Модуль 16. Методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений и систем

Постановка задачи. Истинная и численная траектории. Шаг метода и шаг интегрирования. Счет с выходом на границу, счет на установление и другие критерии остановки счета. Одношаговые и многошаговые методы. Примеры явных одношаговых методов, их каноническая запись. Метод Рунге-Кутта 4-го порядка.

Глобальная и локальная погрешность метода. Порядок малости локальной погрешности и порядок метода. Контроль локальной погрешности за счет двойного счета с половинным шагом. Базовая схема счета, счет с корректировкой значений. Контроль локальной погрешности за счет методов разных порядков. Метод Рунге-Кутта-Мерсона.

Порядок метода и порядок малости глобальной погрешности. Поведение глобальной погрешности на участках численной траектории. Методы решения задачи Коши для систем ОДУ. Анализ малости локальной погрешности и порядка методов. Обоснование контроля погрешности за счет двойного счета с половинным шагом.

Свойства жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Пример жесткой системы ОДУ. Решение задачи Коши для жесткой системы явным и неявным методами (на примере метода Эйлера).

Постановка задачи. Основные термины и критерии остановки счета

Рассмотрим задачу Коши для обыкновенного дифференциального уравнения (ОДУ)

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = f(x, u) \\ u(x_0) = u_0 \end{cases} \tag{16.1}$$

Считаем, что на фазовой плоскости (x,u) в окрестности точки (x_0,u_0) условия теоремы существования и единственности решения задачи Коши выполнены.

Решение задачи Коши обозначим u(x) и называем его истинным решением.

На фазовой плоскости (x,u) траектория (x,u(x)) проходит через точку (x_0,u_0) .

Эту траекторию будем называть истинной траекторией,

Численно на фазовой плоскости шаг за шагом можно строить последовательность

$$(x_0,v_0), (x_1,v_1), (x_2,v_2), \dots (x_n,v_n), (x_{n+1},v_{n+1}),\dots$$

которую называют численной траекторией задачи Коши.

Зависимость v(x) называем численным решением.

Начальную точку последовательности выбирают в соответствии с начальным условием задачи Коши:

$$(x_0,v_0) = (x_0,u_0)$$
.

Значения аргумента x для точек численной траектории вычисляются по формуле

$$x_{n+1} = x_n + h_n$$
, $n = 0, 1, 2...$

Эти значения образуют **сетку** по аргументу x.

Значение h_n называют шагом численного интегрирования на шаге метода с номером n+1.

Значение v_{n+1} получено на шаге метода с номером n+1, его называют численным решением при $x=x_{n+1}$.

Численная траектория может иметь постоянный шаг $h_n = h = const$ либо шаг интегрирования может меняться.

В этих случаях сетку по аргументу x называют равномерной или неравномерной соответственно.

Перечислим некоторые критерии остановки счета.

Последняя (вычисляемая) точка численной траектории – обозначим ее (x_N, v_N) – определяется условиями и смыслом задачи.

В этой связи различают

- 1) счет с выходом на правую границу X по аргументу x;
- 2) счет с выходом на значение U искомой функции u(x) (снизу или сверху);
- 3) счет на установление;
- 4) счет с ограничением на максимальное число шагов метода ($N \le N_{\max}$);
- 5) выполнение заданного числа шагов метода (N) и др.

Рассмотрим варианты.

1) Если задача содержит условие $x \in [x_0, X]$, необходимо выбрать малый параметр $\varepsilon_{cp} > 0$, отвечающий за погрешность выхода на правую границу отрезка интегрирования.

Если на шаге с номером N оказалось, что $x_N \in [X - \varepsilon_{\mathcal{Z}p}, X]$, точку (x_N, v_N) необходимо вычислить и затем прекратить счет, так как численная траектория вышла на правую границу по аргументу x (подошла к числу X) с погрешностью не более $\varepsilon_{\mathcal{Z}p}$.

Продолжение счета при x>X может быть нецелесообразным, так как истинное решение задачи Коши при x>X может не существовать.

2) Счет с выходом на значение U искомой функции u(x) выполняется аналогично: необходимо выбрать малый параметр $\varepsilon_{\it 2D}>0$, отвечающий за погрешность.

Рассмотрим выход на значение U «снизу».

Если на шаге с номером N оказалось, что $v_N \in [U-\varepsilon_{zp},U]$, точку (x_N,v_N) необходимо вычислить и затем прекратить счет, так как численная траектория вышла на значение U «снизу» с погрешностью не более ε_{zp} .

Если нужен выход на значение U «сверху», используется критерий $v_N \in [U, U + \varepsilon_{2n}]$

3) Термин «счет на установление» означает, точки численной траектории следует вычислять до тех пор, пока численная траектория не выйдет на стационарный, периодический или иной интересный исследователю режим, или до тех пор, пока счет не будет остановлен пользователем по иной причине.

Счет на установление позволяет численно обнаружить возможные устойчивые стационарные и периодические режимы, а также выход траектории «в бесконечность». Такой способ счета был предложен Адамсом (1850).

- 4) Ограничение на максимальное число шагов метода ($N \leq N_{\rm max}$) используется в сочетании с любым из вариантов 1)—3). Если нужно запоминать все точки численной траектории, такое ограничение нужно для управления памятью.
- 5) Выполнение заранее заданного числа шагов метода (N) применяется при сопоставлении свойств численных методов, проверке производительности вычислительных систем и при отладке программ.

Одношаговые и многошаговые методы решения задачи Коши

Определение. Численный метод решения задачи (16.1) называется k-шаговым, $k \ge 1$, если при вычислении каждой следующей точки численной траектории – обозначим ее (x_{n+1}, v_{n+1}) – используются k предшествующих точек, а именно, точки

$$(x_n, v_n), (x_{n-1}, v_{n-1}), ...(x_{n-k+1}, v_{n-k+1}).$$

Одношаговые методы (к ним относится широкий класс численных методов типа Рунге-Кутта) при вычислении точки (x_{n+1},v_{n+1}) используют только текущую точку (x_n,v_n) численной траектории.

Точность методов типа Рунге-Кутта обеспечивается тем, что при вычислении каждой следующей точки (x_{n+1},v_{n+1}) проводится несколько замеров **поля направлений** в окрестности текущей точки (x_n,v_n) .

Для этого в точках, близких (x_n, v_n) , несколько раз вычисляется заданная (известная) правая часть дифференциального уравнения f(x,u).

Многошаговые методы (например, методы Адамса-Башфорта, Милна, Хэмминга и др.) при вычислении точки (x_{n+1}, v_{n+1}) используют k>1 предшествующих точек.

Первые k точек, необходимые для запуска k-шагового метода и расчета точки (x_{k+1}, v_{k+1}) , должны быть вычислены иным способом – например, одношаговым методом.

В многошаговых методах вычисляемая точка (x_{n+1},v_{n+1}) и необходимые для ее расчета предшествующие k точек должны быть равноудалены по аргументу x:

$$x_{n+1} - x_n = x_n - x_{n-1} = \dots = x_{n-k+2} - x_{n-k+1} = h$$
.

В силу этого обстоятельства при изменении шага численного интегрирования для продолжения счета необходим пересчет предшествующих точек, что должно быть учтено в программной реализации.

Таким образом, одношаговые методы оказываются более трудоемкими (на каждом шаге метода несколько раз вычисляется правая часть дифференциального уравнения), а многошаговые методы — менее гибкими при управлении шагом и более сложными в программной реализации.

Комментарии

Исторически первый метод – метод Эйлера (1758) – формально относится и к одношаговым, и к многошаговым методам.

Многошаговые методы были впервые предложены в середине XIX века (Адамс, Башфорт), одношаговые – в конце XIX – начале XX веков (Рунге и Кутта).

Далее рассматриваются одношаговые методы типа Рунге-Кутта, получившие со второй половины XX века и до настоящего времени значительное распространение в связи с развитием вычислительной техники, удобством программной реализации и гибкостью при управлении шагом интегрирования.

В связи с приложениями разработаны явные и неявные методы типа Рунге-Кутта высокой точности (высокого порядка). Например, такие, как метод Рунге-Кутта 4-го порядка, метод Рунге-Кутта-Мерсона, неявные методы оптимального порядка.

При расчетах решений задачи Коши в системах ОДУ с большим числом уравнений на высокопроизводительных вычислительных системах часто используются удобные в реализации одношаговые методы невысокого порядка. Точность достигается за счет малого шага численного интегрирования.

