

- Všimněte si, že když se posuneme v proměnné x o αh, posouváme se v proměnné y o $\beta h f(x_n, y_n)$. Pro případ $(p_1 = 1, p_2 = 0)$ nebo $(p_1 + p_2 = 1, \alpha = \beta = 0)$ bychom dostali $\Phi = f(x_n, y_n)$ a tedy explicitní Eulerovu metodu

$$y(x_n + h) \;=\; y_n + h\,f(x_n, y_n),$$

  zatímco pro $(p_1 = 0, p_2 = 1, \alpha = \beta = 1)$ bychom měli $\Phi = f(x_{n+1}, y_{n+1})$, což dává implicitní Eulerovu metodu

$$y(x_n + h) \;=\; y_n + h\,f(x_{n+1}, y_{n+1}).$$

  My ale chceme přesnější metodu, opravdu využívající hodnotu f ve dvou různých bodech.

- Taylorův rozvoj funkce $y(x)$ v okolí bodu x_n do druhého řádu je

$$\begin{aligned} y(x_n+h) &= y(x_n) + h\,y'(x_n) + \frac{h^2}{2}\,y''(x_n) \\ &= y_n + h\,f(x_n,y_n) + \frac{h^2}{2}\,\frac{\mathrm{d}f(x,y(x))}{\mathrm{d}x}\bigg|_{(x_n,y_n)} \\ &= y_n + h\,f(x_n,y_n) + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f(x,y(x))}{\partial x} + \frac{\partial y(x)}{\partial x}\,\frac{\partial f(x,y(x))}{\partial y}\right) \\ &= y_n + h\,f(x_n,y_n) + \frac{h^2}{2}\left[\frac{\partial f}{\partial x} + f\,\frac{\partial f}{\partial y}\right]_{(x_n,y_n)}. \end{aligned} \tag{3}$$

Funkci chceme aproximovat Runge-Kuttovou metodou (1). Pro funkci $\Phi(x_n,y_n,h)$ danou předpisem (2) je Taylorův rozvoj v okolí $h=0$ po zanedbání členů od druhého řádu výše

$$\begin{aligned} \Phi\big(x_n,y_n,h\big) &= \Phi\big(x_n,y_n,0\big) + h\,\Phi'\big(x_n,y_n,0\big) \\ &= p_1\,f\big(x_n,y_n\big) + p_2\,f\big(x_n,y_n\big) + h\Big[p_1\,f\big(x_n,y_n\big) + p_2\,f\big(x_n+\alpha\,h, y_n+\beta\,h\,f(x_n,y_n)\big)\Big]'_{h=0} \\ &= p_1\,f\big(x_n,y_n\big) + p_2\,f\big(x_n,y_n\big) + h\left(p_2\,\alpha\,\frac{\partial f}{\partial x}(x_n,y_n) + p_2\,\beta\,f(x_n,y_n)\,\frac{\partial f}{\partial y}(x_n,y_n)\right) \\ &= (p_1+p_2)\,f\big(x_n,y_n\big) + h\,p_2\left[\alpha\,\frac{\partial f}{\partial x} + \beta\,f\,\frac{\partial f}{\partial y}\right]_{(x_n,y_n)}. \end{aligned}$$

Nenechte se zmýlit tím, že se $\Phi(x_n,y_n,h)$ zapisuje jako funkce tří proměnných: v každém jednotlivém kroku (1) od y_n k y_{n+1} je Φ funkcí pouze jedné proměnné h.

Celkem tedy po dosazení do (1) máme

$$y(x_n+h) = y_n + h\,(p_1+p_2)\,f\big(x_n,y_n\big) + h^2\,p_2\left[\alpha\,\frac{\partial f}{\partial x} + \beta\,f\,\frac{\partial f}{\partial y}\right]_{(x_n,y_n)}.$$

Porovnáme-li to s rozvojem (3), vidíme, že aby hledaná Runge-Kuttova aproximace dobře odpovídala dvěma členům v Taylorově rozvoji libovolné funkce, musí být odpovídající koeficienty stejné, tedy musí platit

$$p_1+p_2 = 1, \qquad \alpha\,p_2 = \tfrac{1}{2}, \qquad \beta\,p_2 = \tfrac{1}{2}.$$

Máme tedy 3 rovnice pro 4 neznámé a proto si můžeme jednu proměnnou zvolit libovolně. Obvykle se používá jedna ze dvou variant

$$\begin{aligned} &\boxed{1}\quad \alpha=\beta=1,\ p_1=p_2=\tfrac{1}{2}, \\ &\boxed{2}\quad \alpha=\beta=\tfrac{1}{2},\ p_1=0,\ p_2=1 \end{aligned}$$

a odpovídající vzorec

$$\boxed{1}\quad y(x_n+h) = y_n + \frac{h}{2}\Big[f\big(x_n,y_n\big) + f\big(x_n+h, y_n+hf(x_n,y_n)\big)\Big], \tag{4a}$$

$$\boxed{2}\quad y(x_n+h) = y_n + h\,f\big(x_n+\tfrac{h}{2}, y_n+\tfrac{h}{2}f(x_n,y_n)\big). \tag{4b}$$

- Všimněte, si že první variantu (4a) lze zapsat také jako

$$y(x_n+h) = y_n + h\,f(x_n,y_n) + \frac{h^2}{2}\,\frac{f\big(x_n+h, y_n+hf(x_n,y_n)\big) - f\big(x_n,y_n\big)}{h},$$

kde poslední zlomek je vlastně jednoduché numerické nahrazení derivace funkce f (dopředná konečná diference), takže poslední člen je aproximací třetího členu Taylorova rozvoje funkce y.

- Runge-Kuttovy vzorce jsou analogické s Newton-Cotesovými vzorci pro integraci. Pro jednoduchost si představme, že máme řešit diferenciální rovnici

$$\frac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x} = f(x),$$

přičemž víme, že $y(x_n) = y_n$ a hledáme hodnotu $y(x_n + h)$. Integrací rovnice dostaneme

$$y(x_n + h) = y_n + \int_{x_n}^{x_n+h} f(x)\,\mathrm{d}x.$$

Kdybychom pro integraci funkce f použili lichoběžníkové pravidlo, dostali bychom

$$\begin{aligned} y(x_n + h) &= y_n + \int_{x_n}^{x_n+h} f(x)\,\mathrm{d}x \\ &= y_n + \frac{h}{2}\big[f(x_n) + f(x_n + h)\big], \end{aligned}$$

což odpovídá použití Runge-Kuttovy metody (4a) pro řešení diferenciální rovnice.

- Závěrem ještě uvedeme vzorce pro nejčastěji používanou Runge-Kuttovu metodu 4. řádu:

$$\begin{aligned} k_1 &= h\,f\Big(x_n\ ,\ y_n\Big), \\ k_2 &= h\,f\Big(x_n + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_n + \tfrac{k_1}{2}\Big), \\ k_3 &= h\,f\Big(x_n + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_n + \tfrac{k_2}{2}\Big), \\ k_4 &= h\,f\Big(x_n + h\ ,\ y_n + k_3\Big), \\ y_{n+1} &= y(x_n + h) = y_n + \frac{k_1 + 2\,k_2 + 2\,k_3 + k_4}{6}. \end{aligned}$$