Γιατί και πώς δουλεύει η αριθμητική ολοκλήρωση RK;

Απ: Μυρίζοντας τη σωστή κατεύθυνση προώθησης.

Θ. Αποστολάτος

ΕΚΠΑ

15 Απριλίου 2020

Ιστορία

Οι Carl David Tolmé Runge (1856-1927) και Martin Kutta (1867-1944).
Ξεκίνησε από τον Runge το 1895 και επεκτάθηκε από τον Kutta το 1900.

Έστω το δυναμικό σύστημα

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

με f κάποια γνωστή συνάρτηση 2 (ή περισσότερων) μεταβλητών.
Έστω επίσης ότι η $x(t_0)$ (η αρχική κατάσταση) είναι γνωστή.
Ο πιο απλός αριθμητικός τρόπος επίλυσης αυτής είναι η ολοκλήρωση κατά Euler, με βήμα ολοκλήρωσης:

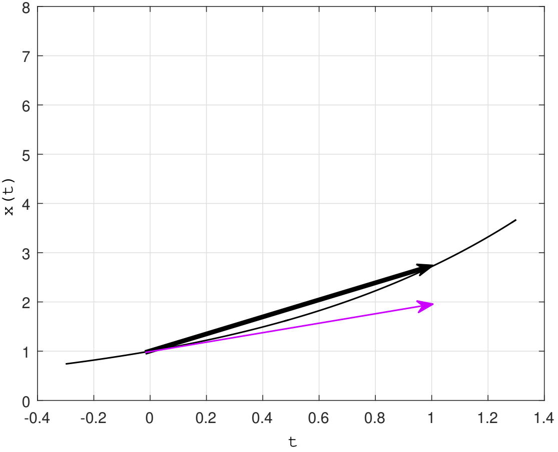
$$x(t_0 + \delta) = x(t_0) + \delta\, f(x(t_0), t_0)$$

Προφανώς ο υπολογισμός αυτός είναι προσεγγιστικός (δηλαδή λάθος) αφού

$$x(t_0 + \delta) = x(t_0) + \delta\, \dot{x}(t_0) + \delta^2\, \frac{1}{2!}\ddot{x}(t_0) + \ldots$$

Παράδειγμα: $$\dot{x} = x$$

με $f(x) = x$ και λύση $x(t) = e^t x(0)$:



Σχήμα 1: 'Euler' έναντι ακριβούς. Βήμα $\delta = 1$. (Σφάλμα: $e - 2 = 0.717$)

Επομένως με την απλοϊκή αυτή προσέγγιση κάνουμε λάθος τάξης δ^2 σε κάθε βήμα και επομένως για χρονική ολοκλήρωση κατά χρονικό διάστημα T: όπου $T = N\delta$ (N βήματα), το συνολικό συσσωρευμένο λάθος θα ήταν τάξης $N\delta^2 = T\delta$ ή $N(T^2/N^2) = T^2/N$.

ΔΙΔΑΓΜΑ: Θέλετε λάθος στην εκτίμηση του $x(t_0 + T)$ όχι μεγαλύτερο από ϵ μετά από συνολικό χρόνο ολοκλήρωσης T; Απλώς εκτελέστε $N = T^2/\epsilon$ υπολογισμούς ή επιλέξτε βήμα ϵ/T.

Ας δούμε αν μπορούμε καλύτερα.

Θα θέλαμε να “πιάσουμε” και τον όρο τάξης δ^2 στο παραπάνω ανάπτυγμα Taylor. Ας δοκιμάσουμε με

$$x(t_0 + \delta) = x(t_0) + \delta\, f(x(t_0 + \tau), t_0 + \tau)$$

Ωστόσο δεν γνωρίζουμε την $x(t)$ για να ξέρουμε την $x(t_0 + \tau)$!

ΕΝΑΛΛΑΚΤΙΚΑ: Μήπως να επιλέξουμε

$$x(t_0 + \delta) = x(t_0) + \delta\, f(x(t_0), t_0 + \tau)$$

με κάποιο κατάλληλο τ;

Δεν δουλεύει αφού

$$f(x(t_0), t_0 + \tau) \simeq f(x(t_0), t_0) + \tau f_t(x(t_0), t_0) \; ;$$

οπότε θα είχαμε

$$x(t_0 + \delta) = x(t_0) + \delta f(x(t_0), t_0) + \delta \tau f_t(x(t_0), t_0) + \dots$$

ενώ εμείς θα θέλαμε να πιάσουμε τον όρο

$$\begin{aligned} &\delta^2 \frac{1}{2!} \ddot{x}(t_0) = \frac{\delta^2}{2} \frac{df}{dt}(x(t_0), t_0) = \\ &\frac{\delta^2}{2} \left[f_x(x(t_0), t_0) \, f(x(t_0), t_0) + f_t(x(t_0), t_0) \right] \end{aligned} \qquad (1)$$

(ακόμη και αν $\tau = \delta/2$ δεν πιάνουμε όλο το δ^2 όρο παρά μόνο το f_t κομμάτι!)

Ας δοκιμάσουμε λοιπόν να "κουνήσουμε" καταλλήλως και το $x(t_0)$:

$$f(x(t_0)+k, t_0+\tau) \simeq f(x(t_0), t_0) + k f_x(x(t_0), t_0) + \tau f_t(x(t_0), t_0) \ ;$$

Με αυτή την κλίση θα έχουμε

$$x(t_0+\delta) = x(t_0) + \delta f(x(t_0), t_0) + \delta k f_x(x(t_0), t_0) + \delta\tau f_t(x(t_0), t_0) + \ldots$$

Αρκεί λοιπόν να επιλέξουμε

$$k = \frac{\delta}{2} f(x(t_0), t_0) \quad , \quad \tau = \frac{\delta}{2} \tag{2}$$

και πιάσαμε ατόφιο τον δ^2 όρο!