Многошаговые методы рекомендуется использовать в тех случаях, когда вычисление f(x,u) является трудоемким и дополнительные замеры нежелательны.

Кроме того, многошаговые методы используются при разработке разностных схем для численного решения уравнений в частных производных.

Примеры одношаговых методов типа Рунге-Кутта, канонический вид явных методов

Приведем примеры явных одношаговых методов 1-го и 2-го порядка.

Метод Эйлера (1-го порядка) имеет вид

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot f(x_n, v_n), \\ n = 0, 1, 2, \dots \end{cases}$$
 (16.2)

Метод Рунге-Кутта I (далее – PKI, 2-го порядка)

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot f \left(x_n + \frac{h_n}{2}, v_n + \frac{h_n}{2} f(x_n, v_n) \right) \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$
(16.3)

Метод Рунге-Кутта II (далее – PKII, 2-го порядка)

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + \frac{h_n}{2} (f(x_n, v_n) + f(x_n + h_n, v_n + h_n f(x_n, v_n)) \\ n = 0, 1, 2... \end{cases}$$
 (16.4)

В методе PKI , см. формулу (16.3), в качестве аргумента функции f(x,u) используется точка, полученная на основе текущей точки $(x_n\,,v_n)$ методом Эйлера с шагом $\frac{h_n}{2}$:

$$(x_n + \frac{h_n}{2}, v_n + \frac{h_n}{2} f(x_n, v_n)).$$

В методе PKII , см. формулу (16.4) в качестве аргумента функции f(x,u) используется текущая точка $(x_n\,,v_n)$ и точка, полученная на ее основе методом Эйлера с шагом h_n .

$$(x_n + h_n, v_n + h_n f(x_n, v_n))$$

На каждом шаге метода PKI и метода PKII функция f(x,u) вычисляется два раза: сначала – в текущей точке (x_n,v_n) , затем – в дополнительной точке, предварительно вычисленной методом Эйлера.

За счет дополнительных замеров поля направлений в фазовом пространстве методы PKI и PKII в сопоставлении с методом Эйлера более точны.

Явные одношаговые методы типа Рунге-Кутта обычно записывают в каноническом виде

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot F(x_n, v_n, h_n) \\ n = 0, 1, 2... \end{cases}$$
 (16.5)

где

$$F(x_n, v_n, h_n) = p_1 \cdot k_1(h_n) + p_2 \cdot k_2(h_n) + \dots + p_s \cdot k_s(h_n). \tag{16.6}$$

Натуральное число S называют **числом стадий** метода,

 $p_i, i = 1,...s$ – постоянные (не зависящие от шага метода) параметры метода,

 $k_i \ (h_n), \ i=1,...s$ — коэффициенты метода (они вычисляются как значения функции f(x,u), заданной в правой части дифференциального уравнения).

На каждом шаге метода коэффициенты k_i (h_n), i=1,...s, вычисляют заново, используя еще один набор постоянных (не зависящих от шага метода) параметров (чисел), определяющих сдвиг аргументов функции f(x,u) относительно текущей точки (x_n,v_n) .

Параметры, определяющие сдвиг аргументов, обозначим

$$\alpha_i$$
, $i = 2,...s$

$$\beta_{ij}$$
, $i = 2,...s$, $j = 1, s - 1$.

Тогда формулы для расчета коэффициентов метода принимают вид

$$k_{1} = f(x_{n}, v_{n})$$

$$k_{2} = f(x_{n} + \alpha_{2} \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot \beta_{21} \cdot k_{1})$$

$$k_{3} = f(x_{n} + \alpha_{3} \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot (\beta_{31} \cdot k_{1} + \beta_{32} \cdot k_{2}))$$
...
$$k_{s} = f(x_{n} + \alpha_{s} \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot (\beta_{s1} \cdot k_{1} + \beta_{s2} \cdot k_{2} + ... + \beta_{ss-1} \cdot k_{s-1}))$$
(16.7)

Очевидно, что коэффициенты k_i (h_n) , i=1,...s можно найти последовательно, один за другим, начиная с k_1 .

Поэтому методы типа Рунге-Кутта, заданные формулами (16.5)-(16.7), называют **явными** (примеры неявных методов типа Рунге-Кутта приведены в конце модуля).

Число S — количество стадий — характеризует **трудоемкость** метода.

Оно показывает, сколько раз нужно вычислить f(x,u), чтобы найти очередную точку численной траектории.

Приведенные выше методы (16.2)-(16.4) перепишем в каноническом виде.

Для метода Эйлера верно

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot k_1 \\ n = 0, 1, 2... \end{cases}$$

где $k_1 = f(x_n, v_n)$. Число стадий s = 1, параметр $p_1 = 1$, иных параметров нет.

Для метода PKI, см. формулы (16.3), верно

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot k_2 \\ n = 0, 1, 2... \end{cases}$$

где

$$k_1 = f(x_n, v_n),$$

 $k_2 = f(x_n + \frac{h_n}{2}, v_n + \frac{h_n}{2}k_1).$

Число стадий s=2 , параметры $p_1=0,$ $p_2=1,$ $\alpha_2=\frac{1}{2}$, $\beta_{21}=\frac{1}{2}$.

Каноническая запись метода PKII , см. (16.4), имеет вид

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + \frac{h_n}{2} \cdot (k_1 + k_2) \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$

где

$$k_1 = f(x_n, v_n),$$

 $k_2 = f(x_n + h_n, v_n + h_n k_1)$

Число стадий метода s=2 , параметры $p_1=\frac{1}{2}$, $p_2=\frac{1}{2}$, $\alpha_2=1$, $\beta_{21}=1$.

Метод Рунге-Кутта 4-го порядка

В приложениях часто востребованы одношаговые методы высокого порядка и соответственно высокой точности .

Например, 4-х стадийный метод Рунге-Кутта 4-го порядка имеет вид:

$$\begin{cases} x_{0}, v_{0} = u_{0}, x_{n+1} = x_{n} + h_{n}, \\ v_{n+1} = v_{n} + \frac{h_{n}}{6} \cdot (k_{1} + 2 \cdot k_{2} + 2 \cdot k_{3} + k_{4}), \\ k_{1} = f(x_{n}, v_{n}), \\ k_{2} = f(x_{n} + \frac{h_{n}}{2}, v_{n} + \frac{h_{n}}{2} \cdot k_{1}), \\ k_{3} = f(x_{n} + \frac{h_{n}}{2}, v_{n} + \frac{h_{n}}{2} \cdot k_{2}), \\ k_{4} = f(x_{n} + h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot k_{3}) \\ n = 0, 1, 2... \end{cases}$$

$$(16.8)$$

Число стадий метода s=4 , параметры $p_1=\frac{1}{6}, p_2=\frac{1}{3}, p_3=\frac{1}{3}, p_4=\frac{1}{6}$.

$$\alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{2}, \ \alpha_4 = 1, \ \beta_{21} = \frac{1}{2}, \ \beta_{31} = 0, \ \beta_{32} = \frac{1}{2}, \ \beta_{41} = \beta_{42} = 0, \ \beta_{43} = 1$$

Комментарий

- 1) Доказано, что для построения более точных методов от 5-го порядка и выше, необходимо число стадий более высокое, чем порядок метода.
- 2) Канонический способ записи удобен для программной реализации

Глобальная и локальная погрешность метода

Определение. Глобальной погрешностью метода E_{n+1} называют разность значений истинного решения задачи (16.1) и ее численного решения при $x=x_{n+1}$:

$$E_{n+1} = u_{n+1} - v_{n+1} (16.11)$$

Так как при численном счете такая погрешность, как правило, не поддается оценке, погрешность изучают локально, то есть отдельно на каждом шаге метода.

Чтобы определить понятие **локальной погрешности**, рассмотрим **текущую** и **следующую** точки численной траектории: (x_n, v_n) и (x_{n+1}, v_{n+1}) .

Поставим вспомогательную задачу Коши

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = f(x, u) \\ u(x_n) = v_n \end{cases}$$
 (16.12)

Решение задачи (16.12) обозначим $\hat{u}^{(n)}(x)$.

Индекс n напоминает о том, что начальной точкой этой траектории является (x_n, v_n) :

$$\hat{u}^{(n)}(x_n) = v_n.$$

Значение $\hat{u}^{(n)}(x)$ при $x=x_{n+1}$ обозначим $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = \hat{u}^{(n)}(x_{n+1}).$$

Определение. Локальной погрешностью метода e_{n+1} называют разность значений решения вспомогательной задачи (16.12) при $x=x_{n+1}$ и численного решения v_{n+1} :

$$e_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - v_{n+1} \tag{16.13}$$

Таким образом, локальная погрешность e_{n+1} характеризует «отрыв» численного решения (x_{n+1},v_{n+1}) от решения вспомогательной задачи Коши, проходившего через предыдущую точку (x_n,v_n) .

Комментарии

В силу выбора $(x_0,v_0)=(x_0,u_0)$ на начальном шаге любого метода глобальная погрешность отсутствует $(E_0=0)$, а локальная не определена, но может быть доопределена нулем $(e_0=0)$.

На первом шаге любого метода локальная и глобальная погрешности совпадают: $E_1=e_1$, так как при n=0 задача (16.12) совпадает с (16.1).

На последующих шагах локальная и глобальная погрешности определены различным образом и, как правило, различны: $E_{n+1} \neq e_{n+1}$, n=1,2,3,...

Порядок локальной погрешности и порядок метода

Пусть **текущая** точка (x_n, v_n) вычислена.

Вычислим v_{n+1} для $x_{n+1} = x_n + h$.

Выясним, как влияет уменьшение шага h на локальную погрешность e_{n+1} при условии, что (x_n,v_n) зафиксирована.

Для этого используем теоретический аппарат бесконечно малых величин и рассмотрим $h \to 0$ при фиксированных значениях (x_n, v_n) .

Определение. Пусть для локальной погрешности e_{n+1} имеет место представление

$$e_{n+1} = A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} + o(h^{p+1}), \tag{16.14}$$

где $A(x_n,v_n) \neq 0$ и не зависит от h .

Тогда говорят, что локальная погрешность имеет порядок малости p+1 и величину $A(x_n,v_n)\cdot h^{p+1}$ называют главным членом локальной погрешности.

Комментарий

Коэффициент $A(x_n,v_n)$ определяется правой частью дифференциального уравнения, то есть функцией f(x,u) и ее частными производными.

Возможность записывать локальную погрешность в виде (16.14) зависит не только от метода, но также от гладкости f(x,u) и гладкости решений уравнения.

Определение. Пусть локальная погрешность e_{n+1} имеет порядок малости p+1. Тогда говорят, что на участке [x_n, x_{n+1}] метод имеет порядок p.

Выводы

1) Если представление (16.14) верно, то при $h \to 0$ имеет место $e_{n+1} \to 0$.

При стремлении к нулю шага численного интегрирования имеет место сходимость метода в смысле сходимости к нулю локальной погрешности.

2) Чем выше порядок метода $\,p\,$, тем быстрее убывает локальная погрешность при уменьшении $\,h\,$ и тем лучше метод.

Приведем примеры утверждений о порядке метода.

Утверждение 1. При решении задачи Коши (16.1) и выполнении предположений о достаточной гладкости правой части уравнения локальная погрешность метода Эйлера записывается в виде

$$e_{n+1} = A(x_n, v_n) \cdot h^2 + o(h^2),$$

где

$$A(x_n, v_n) = \frac{1}{2} (f'_x + f'_u \cdot f) |_{(x_n, v_n)}$$

и не зависит от $\it h$.

Для задачи Коши общего вида (16.1) коэффициент $A(x_n, v_n) \neq 0$ и метод Эйлера имеет порядок 1. Его локальная погрешность имеет порядок малости 2.

Утверждение 2. При решении задачи Коши (16.1) и выполнении предположений о достаточной гладкости правой части уравнения локальная погрешность метода (16.4) записывается в виде

$$e_{n+1} = A(x_n, v_n) \cdot h^3 + o(h^3).$$

где

$$A(x_n, v_n) = \left(\frac{1}{6}f'_u \cdot (f'_x + f'_u \cdot f)\big|_{(x_n, v_n)} - \frac{1}{12}\{f''_{xx} + 2f''_{xu} \cdot f + f''_{uu} \cdot f^2\}\big|_{(x_n, v_n)}\right)$$

и не зависит от h .

Для задачи Коши общего вида (16.1) коэффициент $A(x_n,v_n)\neq 0$. Метод PKII, см. формулы (16.4), имеет порядок 2, его локальная погрешность имеет порядок малости 3.

Утверждения 1 и 2 будут доказаны в конце раздела.

Контроль локальной погрешности за счет двойного счета с половинным шагом

Базовая схема счета

Рассмотрим задачу (16.1) и метод PK(p), т.е. один из методов Рунге-Кутта порядка p. Для расчета численной траектории и одновременного контроля локальной погрешности используем следующую схему.

Выбираем $\varepsilon > 0$ – малый параметр для контроля локальной погрешности.

Пусть точка $(x_n$, $v_n)$ вычислена. Для отыскания следующей точки и оценки локальной погрешности

- найдем (x_{n+1},v_{n+1}) , используя PK(p) из точки (x_n,v_n) с шагом h;
- найдем $(x_{n+0.5}, v_{n+0.5})$, используя PK(p) из точки (x_n, v_n) с шагом $\frac{h}{2}$;
- найдем (x_{n+1},\hat{v}_{n+1}) , используя PK(p) из точки $(x_{n+0.5},v_{n+0.5})$ с шагом $\frac{h}{2}$.

Таким образом, значение $v_{n+0.5}$ соответствует аргументу $x_{n+0.5} = x_n + 0.5h$, а значения \hat{v}_{n+1} и v_{n+1} относятся к одному и тому же аргументу $x_{n+1} = x_n + h$, но вычислены разными способами: с шагом h из точки (x_n, v_n) и с половинным шагом 0.5h из точки (x_n, v_n) и затем из точки $(x_{n+0.5}, v_{n+0.5})$.

По результатам расчетов определим значение

$$S = \frac{\hat{v}_{n+1} - v_{n+1}}{2^p - 1},$$

где p — порядок метода.

Решение о продолжении счета и корректировке шага численного интегрирования принимают на основе правила:

- если $\frac{\mathcal{E}}{2^{p+1}} \le \mid S \mid \le \mathcal{E}$, точка (x_{n+1}, v_{n+1}) считается следующей точкой численной

траектории, далее счет продолжается с тем же шагом $\,h\,$;

- если $\mid S \mid < \frac{\mathcal{E}}{2^{p+1}}$, точка (x_{n+1}, v_{n+1}) считается следующей точкой численной траектории, но для продолжения счета удваиваем шаг;

- если $\mid S \mid$ > ε , проведенные расчеты следует считать грубыми, точка (x_{n+1}, v_{n+1}) не принимается, расчеты нужно повторить из точки (x_n, v_n) , уменьшив шаг в два раза.

Таким образом, траектория вычисляется с переменным шагом: если для некоторого n значения \hat{v}_{n+1} и v_{n+1} слишком близки, на следующем шаге метода шаг интегрирования h увеличивается, а если указанные значения слишком далеки, метод продолжает работать с точкой (x_n, v_n) как с текущей точкой, вдвое уменьшив шаг h.

Обоснование метода состоит в следующем.

Зафиксируем текущую точку (x_n, v_n) и в соответствии с (16.14) запишем локальную погрешность e_{n+1} для точки (x_{n+1}, v_{n+1}) , полученной из (x_n, v_n) методом PK(p):

$$e_{n+1} = A(x_n, v_n)h^{p+1} + o(h^{p+1})$$

Утверждение 3. При выполнении условий, гарантирующих существование и единственность решения задачи (16.12), включая условия на гладкость функции f(x,u), обеспечивающие гладкость решений и представление локальной погрешности в виде (16.14), для метода двойного счета с половинным шагом при достаточно малом h

$$e^{n+1} \approx A(x_n, v_n) h^{p+1} \approx 2^p \cdot S$$
.

Таким образом, величина $2^p \cdot S$ может служить оценкой неизвестного главного члена локальной погрешности метода PK(p) и тем самым – оценкой самой локальной погрешности.

Доказательство приведено в конце модуля.

Следствие. При выполнении условий Утверждения 3 и достаточно малых значениях h, таких, что

$$e_{n+1} \approx A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1}$$

$$A(x_n, v_n)h^{p+1} \approx 2^p \cdot S$$
,

метод двойного счета с половинным шагом удерживает модуль локальной погрешности метода PK(p) в пределах от ε до $2^p \cdot \varepsilon$.