Παρατήρηση: Η επιλογή για το k είναι $\delta/2$ φορές το $\dot{x}(x(t_0), t_0)$. Δηλαδή

$$x(t_0 + \delta) = x(t_0) + \delta\, f\left(x(t_0) + \frac{\delta}{2} f(x(t_0), t_0), t_0 + \frac{\delta}{2}\right)$$

για να "πιαστεί" σωστά ο δ^2 όρος.

Δίδαγμα και πιθανό σενάριο: Ίσως καταφέρουμε να πιάσουμε όρους ανώτερης τάξης ως προς δ ακολουθώντας μια επαναληπτική μέθοδο της μορφής

$$x(t_0 + \delta) = x(t_0) + \delta\, H$$

με

$$H = \sum_{j=1}^{N} a_j h_j$$

$$\begin{aligned} h_1 &= f(x(t_0), t_0) \\ h_2 &= f(x(t_0) + b_1 h_1 \delta, t_0 + c_1 \delta) \\ h_3 &= f(x(t_0) + b_2 h_2 \delta, t_0 + c_2 \delta) \\ &\dots \end{aligned}$$

Το ζητούμενο είναι τα βάρη a_j και οι κατάλληλοι συντελεστές προώθησης των κλίσεων b_j, c_j.
Στόχος είναι να πετύχουμε τους όρους του αναπτύγματος Taylor της $x(t_0+\delta)$ γύρω από το $\delta = 0$:

$$x(t_0+\delta) = x_0 + \delta\, x_0' + \frac{\delta^2}{2} x_0'' + \frac{\delta^3}{6} x_0''' + \frac{\delta^4}{24} x_0'''' + \dots$$

όπου με $'$ εννοούμε παράγωγο ως προς t και με $_0$ εννοούμε ;ότι το υπολογίζουμε στο $x(t_0)$ και t_0. Προφανώς $A' = A_{,x} f_0 + A_{,t}$.
Συνεπώς θα είναι:

$$\begin{aligned}
x_0' &= f(x_0, t_0) = f_0 \\
x_0'' &= f_{0,x}\, f_0 + f_{0,t} \\
x_0''' &= f_{0,xx}\, f_0^2 + 2 f_{0,xt}\, f_0 + f_{0,x}^2\, f_0 + f_{0,x} f_{0,t} + f_{0,tt} \\
x_0'''' &= f_{0,xxx}\, f_0^3 + 3 f_{0,xxt}\, f_0^2 + 3 f_{0,xtt}\, f_0 + f_{0,ttt} + f_{0,xx}\,(4 f_{0,x}\, f_0^2 + 3 f_{0,t}\, f_0) \\
&\quad + f_{0,xt}(5 f_{0,x} f_0 + 3 f_{0,t}) + f_{0,x}^3\, f_0 + f_{0,x}^2\, f_{0,t} + f_{0,x}\, f_{0,tt}
\end{aligned}$$

Ας ανακτήσουμε με τη συστηματική μας μέθοδο το αποτέλεσμα που βγάλαμε (κάπως τυχαία) παραπάνω: Τον δ^2 όρο ακριβώς.
Για το λόγο αυτό ας λάβουμε ακριβώς δύο όρους προώθησης h_1, h_2.
Αναπτύσσοντας τον όρο h_2 μέχρι πρώτης τάξης

$$h_2 = f_0 + \delta(f_{0,x} b_1 f_0 + f_{0,t} c_1) + \mathcal{O}(\delta^2)$$

οπότε

$$x(t_0 + \delta) = x_0 + \delta(a_1 + a_2) f_0 + \delta^2 a_2 (f_{0,x} b_1 f_0 + f_{0,t} c_1) + \mathcal{O}(\delta^3).$$

Το ζητούμενο είναι οι συντελεστές των $\delta f_0, \delta^2 f_{0,x}, \delta^2 f_{0,t}$ να ταιριάζουν ακριβώς με τους συντελεστές των αντίστοιχων ποσοτήτων στο ακριβές ανάπτυγμα του $x(t_0+\delta)$ της (10):

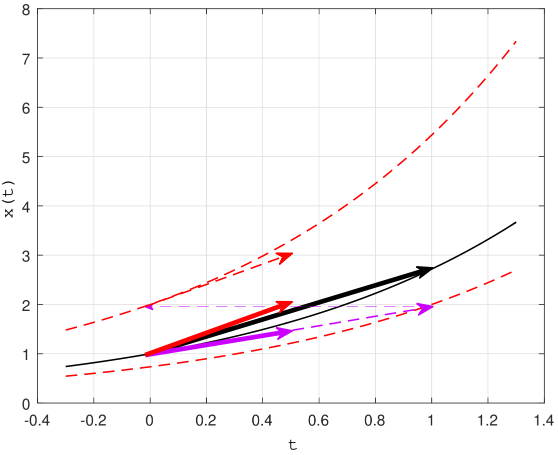
$$x_0 + \delta f_0 + \frac{\delta^2}{2}(f_0 f_{0,x} + f_{0,t}) =$$
$$x_0 + \delta(a_1 + a_2) f_0 + \delta^2 a_2 (b_1 f_{0,x} f_0 + c_1 f_{0,t})$$

Με άλλα λόγια:

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 &= 1 \\ a_2 b_1 &= 1/2 \\ a_2 c_1 &= 1/2 \end{aligned}$$

3 εξισώσεις 4 αγνώστους! ...άπειρες λύσεις, μία εκ των οποίων είναι η $a_1 = 0, a_2 = 1, b_1 = c_1 = 1/2$ που βρήκαμε στην (2).