Схема счета с половинным шагом

В рамках базовой схемы счета численная траектория строится с шагом h, а более точные результаты, полученные с половинным шагом, используются для контроля локальной погрешности и управления шагом интегрирования.

Рассмотрим другую схему счета и построим численную траекторию на основе более точных результатов, полученных с половинным шагом.

Тогда решение о продолжении счета и корректировке шага интегрирования принимают на основе следующего правила:

- если $\frac{\mathcal{E}}{2^{p+1}} \le \mid S \mid \le \mathcal{E}$, следующей точкой численной траектории считается точка (x_{n+1},\hat{v}_{n+1}) , счет продолжается с тем же шагом h ;

- если $\mid S \mid$ $< \frac{\varepsilon}{2^{p+1}}$, следующей точкой численной траектории считается точка (x_{n+1},\hat{v}_{n+1}) , для продолжения счета удваиваем шаг интегрирования;

- если $\mid S\mid > \varepsilon$, проведенные расчеты следует считать грубыми, ни одна из точек $(x_{n+1},v_{n+1}),\;(x_{n+1},\hat{v}_{n+1})$ не принимается; расчеты нужно повторить из текущей точки $(x_n\,,v_n)$ с шагом интегрирования в два раза меньше.

Чтобы оправдать такую схему счета, рассмотрим точку (x_n, v_n) . При выполнении условия $\mid S \mid \leq \varepsilon$ в качестве следующей точки траектории будет принята точка (x_{n+1}, \hat{v}_{n+1}) . Рассмотрим величину

$$\hat{\varepsilon}_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - \hat{v}_{n+1},$$

где $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$ – решение вспомогательной задачи (16.12) с начальным условием $\hat{u}^{(n)}(x_n)=v_n$, вычисленное при $x=x_{n+1}$; \hat{v}_{n+1} – численное решение при $x=x_{n+1}$, полученное с половинным шагом из точки (x_n,v_n) и затем из точки $(x_{n+0.5},v_{n+0.5})$,

Нетрудно видеть, что $\hat{\epsilon}_{n+1}$ не является локальной погрешностью, так как не соответствует формальному определению.

Но $\hat{\varepsilon}_{n+1}$ имеет смысл – эта величина показывает «отрыв» точки численной траектории (x_{n+1},\hat{v}_{n+1}) от истинной траектории, проходившей через точку (x_n,v_n) , предшествующую предыдущей точке $(x_{n+0.5},v_{n+0.5})$.

Назовем $\hat{\epsilon}_{n+1}$ локальной погрешностью двух половинных шагов.

Утверждение 4. При выполнении условий, гарантирующих существование и единственность решения задачи (16.12), включая условия на гладкость функции f(x,u), обеспечивающие гладкость решений и представление локальной погрешности в виде (16.14), для $\hat{\epsilon}_{n+1}$ – про погрешности двух половинных шагов, верно

$$\hat{\varepsilon}_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - \hat{v}_{n+1} = \frac{1}{2^p} A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} + o(h^{p+1})$$

где $A(x_n,v_n)\cdot h^{p+1}$ – главный член локальной погрешности e_{n+1} .

Утверждение 5. При выполнении условий, гарантирующих существование и единственность решения задачи (16.12), включая условия на гладкость функции f(x,u), обеспечивающие гладкость решений и представление локальной погрешности в виде (16.14), для метода двойного счета с половинным шагом при достаточно малом h

$$\hat{\varepsilon}_{n+1} \approx \frac{1}{2^p} A(x_n, v_n) h^{p+1} \approx S$$
.

Таким образом, величина S может быть оценкой неизвестного главного члена **локальной погрешности двух половинных шагов** $\hat{\varepsilon}_{n+1}$ и тем самым – оценкой самой величины $\hat{\varepsilon}_{n+1}$.

Утверждения 4, 5 доказываются на основе той же техники, что Утверждение 3.

Следствие. При выполнении условий Утверждения 5 при достаточно малых значениях h метод двойного счета с половинным шагом удерживает модуль $\hat{\varepsilon}_{n+1}$ в пределах от $\frac{\varepsilon}{2^{p+1}}$ до ε .

Схема с корректировкой значений

Еще одна модификация базовой схемы счета состоит в том, что оценка локальной погрешности e_{n+1} , полученная в ходе расчетов, используется для корректировки (уточнения) точек численной траектории.

Смысл корректировки состоит в следующем. Так как

$$e_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - v_{n+1},$$

решение вспомогательной задачи (16.12) записывается в виде

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = v_{n+1} + e_{n+1},$$

где локальная погрешность e_{n+1} неизвестна.

Добавляя к численному решению v_{n+1} какую-либо известную нам оценку локальной погрешности e_{n+1} , получим более точное приближение к неизвестному значению $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$.

Используя вместо e_{n+1} значение $2^p \cdot S$, получим так называемое скорректированное значение численного решения:

$$v_{n+1}^{\kappa opp} = v_{n+1} + 2^p \cdot S$$

При достаточно малом h скорректированное значение (16.17) является оценкой решения вспомогательной задачи (16.12) при $x=x_{n+1}$:

$$\hat{u}^{(n)}(x_{n+1}) \approx v_{n+1}^{\kappa op}.$$

Решение о продолжении счета принимают на основе правила:

- если $\frac{\mathcal{E}}{2^{p+1}} \le \mid S \mid \le \mathcal{E}$, следующей точкой численной траектории считается точка (x_{n+1}, v_{n+1}^{kop}) , счет продолжается с тем же шагом h ;
- если $\mid S \mid < \frac{\mathcal{E}}{2^{p+1}}$, следующей точкой численной траектории считается точка $(x_{n+1}, v_{n+1}^{\kappa op})$, но для продолжения счета удваиваем шаг интегрирования;
- если $\mid S \mid > \varepsilon$, расчеты считаются грубыми, ни одна из точек (x_{n+1},v_{n+1}) , (x_{n+1},\hat{v}_{n+1}) , (x_{n+1},v_{n+1}) , не принимается, расчеты нужно повторить из текущей точки $(x_n\,,v_n)$ с шагом интегрирования в два раза меньше.

Комментарий

Недостаток изложенных выше способов оценки локальной погрешности – необходимость многократного вычисления значений функции f(x,u) при различных значениях аргументов.

Например, при использовании 4-х стадийного метода Рунге-Кутта 4-го порядка на каждом шаге метода (двойной счет с половинным шагом) потребуются 11 вычислений значений функции f(x,u).

Контроль локальной погрешности за счет применения методов разных порядков

Пусть для решения задачи (16.1) используются методы PK(p) и $PK(\hat{p})$, где $p < \hat{p}$, то есть метод $PK(\hat{p})$ является более точным. Для контроля локальной погрешности выберем малый параметр $\varepsilon > 0$.

Пусть точка численной траектории (x_n, v_n) вычислена. Для отыскания следующей точки и оценки локальной погрешности:

- найдем (x_{n+1},v_{n+1}) , используя PK(p) из точки (x_n,v_n) с шагом h ;
- найдем (x_{n+1},\hat{v}_{n+1}) , используя $PK(\hat{p})$ из точки $(x_n$, $v_n)$ с шагом h .

По результатам расчетов вычислим контрольное слагаемое

$$S = \hat{v}_{n+1} - v_{n+1} \,,$$

Решение о продолжении счета и корректировке шага h принимают на основе правила:

- в случае
$$\dfrac{arepsilon}{2^{p+1}} \leq \mid S \mid \leq arepsilon$$

точка (x_{n+1}, v_{n+1}) принимается, счет продолжают с тем же шагом h;

- в случае
$$\mid S \mid < \frac{\mathcal{E}}{2^{p+1}}$$
 ,

точка (x_{n+1}, v_{n+1}) принимается, но для продолжения счета удваиваем шаг;

- в случае
$$\mid S \mid$$
 $> arepsilon$

проведенные расчеты следует считать грубыми, точка (x_{n+1},v_{n+1}) не принимается, расчеты нужно повторить из текущей точки (x_n,v_n) с шагом в два раза меньше.

Счет ведется методом PK(p), а более точный метод используется для контроля погрешности и управления шагом.

Обоснование метода состоит в следующем.

Утверждение 6. При выполнении условий, гарантирующих существование и единственность решения задачи (16.12), включая условия на гладкость функции f(x,u), обеспечивающие гладкость решений и представление локальных погрешностей в виде (16.14), в рамках схемы счета методами разных порядков при достаточно малом h

$$e_{n+1} \approx A(x_n, v_n) h^{p+1} \approx S$$
.