- Μια 2η απλή λύση είναι να επιλέξουμε $a_1 = a_2 = 1/2, b_1 = c_1 = 1$ δηλαδή να πάρουμε τον μέσο όρο των κλίσεων στο $(x, t) = (0, 0)$ και στο $(x, t) = (h_1\delta, \delta)$. Η λύση αυτή προωθεί τα πάντα κατά δ αλλά επιλέγει να προωθήσει και τη "θέση" και την "ταχύτητα" εξίσου (Feynman).
- Προφανώς υπάρχουν άπειρες άλλες, αλλά λιγότερο συμμετρικές από τις παραπάνω...



Σχήμα 2: ‘Feynman’ έναντι ακριβούς. Βήμα $\delta = 1$ (σφάλμα: $e - 2.5 = 0.217$). Στη διαγραμματική απεικόνιση τα διακεκομμένα βέλη δείχνουν τις κατευθύνσεις (αρχική-μωβ και μεταγενέστερη-κόκκινη) ενώ τα ολόκληρα βέλη δείχνουν τις προωθήσεις με τα σχετικά βάρη a_i.

...και αν στόχος είναι και ο 3ης τάξης όρος δ^3;

$$\ldots + \frac{\delta^3}{6}(f_0^2 f_{0,xx} + f_0 f_{0,x}^2 + 2f_0 f_{0,xt} + f_{0,x} f_{0,t} + f_{0,tt}) =$$

$$x_0 + \delta(a_1 h_1 + a_2 h_2 + a_3 h_3) =$$

$$x_0 + \delta(a_1 + a_2 + a_3) f_0 + \delta^2 (f_{0,x}(a_2 h_1 b_1 + a_3 h_2 b_2) + f_{0,t}(a_2 c_1 + a_3 c_2)$$

$$+\delta^3 \ldots$$

$$x_0 + \delta(a_1 + a_2 + a_3) f_0 + \delta^2 (f_{0,x}(a_2 b_1 + a_3 b_2) f_0 + f_{0,t}(a_2 c_1 + a_3 c_2) +$$

$$\delta^3 \Bigg(f_{0,xx} \, \frac{a_2 b_1^2 h_1^2 + a_3 b_2^2 h_2^2}{2} + f_{0,tt} \frac{a_2 c_1^2 + a_3 c_2^2}{2} +$$

$$f_{0,xt}(a_2 b_1 c_1 h_1 + a_3 b_2 c_2 h_2) + a_3 b_2^2 f_{0,x}^2 h_1 + a_3 b_2 f_{0,x} f_{0,t} \, c_2 \Bigg) =$$

$$x_0 + \delta(\ldots) + \delta^2 (\ldots) +$$

$$\delta^3 \Bigg(f_{0,xx} f_0^2 \frac{a_2 b_1^2 + a_3 b_2^2}{2} + f_{0,tt} \frac{a_2 c_1^2 + a_3 c_2^2}{2} + f_{0,xt} f_0 (a_2 b_1 c_1 + a_3 b_2 c_2)$$

$$+ f_{0,x}^2 f_0 \; a_3 b_2^2 + f_{0,x} f_{0,t} \; a_3 b_2 c_2 \Bigg)$$

Συμπέρασμα (δ^3):

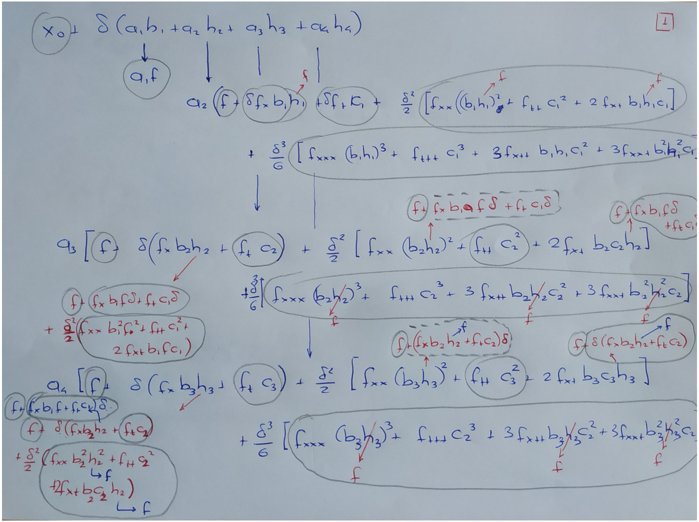
$$
\begin{aligned}
a_1 + a_2 + a_3 &= 1 && (3)\\
a_2 b_1 + a_3 b_2 &= 1/2 && (4)\\
a_2 c_1 + a_3 c_2 &= 1/2 && (5)\\
a_2 b_1^2 + a_3 b_2^2 &= 1/3 && (6)\\
a_2 c_1^2 + a_3 c_2^2 &= 1/3 && (7)\\
a_2 b_1 c_1 + a_3 b_2 c_2 &= 1/3 && (8)\\
a_3 b_2^2 &= 1/6 && (9)\\
a_3 b_2 c_2 &= 1/6 && (10)
\end{aligned}
$$

7 αγνώστους για 8 μη γραμμικές εξισώσεις! (μήπως δεν γίνεται?) Από (6,9) $a_2 b_1^2 = 1/6$ και από (8,10) $a_2 b_1 c_1 = 1/6$, οπότε $b_1 = c_1$. Προχωρώντας με την υπόθεση (ασυμμετρίας $k, p \neq 1$) $b_2 = k b_1$, $c_2 = p c_1$, βρίσκουμε (από (4,5)) τελικά $k = p$ (η συμμετρία μόνο επιβιώνει και οι εξισώσεις μειώνονται αισθητά: υπερπροσδ. ΜΓ σύστημα με 4 εξισώσεις και 5 αγνώστους).

$$
\begin{aligned}
a_2 &= \frac{3k^2}{2(k+1)^2} \\
a_3 &= \frac{3}{2(k+1)^2} \\
a_1 &= \frac{-k^2 - 1 + 4k}{2(k+1)^2} \\
b_1 = c_1 &= \frac{k+1}{3k} \\
b_2 = c_2 &= \frac{k+1}{3}
\end{aligned}
$$

π.χ. για $k = 1$: $a_2 = a_3 = 3/8$, $a_1 = 1/4$, $b_1 = c_1 = b_2 = c_2 = 2/3$, ενώ για $k = 2$: $a_1 = a_3 = 1/6$, $a_2 = 2/3$, $b_1 = c_1 = 1/2$, $b_2 = c_2 = 1$.

Τέλος αν ζητήσουμε να “πιάσουμε” και τον δ^4 όρο θα καταλήξουμε με αντίστοιχο τρόπο στο ακόλουθο σύστημα: ...



Τέλος αν ζητήσουμε να “πιάσουμε” και τον δ^4 όρο θα καταλήξουμε με αντίστοιχο τρόπο στο ακόλουθο σύστημα: ...

$$x_0 + \delta(a_1 + a_2 + a_3 + a_4) f_0$$

$$+ \delta^2 \big(a_2 f_x b_1 f + a_2 f_t c_1 + a_3 f_x b_2 f + f_t c_2 a_3$$

$$+ a_4 f_x b_3 f + a_4 c_3 f_t\big)$$

$$+ \delta^3 \Big[\frac{a_2}{2}\left(f_{xx} b_1^2 f^2 + f_{tt} c_1^2 + 2 f_{xt} b_1 c_1 f\right)$$

$$+ \frac{a_3}{2}\left(f_{xx} b_2^2 f^2 + f_{tt} c_2^2 + 2 f_{xt} b_2 c_2 f\right)$$

$$+ \frac{a_4}{2}\left(f_{xx} b_3^2 f^2 + f_{tt} c_3^2 + 2 f_{xt} b_3 c_3 f\right)$$

$$+ a_3\left(f_x b_2 (f_x b_1 f + f_t c_1)\right)$$

$$+ a_4\left(f_x b_3 (f_x b_2 f + f_t c_2)\right)\Big]$$

$$+ \dots$$

Τέλος αν ζητήσουμε να “πιάσουμε” και τον δ^4 όρο θα καταλήξουμε με αντίστοιχο τρόπο στο ακόλουθο σύστημα: ...

3

$$
\begin{aligned}
+\ \delta^4 \Bigg\{ & \frac{a_2}{6}\left[f_{xxx} b_1^3 f^3 + f_{ttt} c_1^3 + 3 f_{xtt} b_1 c_1^2 f + 3 f_{xxt} b_1^2 c_1 f^2 \right] \\
& + \frac{a_3}{6}\left[f_{xxx} b_2^3 f^3 + f_{ttt} c_2^3 + 3 f_{xtt} b_2 c_2^2 f + 3 f_{xxt} b_2^2 c_2 f^2 \right. \\
& + \frac{a_4}{6}\left[f_{xxx} b_3^3 f^3 + f_{ttt} c_3^3 + 3 f_{xtt} b_3 c_3^2 f + 3 f_{xxt} b_3^2 c_3 f^2 \right] \\
& + \frac{a_3}{2}\left[f_{xx} b_2^2 \left(2 f f_x f b_1 + 2 f f_t c_1\right) + 2 f_{xt} b_2 c_2 \left(f_x b_1 f + f_t c_1\right) \right. \\
& + \frac{a_4}{2}\left[f_{xx} b_3^2 \left(2 f f_x f b_2 + 2 f f_t c_2\right) + 2 f_{xt} b_3 c_3 \left(f_x b_2 f + f_t c_2\right) \right. \\
& + a_3 \left[f_x b_2 \frac{1}{2} \left(f_{xx} b_1^2 f^2 + f_{tt} c_1^2 + 2 f_{xt} b_1 c_1 f \right) \right] \\
& + a_4 \left[f_x b_3 \frac{1}{2} \left(f_{xx} b_2^2 f^2 + f_{tt} c_2^2 + 2 f_{xt} b_2 c_2 f \right) \right] \\
& + a_4 \left[f_x b_3 f_x b_2 \left(f_x b_1 f + f_t c_1 \right) \right] \Bigg\}
\end{aligned}
$$

Τέλος αν ζητήσουμε να “πιάσουμε” και τον δ^4 όρο θα καταλήξουμε με αντίστοιχο τρόπο στο ακόλουθο σύστημα: ...

απο Taylor

$\frac{1}{24} = f_{xxx} f^3$ $\quad \frac{1}{8} = f_{xxt} f^2$ $\quad \frac{1}{8} = f_{xtt} f_0$ $\quad \frac{1}{24} = f_{ttt}$

$\frac{1}{6} = f_{xx} f_x f^2$ $\quad \frac{1}{8} = f_{xx} f_t f$ $\quad \frac{5}{24} = f_{xt} f_x f$ $\quad \frac{1}{8} = f_t f_{xt}$.