Контрольное слагаемое S может служить оценкой неизвестного главного члена локальной погрешности e_{n+1} метода PK(p) и тем самым оценкой самой локальной погрешности метода PK(p).

Доказательство

При выполнении условий Утверждения 6 (гладкость функции f(x,u), гладкость решений вспомогательной задачи) локальная погрешность e_{n+1} метода порядка p (метод обозначен PK(p)) составит

$$e_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - v_{n+1} = A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} + o(h^{p+1}),$$

Локальная погрешность \hat{e}_{n+1} метода порядка \hat{p} (метод обозначен $PK(\hat{p})$) составит

$$\hat{e}_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - \hat{v}_{n+1} = \hat{A}(x_n, v_n) \cdot h^{\hat{p}+1} + o(h^{\hat{p}+1}).$$

В каждой из формул участвует одна и та же величина $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$ – решение вспомогательной задачи (16.12) с начальным условием $\hat{u}^{(n)}(x_n)=v_n$, вычисленное при $x=x_{n+1}$.

Выразим $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$ из каждой формулы:

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = v_{n+1} + A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} + o(h^{p+1}),$$

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = \hat{v}_{n+1} + \hat{A}(x_n, v_n) \cdot h^{\hat{p}+1} + o(h^{\hat{p}+1}).$$

Приравняем правые части формул:

$$\hat{v}_{n+1} + \hat{A}(x_n, v_n) \cdot h^{\hat{p}+1} + o(h^{\hat{p}+1}) = v_{n+1} + A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} + o(h^{p+1}).$$

Так как $p < \hat{p}$, при $h \rightarrow 0$ верно

$$\hat{A}(x_n, v_n) \cdot h^{\hat{p}+1} + o(h^{\hat{p}+1}) = o(h^{p+1}).$$

Для контрольного слагаемого S получим

$$\begin{split} S &= \hat{v}_{n+1} - v_{n+1} = \\ &= A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} - \hat{A}(x_n, v_n) \cdot h^{\hat{p}+1} + o(h^{p+1}) - o(h^{\hat{p}+1}) = \\ &= A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} + o(h^{p+1}) \end{split}$$

Следовательно, при достаточно малых h верно $S \approx A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1}$.

Так как при достаточно малых h верно

$$e_{n+1} \approx A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1}$$

Утверждение 6 доказано.

Пример одновременного применения методов разных порядков для контроля локальной погрешности

Для решения задачи (16.1) и контроля локальной погрешности используем метод Эйлера (16.2) и метод PKII (16.4), порядки которых равны p=1 и $\hat{p}=2$ соответственно. Пусть текущая точка численной траектории (x_n, v_n) вычислена.

При $x = x_{n+1}$ методом Эйлера получим

$$v_{n+1} = v_n + h \cdot f(x_n, v_n).$$

Более точным методом *РКІІ* получим

$$\widetilde{v}_{n+1} = v_n + \frac{h}{2} \cdot \{ f(x_n, v_n) + f(x_n + h, v_n + h \cdot f(x_n, v_n)) \},$$

Контрольное слагаемое $S = \hat{v}_{n+1} - v_{n+1}$ составит

$$S = \frac{h}{2} \cdot \{ f(x_n + h, v_n + h \cdot f(x_n, v_n)) - f(x_n, v_n) \}.$$

Так как в случае $|S| \le \varepsilon$ в качестве следующей точки траектории будет принята (x_{n+1}, v_{n+1}) , значение \hat{v}_{n+1} вычислять не обязательно.

Достаточно вычислить v_{n+1} и S .

Заметим, что значение S является оценкой главного члена локальной погрешности более грубого метода, т.е. метода Эйлера:

$$e_{n+1} \approx A(x_n, v_n) \cdot h^2 = \frac{h^2}{2} (f'_x + f'_u \cdot f) \Big|_{(x_n, v_n)} \approx S.$$

Для счета описанным выше способом на каждом шаге метода нужны два вычисления функции f(x,u).

Снижение трудоемкости контроля

Одновременный счет методами разных порядков нужен для того, чтобы снизить трудоемкость контроля локальной погрешности.

Пусть в общем случае в качестве PK(p) используется метод

$$v_{n+1} = v_n + h \cdot (p_1 \cdot k_1 + p_2 \cdot k_2 + \dots + p_s \cdot k_s)$$

где S — число стадий,

 $p_i,\,i=1,...s$ – параметры (числа) и $k_i=k_i(h),\,\,i=1,...s$ – коэффициенты.

Пусть в качестве $PK(\hat{p})$ используется метод

$$\hat{v}_{n+1} = v_n + h \cdot (\hat{p}_1 \cdot \hat{k}_1 + \hat{p}_2 \cdot \hat{k}_2 + \dots + \hat{p}_{\hat{s}} \cdot \hat{k}_{\hat{s}})$$

где \hat{S} — число стадий,

 \hat{p}_{i} , $i=1,...\hat{s}$ – параметры (числа) и

$$\hat{k}_{i} = \hat{k}_{i}(h), i = 1, ... \hat{s}$$
 – коэффициенты.

Пусть для первых q стадий коэффициенты методов совпадают:

$$\hat{k}_i = k_i, i = 1, \dots, q, q \leq min(s, \hat{s})$$
.

Тогда на каждом шаге счета с контролем погрешности нужны $s+\hat{s}-q$ вычислений функции f(x,u), и за счет совпадения коэффициентов двух методов снижается трудоемкость контроля погрешности.

Если совпадения нет, т.е. q=0, на каждом шаге нужны $s+\hat{s}$ вычислений функции f(x,u).

Эти выкладки показывают, как выбирать методы для контроля погрешности.

Примеры методов высокого порядка с низкой трудоемкостью контроля

Метод Рунге-Кутта-Мерсона включает 5-ти стадийный метод 3-го порядка и

5-стадийный метод 4-го порядка с полностью совпадающими коэффициентами

$$\hat{k}_i = k_i, i = 1,...5$$
:

Счет ведется методом 3-го порядка.

На каждом шаге метода для расчета точки и контроля локальной погрешности нужны 5 вычислений функции f(x,u).

При решении линейных уравнений вида

$$u' = ax + bu + c$$

5-ти стадийная формула метода 3-го порядка оказывается формулой порядка 5. Поэтому счет ведется 5-ти стадийным методом 4-го порядка и контрольное слагаемое (формула записана ниже) должно поменять знак.

На каждом шаге метода для расчета точки и контроля локальной погрешности также нужны 5 вычислений функции f(x,u).

Формулы метода Рунге-Кутта-Мерсона имеют вид

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + \frac{h_n}{10} \cdot (k_1 + 3 \cdot k_3 + 4 \cdot k_4 + 2k_5), p = 3 \\ \hat{v}_{n+1} = v_n + \frac{h_n}{6} \cdot (k_1 + 4 \cdot k_4 + k_5), \hat{p} = 4, \\ k_1 = f(x_n, v_n), \\ k_2 = f(x_n + \frac{h_n}{3}, v_n + \frac{h_n}{3} \cdot k_1), \\ k_3 = f(x_n + \frac{h_n}{3}, v_n + \frac{h_n}{6} \cdot k_1 + \frac{h_n}{6} \cdot k_2), \\ k_4 = f(x_n + \frac{h_n}{2}, v_n + \frac{h_n}{8} \cdot k_1 + \frac{3 \cdot h_n}{8} \cdot k_3) \\ k_5 = f(x_n + h_n, v_n + \frac{h_n}{2} \cdot k_1 - \frac{3 \cdot h_n}{2} \cdot k_3 + 2 \cdot h_n \cdot k_4), \\ S = \frac{h_n}{30} \cdot (2 \cdot k_1 - 9 \cdot k_3 + 8 \cdot k_4 - k_5) \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$

Метод Ингленда включает 4-х стадийный метод 4-го порядка и 6-ти стадийный метод 5-го порядка с совпадающими коэффициентами $\hat{k_i} = k_i$, i = 1,...4. Счет ведется методом 4-го порядка. На каждом шаге метода для расчета точки и контроля локальной погрешности нужны 6 вычислений функции f(x,u).

Метод Фельберга включает 5-ти стадийный метод 4-го порядка и 6-ти стадийный метод 5-го порядка с совпадающими коэффициентами $\hat{k}_i = k_i$, i = 1,...5. Счет ведется методом 4-го порядка. На каждом шаге метода для расчета точки и контроля локальной погрешности нужны 6 вычислений функции f(x,u).

Методы Ингленда и Фельберга см. [1], [2].

Глобальная погрешность и порядок метода, сходимость

Если локальная погрешность имеет порядок малости $\,p+1\,,\,$ то (по определению) метод имеет порядок $\,p\,.\,$

Оказывается, при определенных допущениях, глобальная погрешность численного решения задачи Коши также имеет порядок малости $\,p$.

Приведем формулировку теоремы.

Теорема. Рассмотрим задачу (16.1) на отрезке интегрирования $x \in [x_0, X]$. Пусть в окрестности точки (x_0, u_0) условия теоремы существования и единственности решения выполнены.

Пусть на фазовой плоскости (x,u) в полосе $x \in [x_0,X], u \in (-\infty,+\infty)$

функция f(x,u) и ее частные производные $f_x'(x,u), f_u'(x,u)$ непрерывны

и либо функция f(x,u) удовлетворяет условию Липшица по аргументу u,

либо ее частная производная $f_u'(x,u)$ в указанной полосе ограничена: $\left|f_u'(x,u)\right| \leq C$.

Пусть для решения задачи на отрезке $[x_0, X]$ применяют метод PK(p)

с равномерным (постоянным) шагом $h=\frac{X-x_0}{N}$, где N – число разбиений отрезка $[x_0,X]$.

Тогда верна оценка

$$\max_{n=0,\dots N} \mid E_n \mid \leq M \cdot h^p$$

где $M \neq 0$ и не зависит от h (не зависит от числа разбиений N), но зависит от исходной задачи, начальных условий и отрезка численного интегрирования, т.е. зависит от $f(x,u), x_0, u_0, X$.

Доказательство приведено в [1].

Следствие. В условиях теоремы при $N \to +\infty$ (т.е. при $h \to 0$)

$$\max_{n=0,\dots N} \mid E_n \mid \, o 0 \,$$
 не хуже чем $O(h^p)$,

а численное решение v(x) сходится к истинному решению u(x) , заданному на фиксированном отрезке.

Выводы

При решении на отрезке $x \in [x_0, X]$ задач, удовлетворяющих условиям теоремы, при соблюдении прочих условий, указанных в теореме и при стремлении шага численного интегрирования h к нулю то есть увеличении N - числа разбиений отрезка) максимум глобальной погрешности метода порядка p имеет порядок малости p.

При этом численное решение v(x) сходится к истинному решению u(x), заданному на фиксированном отрезке:

$$\max_{n=0,\dots N} \mid u_n - v_n \mid \to 0$$
 при $N \to +\infty$.

Примеры

1) задача Коши, соответствующая условиям Теоремы:

$$\begin{cases} u' = 3u \\ u(0) = 1, x \in [0,1] \end{cases}$$

В данном случае f(x,u) = 3u, $f'_x = 0$, $f'_u = 3$.

На фазовой плоскости (x,u) в полосе $x \in [0,1], u \in (-\infty, +\infty)$ условия Теоремы выполнены.

При решении задачи методом PK(p) на отрезке [0,1] с шагом $h=\frac{1}{N}$ при уменьшении шага в 2 раза оценка максимального значения модуля глобальной погрешности уменьшится в 2^p раз.

Поэтому при $N \to +\infty$ и соответственно $h \to 0$ максимум модуля глобальной погрешности стремится к нулю не хуже чем $O(h^p)$.

2) задача Коши, не соответствующая условиям Теоремы:

$$\begin{cases} u' = 3 \cdot u + u^3 + \sin x \\ u(0) = 5, x \in [0,1] \end{cases}$$

В данном случае $f(x,u) = 3u + u^3 + \sin x$, $f'_x = \cos x$, $f'_u = 3 + 3u^2$.

На фазовой плоскости (x,u) в полосе $x \in [0,1], u \in (-\infty, +\infty)$ условия Теоремы не выполнены (независимо от того, каков порядок метода, используемого для решения задачи).

В данном случае истинное решение задачи имеет вертикальную асимптоту.

Поведение глобальной погрешности на участках численной траектории

Рассмотрим задачу Коши (16.1) и участок численной траектории

...
$$(x_n, v_n), (x_{n+1}, v_{n+1}), ... (x_{n+q}, v_{n+q}), ...$$

Поведение глобальной погрешности на данном участке, т.е. неизвестные значения $\dots E_n$, E_{n+1} , $\dots E_{n+q}$, \dots зависят не только от свойств метода, но и от свойств истинных, то есть фазовых траекторий.

Если на фазовой плоскости истинные траектории «стягиваются», модуль глобальной погрешности может в процессе счета уменьшиться.

Если истинные траектории «расходятся», модуль глобальной погрешности может в процессе счета расти.

Методы решения задачи Коши для систем ОДУ

Задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) можно записывать в виде (16.1) и применять для ее решения рассмотренные выше методы (16.6)-(16.7), читая запись самой задачи и запись методов как векторную.

Покажем, как следует читать такие записи, на примере системы ОДУ 2-го порядка.

Пусть поставлена задача Коши

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = f(x, u), \\ u(x_0) = u_0 \end{cases}$$

где неизвестной функцией является

$$u(x) = \begin{pmatrix} u^{(1)}(x) \\ u^{(2)}(x) \end{pmatrix}.$$

Правая часть дифференциального уравнения записывается в виде

$$f(x,u) = \begin{pmatrix} f^{(1)}(x,u^{(1)},u^{(2)}) \\ f^{(2)}(x,u^{(1)},u^{(2)}) \end{pmatrix}.$$

Начальному условию задачи соответствует уравнение

$$u(x_0) = \begin{pmatrix} u^{(1)}(x_0) \\ u^{(2)}(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0^{(1)} \\ u_0^{(2)} \end{pmatrix} = u_0.$$

где u_0 - вектор и $u(x_0)$ – значение вектор-функции u(x) при $x=x_0$.

Для отыскания численного решения применим метод Эйлера (16.2)

$$\begin{cases} v_0 = u_0, x_{n+1} = x_n + h_n \\ v_{n+1} = v_n + h_n f(x_n, v_n) \\ n = 0, 1, 2, \dots \end{cases}$$

Для системы ОДУ 2-го порядка верно

$$v_0 = \begin{pmatrix} v_0^{(1)} \\ v_0^{(2)} \end{pmatrix}, v_n = \begin{pmatrix} v_n^{(1)} \\ v_n^{(2)} \end{pmatrix}, v_{n+1} = \begin{pmatrix} v_{n+1}^{(1)} \\ v_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix},$$

По компонентам записываем метод Эйлера в виде

$$\begin{cases} v_0^{(1)} = u_0^{(1)}, \\ v_0^{(2)} = u_0^{(2)}, \\ x_{n+1} = x_n + h_n \end{cases}$$

$$\begin{cases} v_{n+1}^{(1)} = v_n^{(1)} + h_n f^{(1)}(x_n, v_n^{(1)}, v_n^{(2)}) \\ v_{n+1}^{(2)} = v_n^{(2)} + h_n f^{(2)}(x_n, v_n^{(1)}, v_n^{(2)}) \\ n = 0, 1, 2... \end{cases}$$

(примеры см. Практикум)

Если использовать каноническую запись метода Эйлера, а именно

$$\begin{cases} v_0 = u_0, x_{n+1} = x_n + h_n \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot k_1 \\ n = 0, 1, 2... \end{cases},$$

где $k_1 = f(x_n, v_n)$, то коэффициент k_1 следует читать как вектор

$$k_{1} = \begin{pmatrix} k_{1}^{(1)} \\ k_{1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f^{(1)}(x, v_{n}^{(1)}, v_{n}^{(2)}) \\ f^{(2)}(x, v_{n}^{(1)}, v_{n}^{(2)}) \end{pmatrix} = f(x_{n}, v_{n}).$$

По компонентам в канонической записи метод принимает вид

$$\begin{cases} v_0^{(1)} = u_0^{(1)}, v_0^{(2)} = u_0^{(2)}, \\ x_{n+1} = x_n + h_n \\ v_{n+1}^{(1)} = v_n^{(1)} + h_n k_1^{(1)} \\ v_{n+1}^{(2)} = v_n^{(2)} + h_n k_1^{(2)} \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$

В общем случае при решении систем ОДУ более высокого порядка и (или)

при использовании методов более высокого порядка (см. формулы (16.6)-(16.7))

число стадий метода s, параметры p_i , i=1,...s, α_i , i=2,...s и β_{ij} , i=2,...s, j=1,s-1 следует читать как числа, а коэффициенты $k_i(h_n)$, i=1,...s, – как векторы.