$\frac{1}{24} = f_x^3 f$ $\quad \frac{1}{24} = f_x^2 f_t$ $\quad \frac{1}{24} = f_x f_{tt}$

Τέλος αν ζητήσουμε να "πιάσουμε" και τον δ^4 όρο θα καταλήξουμε με αντίστοιχο τρόπο στο ακόλουθο σύστημα: ...

$$a_1 + a_2 + a_3 + a_4 = 1 \qquad (1)$$

$$a_4 b_3 + a_2 b_1 + a_3 b_2 = \frac{1}{2} \qquad (2)\ f_x f$$

$$a_4 c_3 + a_2 c_1 + a_3 c_2 = \frac{1}{2} \qquad (2)\ f_t$$

$$a_2 b_1^2 + a_3 b_2^2 + a_4 b_3^2 = \frac{1}{3} \quad \checkmark \quad (3)\ f_{xx} f^2$$

$$a_2 c_1^2 + a_3 c_2^2 + a_4 c_3^2 = \frac{1}{3} \quad \checkmark \quad (3)\ f_{tt}$$

$$a_2 b_1 c_1 + a_3 b_2 c_2 + a_4 b_3 c_3 = \frac{1}{3} \quad \checkmark \quad (3)\ f_{xt} f.$$

$$a_3 b_2 b_1 + a_4 b_3 b_2 = \frac{1}{6} \quad \checkmark \quad (3)\ f_x^2 f.$$

$$a_3 b_2 c_1 + a_4 b_3 c_2 = \frac{1}{6} \qquad (3)\ f_x f_t$$

Τέλος αν ζητήσουμε να "πιάσουμε" και τον δ^4 όρο θα καταλήξουμε με αντίστοιχο τρόπο στο ακόλουθο σύστημα: ...

$a_2 b_1^3 + a_3 b_2^3 + a_4 b_3^3 = \frac{1}{4}$ ✓ (4) $f_{xxx} f^3$

$a_2 c_1^3 + a_3 c_2^3 + a_4 c_3^3 = \frac{1}{4}$ ✓ (4) f_{ttt}

$a_2 b_1 c_1^2 + a_3 b_2 c_2^2 + a_4 b_3 c_3^2 = \frac{1}{4}$ ✓ (4) $f_{xtt} f$

$a_2 b_1^2 c_1 + a_3 b_2^2 c_2 + a_4 b_3^2 c_3 = \frac{1}{4}$ ✓ (4) $f_{xxt} f^2$

$a_3 \frac{b_2 b_1^2}{2} + a_4 \frac{b_3 b_2^2}{2} + a_3 b_1 b_2^2 + a_4 b_2 b_3^2 = \frac{1}{6}$ ✓ (4) $f_{xx} f_x f^2$

$a_3 b_2^2 c_1 + a_4 b_3^2 c_2 = \frac{1}{8}$ ✓ (4) $f_{xx} f_t f$

$a_3 \frac{b_2 c_1^2}{2} + a_4 \frac{b_3 c_2^2}{2} = \frac{1}{12}$ ✓ (4) $f_x f_{tt}$

$a_3 b_2 b_1 c_1 + a_4 b_2 c_2 b_3 + a_3 b_2 c_2 b_1 + a_4 b_3 c_3 b_2 = \frac{5}{24}$ ✓ (4) $f_{xt} f f_x$

$a_4 b_3 b_2 b_1 = \frac{1}{24}$ (4) $f_x^3 f$

$a_4 b_2 b_3 c_1 = \frac{1}{24}$ (4) $f_x^2 f_t$

$a_3 b_2 c_2 c_1 + a_4 b_3 c_3 c_2 = \frac{1}{8}$ (4) $f_{xt} f_t$

Συμπέρασμα (δ^4):

$$
\begin{aligned}
a_1 + a_2 + a_3 + a_4 &= 1 && (11)\\
a_2 b_1 + a_3 b_2 + a_4 b_3 &= 1/2 && (12)\\
a_2 c_1 + a_3 c_2 + a_4 c_3 &= 1/2 && (13)\\
a_2 b_1^2 + a_3 b_2^2 + a_4 b_3^2 &= 1/3 && (14)\\
a_2 c_1^2 + a_3 c_2^2 + a_4 c_3^2 &= 1/3 && (15)\\
a_2 b_1 c_1 + a_3 b_2 c_2 + a_4 b_3 c_3 &= 1/3 && (16)\\
a_3 b_2 b_1 + a_4 b_3 b_2 &= 1/6 && (17)\\
a_3 b_2 c_1 + a_4 b_3 c_2 &= 1/6 && (18)\\
a_2 b_1^3 + a_3 b_2^3 + a_4 b_3^3 &= 1/4 && (19)\\
a_2 c_1^3 + a_3 c_2^3 + a_4 c_3^3 &= 1/4 && (20)\\
a_2 b_1 c_1^2 + a_3 b_2 c_2^2 + a_4 b_3 c_3^2 &= 1/4 && (21)\\
a_2 b_1^2 c_1 + a_3 b_2^2 c_2 + a_4 b_3^2 c_3 &= 1/4 && (22)\\
a_3 b_1 b_2 (b_2 + b_1/2) + a_4 b_2 b_3 (b_3 + b_2/2) &= 1/6 && (23)\\
a_3 b_2^2 c_1 + a_4 b_3^2 c_2 &= 1/8 && (24)\\
a_3 b_2 c_1^2 + a_4 b_3 c_2^2 &= 1/12 && (25)\\
a_3 b_1 b_2 (c_1 + c_2) + a_4 b_2 b_3 (c_2 + c_3) &= 5/24 && (26)\\
a_3 b_2 c_1 c_2 + a_4 b_3 c_2 c_3 &= 1/8 && (27)\\
a_4 b_1 b_2 b_3 = a_4 b_2 b_3 c_1 &= 1/24 && (28)
\end{aligned}
$$

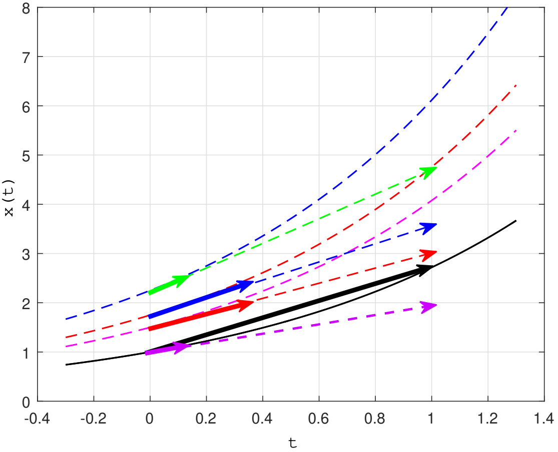
Οι παραπάνω 19 αλγεβρικές ΜΓ εξισώσεις με 10 αγνώστους μοιάζει αδύνατη (υπερπροσδιορισμένη), αλλά όπως και προηγουμένως η συμμετρία που εμφανίζει μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να μειωθούν οι εξισώσεις (και οι άγνωστοι).
Ως δια μαγείας όλες οι παραπάνω σχέσεις ικανοποιούνται από την πολύ συμμετρική επιλογή

$$a_1 = \frac{a_2}{2} = \frac{a_3}{2} = a_4 = 1/6 \tag{29}$$

$$b1 = c_1 = b_2 = c_2 = 1/2 \tag{30}$$

$$b_3 = c_3 = 1 \tag{31}$$

που δεν είναι άλλη από την μέθοδο Runge-Kutta 4ης τάξης.



Σχήμα 3: 'Runge-Kutta 4' έναντι ακριβούς. Βήμα $\delta = 1$ (σφάλμα: $e - \frac{65}{24} = 0.01$). Τα βέλη αντιστοιχούν στις 4 κλίσεις και τα μεγέθη τους στα σχετικά βάρη a_i.

Ας φτιάξουμε τώρα τη δική μας RK 4ης τάξης:

- Αν στις εξισώσεις (11-28) θέσουμε $b_2 = \kappa b_1, b_3 = k b_1$, και $c_2 = \lambda c_1, c_3 = l c_1$ βρίσκουμε (εύκολα) ότι $c_1 = b_1$, $\kappa = \lambda$, και $k = l$ (η πλέον συμμετρική συσχέτιση).
- Στη συνέχεια θέτοντας $b_1 = x/2$ βρίσκουμε:

$$\begin{aligned}
\kappa = \lambda &= 3 - 2x \\
k = l &= 6 - 8x + 4x^2 \\
a_4 &= 1/(3x^3 \kappa k) \\
a_3 &= (2x - 1)/(3x^3(3 - 2x)) \\
a_2 &= g(x)/(3x^3 \kappa) \\
a_1 &= 1 - a_2 - a_3 - a_4
\end{aligned}$$

Δυστυχώς η συνάρτηση $g(x)$ έχει διαφορετική έκφραση προκειμένου να ικανοποιεί το σετ (12-13), ή το σετ (14-16), ή το σετ (19-22). Η συνάρτηση έχει ίδια τιμή και για τις 3 εκφράσεις **μόνο για** $x = 1$.

- Σύνοψη περί RK4: Για ένα μη-αυτόνομο σύστημα σαν αυτό που εξετάσαμε δεν υπάρχει εναλλακτική μέθοδος με ακρίβεια δ^4 πέραν της τυποποιημένης RK4 με $a_1 = a_2/2 = a_3/3 = a_4 = 1/6$ και $b_1 = b_2 = c_1 = c_2 = 1/2$, $b_3 = c_3 = 1$. Κάθε προσπάθεια για άλλο σχήμα RK4 οδηγεί σε ταυτόχρονη ικανοποίηση όλων των εξισώσεων (11-28) εκτός των (14-16/19-22) αν $g(x) = 3x^2\kappa - 4 + k$, εκτός των (12-13/19-22) αν $g(x) = 4x\kappa - k - \kappa(3 - k)$, ή εκτός των (12-13/14-16) αν $g(x) = 6\kappa - k^2 - \kappa^2(3 - k)$.
- Προσοχή: Τα παραπάνω αποτελέσματα ισχύουν μόνο για ένα μη αυτόνομο σύστημα όπου εμπλέκονται και οι χρονικές μετατοπίσεις c_i. Αν το σύστημα είναι αυτόνομο θα πρέπει οι υπολογισμοί να γίνουν εκ νέου. Στην περίπτωση αυτή (λύνοντας τις (11-28) με $c_i = 0$) οδηγούμαστε όχι μόνο στην τυποποιημένη RK4 αλλά και σε 2 ολόκληρους κλάδους μονοπαραμετρικών λύσεων (βολική παράμετρος η $x = 2b_1$). Η τυποποιημένη RK4 βρίσκεται πάνω στον 1 τέτοιο κλάδο.

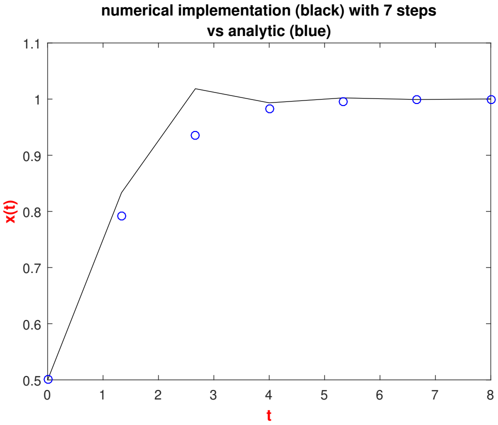
Προγράμματα

Θα ολοκληρώσουμε την λογιστική με διάφορες RK: RK1 (Euler), RK2a,b (Feynman), RK4,x (τυποποιημένη και δική σας).

Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

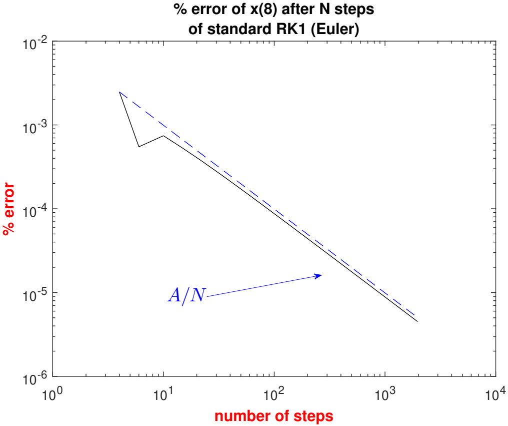
Euler (RK1)



Σχήμα 4: Εφαρμογή της RK1 με 8 βήματα. Οι κύκλοι είναι τα σημεία της αναλυτικής λύσης.

Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

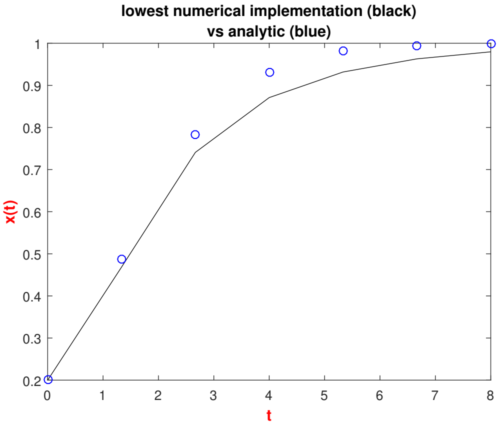
Euler RK1



Σχήμα 4: Το σχετικό λάθος εύρεσης του $x(8)$ με διαφορετικό αριθμό βημάτων.

Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

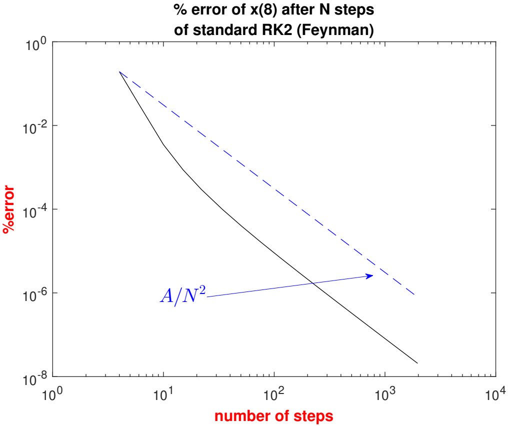
Feynman (RK2)



Σχήμα 4: Εφαρμογή της RK2a με 6 βήματα. Οι κύκλοι είναι τα σημεία της

Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

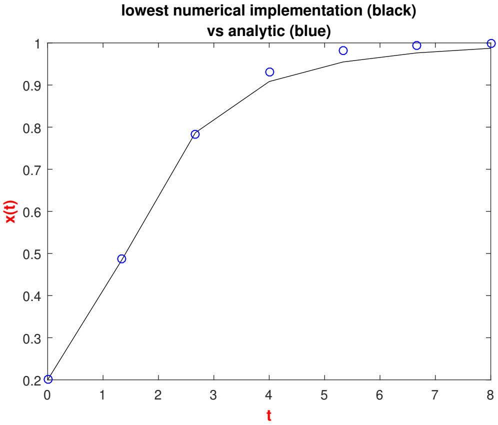
Feynman (RK2)



Σχήμα 4: Το σχετικό λάθος εύρεσης του $x(8)$ με διαφορετικό αριθμό

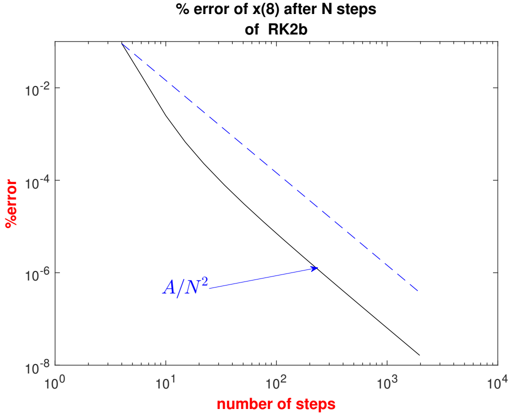
Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

Εναλλακτική RK2b ($a_1 = 0, a_2 = 1, b_1 = c_1 = 1/2$)



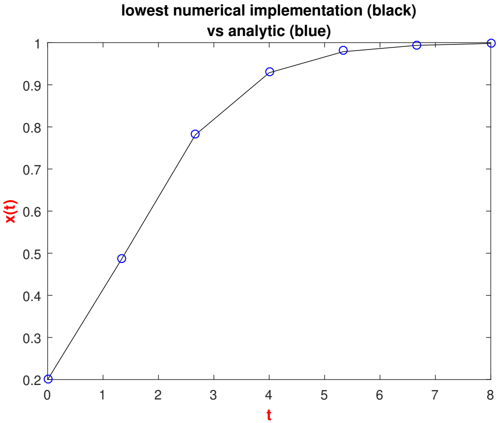
Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

Εναλλακτική RK2b ($a_1 = 0, a_2 = 1, b_1 = c_1 = 1/2$)



Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

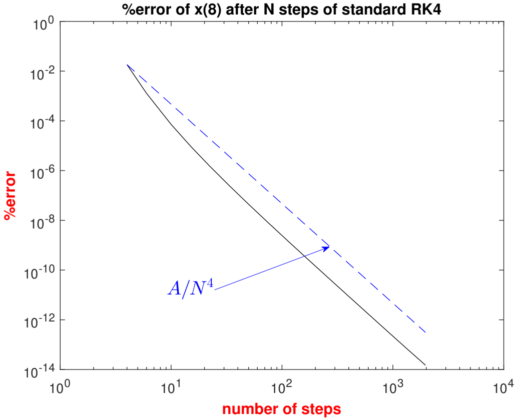
Τυποποιημένη RK4



Σχήμα 4: Εφαρμογή της RK4 (τυποποιημένη) με 6 βήματα. Οι κύκλοι είναι τα σημεία της αναλυτικής λύσης.

Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

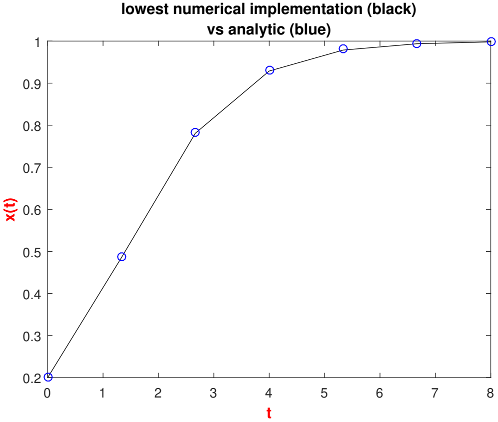
Τυποποιημένη RK4



Σχήμα 4: Το σχετικό λάθος εύρεσης του $x(8)$ με διαφορετικό αριθμό βημάτων.

Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

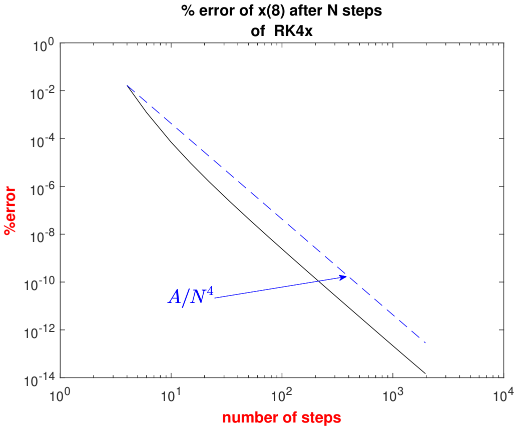
Εναλλακτική RK4



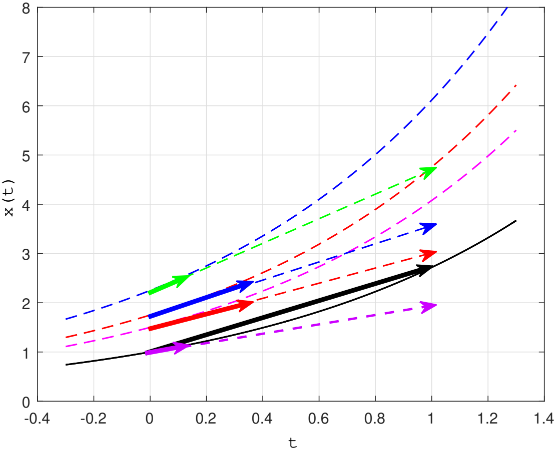
Σχήμα 4: Εφαρμογή της RK4 (εναλλακτική με $b_1 = 0.45$) με 6 βήματα. Οι κύκλοι είναι τα σημεία της αναλυτικής λύσης.

Λογιστική με $x(0) = 0.2$, εύρεση του $x(8)$ με N βήματα.

Τυποποιημένη RK4



Σχήμα 4: Το σχετικό λάθος εύρεσης του $x(8)$ με διαφορετικό αριθμό βημάτων



Σχήμα 5: ‘Runge-Kutta 4’ έναντι ακριβούς. Βήμα $\delta = 1$ (σφάλμα: $e - \frac{65}{24} = 0.01$). Τα βέλη αντιστοιχούν στις 4 κλίσεις και τα μεγέθη τους στα σχετικά βάρη a_i.

The solution of an autonomous system. One has to solve simultaneously the system of Eqs. (11-12,13,17,19,23,28a). It's a sytem of 7 NL algebraic eqs with 7 unknowns $(a_1, a_2, a_3, a_4, b_1, b_2, b_3)$. To solve them we substitute $x = 2b_1$, $b_2 = \kappa b_1$, $b_3 = kb_1$ and solve the last 6.

Immediate results: (from 28a,23,17)

$$\begin{aligned} k &= (0.5 - 2x)\kappa + (4.5 - x) \\ a_4 k\kappa &= 1/(3x^3) \\ a_3\kappa &= (2x-1)/(3x^3) \end{aligned}$$

Then (12,14,19 in pairs) lead to

$$\begin{aligned} (2x-1)\kappa^2 + (3x^2 - 8x + 1.5)\kappa + (3.5 - x) &= 0 \\ (2x-1)\kappa^3 + (0.5-2x)^2\kappa^2 + (7x^2 - 21x - 0.5)\kappa + (3.5-x)(5.5-x) &= 0 \end{aligned}$$

The last 2 eqs with respect to κ should be true simultaneously. This leads to 3 solutions. One of them is the standard RK4 ($x = 1$). The other 2 can be found graphically. Finally for each solution

$$\begin{aligned} a_2 &= 1/x - a_3\kappa - a_4 k \\ a_1 &= 1 - a_2 - a_3 - a_4 \end{aligned}$$

I have found graphically 3 solutions beyond standard RK4.

$$\begin{aligned} x &\simeq 1.3123 \qquad & \kappa &\simeq 1.38985 \\ x &\simeq 0.582 \qquad & \kappa &\simeq 1.54711 \\ x &\simeq 0 \qquad & \kappa &\simeq 3.5 \end{aligned}$$

The last one is singular.
It's interesting that values of x near 1 although they destroy the algebraic system it does not harm it drastically and the error still behave like N^{-4}! This small discrepancy is not clear in the diagrams of RK4x.