Определение локальной, глобальной погрешности и порядка метода при решении систем ОДУ вводится аналогично. Погрешности и их оценки следует рассматривать как векторы.

При осуществлении контроля локальной погрешности критерий применяют для нормы вектора S : например, неравенство

$$\frac{\varepsilon}{2^{p+1}} \le ||S|| \le \varepsilon,$$

проверяют для нормы вектора. В качестве нормы можно использовать евклидову норму или, например, норму $\parallel S \parallel = \parallel S \parallel_{\infty} = \max_{i=1,...m} \mid S^{(i)} \mid$, где m – порядок системы ОДУ. То есть в качестве нормы используется максимальная по модулю компонента вектора.

Примеры представлены на практике.

Анализ локальной погрешности и порядка методов

Обоснование порядка метода Эйлера

Рассмотрим задачу (16.1), исследуем метод Эйлера и докажем Утверждение 1.

Для этого зафиксируем точку численной траектории (x_n, v_n) и запишем локальную погрешность

$$e_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - v_{n+1}$$
.

В этой формуле $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$ есть истинное решение вспомогательной задачи Коши (16.12) при $x_{n+1}=x_n+h$. Оно не зависит от выбора метода.

Значение v_{n+1} есть численное решение исходной задачи (16.1) при $x_{n+1}=x_n+h$.

Оно определяется выбранным методом (в данном случае – методом Эйлера).

Чтобы изучить погрешность e_{n+1} при $h \to 0$, т.е. при $x_{n+1} \to x_n$, используем для записи величин $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$ и v_{n+1} формулу Тейлора по степеням малого h>0 .

Шаг I

Применим для функции $\hat{u}^{(n)}(x)$ формулу Тейлора в окрестности $x=x_n$ по степеням h и выразим значение $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$:

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = \hat{u}^{(n)}(x_n + h) =$$

$$= \hat{u}^{(n)}(x_n) + h \cdot [\hat{u}^{(n)}(x)]' \Big|_{x = x_n} + \dots + \frac{h^q}{q!} \cdot [\hat{u}^{(n)}(x)]^{(q)} \Big|_{x = x_n} + o(h^q)$$
(16.15)

Число $q\in N$ отвечает за число «используемых» слагаемых формулы. Для изучения погрешности метода Эйлера можно взять q=2 .

Так как $\hat{u}^{(n)}(x)$ – решение вспомогательной задачи Коши (16.12), для первого слагаемого формулы (16.15) верно

$$\hat{u}^{(n)}(x_n) = v_n. {(16.16)}$$

Коэффициент при h определяется первой производной $[\hat{u}^{(n)}(x)]'$. Так как

$$[\hat{u}^{(n)}(x)]' = \frac{d [\hat{u}^{(n)}(x)]}{dx} = f(x, \hat{u}^{(n)}(x)),$$

в силу начального условия (16.12) значение производной при $x=x_n$ составит

$$\left[\hat{u}^{(n)}(x)\right]'\Big|_{x=x_n} = f(x_n, \hat{u}^{(n)}(x_n)) = f(x_n, v_n). \tag{16.17}$$

Коэффициент при h^2 определяется второй производной $[\hat{u}^{(n)}(x)]''$, которая является первой производной от $[\hat{u}^{(n)}(x)]'$. Поэтому

$$[u^{(n)}(x)]'' = \frac{d}{dx}f(x,\hat{u}^{(n)}(x)) = f'_x + f'_u \cdot \frac{d\left[\hat{u}^{(n)}(x)\right]}{dx} = f'_x + f'_u \cdot f(x,\hat{u}^{(n)}(x)).$$

Используя (16.12), при $x = x_n$ получим

$$\left[\hat{u}^{(n)}(x)\right]''\Big|_{x=x_n} = \left(f_x + f'_u \cdot f\right)\Big|_{(x_n, v_n)}.$$
(16.18)

Используя формулу Тейлора (16.15) и найденные значения коэффициентов, решение вспомогательной задачи запишем в виде

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = v_n + h \cdot f(x_n, v_n) + \frac{h^2}{2} \cdot (f_x' + f_u' \cdot f) \Big|_{(x_n v_n)} + o(h^2)$$
(16.19)

Шаг II

Численное решение v_{n+1} , полученное при $x=x_{n+1}$ методом Эйлера, записывается в виде

$$v_{n+1} = v_n + h \cdot f(x_n, v_n). \tag{16.20}$$

Так как (x_n, v_n) зафиксирована, правая часть выражения (16.20) есть ряд по степеням малого параметра h с конечным числом слагаемых (два слагаемых).

Шаг III

Подставим (16.19) и (16.20) в формулу локальной погрешности и для метода Эйлера получим

$$e_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - v_{n+1} = \frac{h^2}{2} \cdot (f_x' + f_u' \cdot f) \Big|_{(x_n v_n)} + o(h^2).$$

Выводы

Локальная погрешность метода Эйлера в точке (x_{n+1}, v_{n+1}) записывается в виде

$$e_{n+1} = A(x_n, v_n) \cdot h^2 + o(h^2),$$

где
$$A(x_n,v_n)=rac{1}{2}\cdot(f_x'+f_u'\cdot f)ig|_{(x_n,v_n)}$$
 и не зависит от h

Так как в общем случае задачи (16.1) получим $A(x_n, v_n) \neq 0$, метод имеет Эйлера имеет первый порядок, его локальная погрешность – второй.

Утверждение 1 доказано.

Обоснование порядка метода *РКІІ*

Рассмотрим задачу (16.1), исследуем метод PKII, см. формулы (16.4), и докажем Утверждение 2.

Зафиксируем точку численной траектории $\left(x_{n},v_{n}
ight)$ и запишем локальную погрешность

$$e_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - v_{n+1}.$$

Чтобы изучить погрешность e_{n+1} при $h \to 0$, т.е. при $x_{n+1} \to x_n$, используем для записи величин $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$ и v_{n+1} формулу Тейлора по степеням малого h>0 .

Шаг I

При изучении погрешности метода (16.4) для значения $\hat{u}_{n+1}^{(n)}$ в формуле Тейлора (16.15) целесообразно использовать q=3 и следующие слагаемые:

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = \hat{u}^{(n)}(x_n + h) =$$

$$= \hat{u}^{(n)}(x_n) + h[\hat{u}^{(n)}(x)]'\Big|_{x=x_n} + \frac{h^2}{2!} [\hat{u}(x)]''\Big|_{x=x_n} +$$

$$+ \frac{h^3}{3!} [\hat{u}^{(n)}(x)]'''\Big|_{x=x_n} + o(h^3)$$
(16.21)

Первые три коэффициента формулы (16.21) уже получены, см. (16.16)-(16.18).

Коэффициент при h^3 определяется третьей производной $[\hat{u}^{(n)}(x)]'''$, являющейся первой производной от $[\hat{u}^{(n)}(x)]''$. Поэтому

$$\begin{aligned} &[\hat{u}^{(n)}(x)]''' = \frac{d}{dx} [\hat{u}^{(n)}(x)]'' \bigg| = \frac{d}{dx} \bigg(f'_x + f'_u \cdot f(x, \hat{u}^{(n)}(x)) \bigg) = \\ &= \{ f''_{xx} + f''_{xu} \cdot \frac{d\hat{u}^{(n)}(x)}{dx} + \\ &+ \{ f''_{ux} + f''_{uu} \cdot \frac{d\hat{u}^{(n)}(x)}{dx} \} \cdot f(x, \hat{u}^{(n)}(x)) + f'_u \cdot (f'_x + f'_u \cdot \frac{d\hat{u}^{(n)}(x)}{dx}) \} \end{aligned}$$

В силу (16.12) при $x = x_n$ верно

$$\left[\hat{u}^{(n)}(x)\right]'''\Big|_{x=x_n} = \left\{f''_{xx} + 2f''_{xu} \cdot f + f''_{uu} \cdot f^2 + f'_x \cdot f'_u + (f'_u)^2 \cdot f\right\}\Big|_{(x_n, v_n)}$$
(16.22)

Подставляя (16.16)-(16.18) и (16.22) в (16.21), решение вспомогательной задачи запишем в виде

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = v_n + h \cdot f \big|_{(x_n v_n)} + \frac{h^2}{2} (f_x' + f_u' \cdot f) \big|_{(x_n, v_n)} + \frac{h^3}{6} \{ f_{xx}'' + 2f_{xu}'' \cdot f + f_u' \cdot (f_x' + f_u' \cdot f) + f_{uu}'' \cdot f^2 \} \big|_{(x_{n+1}, v_{n+1})} + o(h^3)$$
(16.23)

Шаг II

Численное решение v_{n+1} , полученное при $x=x_{n+1}$ методом PKII , записывается по формулам (16.4) в виде

$$v_{n+1} = v_n + \frac{h}{2} \cdot \{ f(x_n, v_n) + f(x_n + h, v_n + h \cdot f(x_n, v_n)) \}$$
 (16.24)

Правую часть формулы (16.24) запишем по формуле Тейлора по степеням h при фиксированном (x_n, v_n) .

Для этого значение $f(x_n+h,v_n+h\cdot f(x_n,v_n))$ запишем как функцию f(x,u) двух переменных по формуле Тейлора в окрестности точки (x_n,v_n) по степеням малых параметров h и $h\cdot f(x_n,v_n)$:

$$f(x_{n} + h, v_{n} + h \cdot f(x_{n}, v_{n})) =$$

$$= f(x_{n}, v_{n}) + \{h \cdot f'_{x} + h \cdot f(x_{n}, v_{n}) \cdot f'_{u}\}\big|_{(x_{n}, v_{n})} +$$

$$+ \frac{1}{2} \{h^{2} \cdot f'''_{xx} + 2 \cdot h^{2} \cdot f \cdot f''_{xu} + (h \cdot f)^{2} \cdot f'''_{uu}\}\big|_{(x_{n}, v_{n})} + o(h^{2})$$
(16.25)

Подставим (16.25) в (16.24), получим представление

$$v_{n+1} = v_n + h \cdot f \big|_{(x_n, v_n)} + \frac{h^2}{2} \cdot (f'_x + f'_u \cdot f) \big|_{(x_n, v_n)} + \frac{h^3}{4} (f''_{xx} + 2f''_{xu} \cdot f + f''_{uu} \cdot f^2) \big|_{(x_n, v_n)} + o(h^3)$$
(16.26)

Шаг III

Подставим (16.23) и (16.26) в формулу локальной погрешности метода PKII, получим

$$e_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - v_{n+1} =$$

$$= h^3 \cdot \left(\frac{1}{6} f_u'(f_x' + f_u' \cdot f) \Big|_{(x_n, v_n)} - \frac{1}{12} \{ f_{xx}'' + 2 \cdot f_{xu}'' \cdot f + f_{uu}'' \cdot f^2 \} \Big|_{(x_n, v_n)} \right) + o(h^3)$$

Выводы

Локальная погрешность метода PKII , заданного формулами (16.4), записывается в виде

$$e_{n+1} = A(x_n, v_n) \cdot h^3 + o(h^3),$$

где

$$A(x_n, v_n) = \left[\frac{1}{6} \cdot f'_u \cdot (f'_x + f'_u \cdot f) \Big|_{(x_n, v_n)} - \frac{1}{12} \cdot \{f''_{xx} + 2 \cdot f''_{xu} \cdot f + f''_{uu} \cdot f^2\} \Big|_{(x_n, v_n)} \right]$$

и не зависит от h .

Так как в общем случае задачи (16.1) получим $A(x_n, v_n) \neq 0$, метод (16.4) имеет второй порядок, его локальная погрешность – третий.

Утверждение 2 доказано.

Задание*

Приведите примеры задач, для которых метод Эйлера или метод PKII , заданный формулами (16.4), имеют более высокие порядки.

Исследуйте локальную погрешность и порядок метода PKI, заданного формулами (16.3). Сформулируйте соответствующее утверждение.

Предложите 2-х стадийный метод второго порядка, отличающийся от методов (16.3), (16.4).

Комментарии

- 1) Чтобы исследовать порядок метода Рунге-Кутта, записанного в виде (16.5)-(16.7), локальную погрешность (16.14) раскладывают по формуле Тейлора по степеням малого параметра h.
- 2) Чтобы построить (предложить) новый метод типа Рунге-Кутта, определяют S- число стадий метода, и в формулах (16.6)-(16.7) подбирают такие числовые параметры

$$p_i$$
, $i = 1,...s$, α_i , $i = 2,...s$ u β_{ij} , $i = 2,...s$, $j = 1, s - 1$,

чтобы при заданном количестве стадий, то есть при заданной трудоемкости, метод обеспечил необходимый исследователю и (или) наиболее высокий порядок.

Обоснование оценки локальной погрешности для двойного счета с половинным шагом

Рассмотрим задачу Коши (16.1) и контроль погрешности за счет двойного счета с половинным шагом (базовая схема счета).

Для решения задачи (16.1) используется метод PK(p), т.е. один из методов Рунге-Кутта порядка p . Точка численной траектории (x_n, v_n) вычислена.

Для отыскания следующей точки и оценки локальной погрешности:

- 1) найдем (x_{n+1}, v_{n+1}) , используя PK(p) из (x_n, v_n) с шагом h;
- 2) найдем $(x_{n+0.5},v_{n+0.5})$, используя PK(p) из (x_n,v_n) с шагом $\frac{h}{2}$;
- 3) найдем (x_{n+1},\hat{v}_{n+1}) , используя PK(p) из $(x_{n+0.5},v_{n+0.5})$ с шагом $\frac{h}{2}$.

По результатам расчетов определим

$$S = \frac{\hat{v}_{n+1} - v_{n+1}}{2^p - 1}.$$

Согласно Утверждению 3, величину $2^p \cdot S$ можно использовать как оценку главного члена локальной погрешности для точки (x_{n+1}, v_{n+1}) , то есть

$$e_{n+1} \approx A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} \approx 2^p \cdot S$$

Докажем Утверждение 3.

Шаг I

Поставим вспомогательные задачи

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = f(x, u) \\ u(x_n) = v_n \end{cases}$$
 (16.30)

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = f(x, u) \\ u(x_{n+0.5}) = v_{n+0.5} \end{cases}$$
 (16.31)

Решения указанных задач обозначим $\hat{u}^{(n)}(x)$, $\hat{u}^{(n+0.5)}(x)$ соответственно.

Далее предполагаем, что в окрестности точек

$$(x_n, v_n), (x_{n+0.5}, v_{n+0.5}), (x_{n+1}, \hat{v}_{n+1}), (x_{n+1}, v_{n+1})$$

правая часть дифференциального уравнения и решения задач (16.30) и (16.31) являются достаточно гладкими.

Шаг II

Запишем локальную погрешность метода PK(p) для точки (x_{n+1}, v_{n+1}) :

$$e_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - v_{n+1} = A(x_n, v_n)h^{p+1} + o(h^{p+1})$$
(16.32)

Здесь

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = \hat{u}^{(n)}(x_{n+1})$$

решение задачи (16.30) с начальным условием $\hat{u}^{(n)}(x_n) = v_n$, взятое при $x = x_{n+1}$;

 v_{n+1} – численное решение, полученное PK(p) на основе (x_n, v_n) с шагом h .

Шаг III

Запишем локальную погрешность метода PK(p) для точки $(x_{n+0.5}, v_{n+0.5})$:

$$e_{n+0.5} = \hat{u}_{n+0.5}^{(n)} - v_{n+0.5} = A(x_n, v_n) \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + o(h^{p+1})$$
(16.33)

Здесь

$$\hat{u}_{n+0.5}^{(n)} = \hat{u}^{(n)}(x_{n+0.5})$$

решение задачи (16.30) с начальным условием $\hat{u}^{(n)}(x_n) = v_n$, взятое при $x = x_{n+0.5}$;

 $v_{n+0.5}$ – численное решение, полученное PK(p)

на основе (x_n, v_n) с шагом $\frac{h}{2}$.

Шаг IV

Запишем локальную погрешность метода PK(p) для точки (x_{n+1}, \hat{v}_{n+1}) :

$$\hat{e}_{n+1} = \hat{u}_{n+1}^{(n+0.5)} - \hat{v}_{n+1} = A(x_{n+0.5}, v_{n+0.5}) \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + o(h^{p+1})$$
(16.34)

Здесь

$$\hat{u}_{n+1}^{(n+0.5)} = \hat{u}^{(n+0.5)}(x_{n+1})$$

решение задачи (16.31) с начальным условием

$$\hat{u}^{(n+0.5)}(x_{n+0.5}) = v_{n+0.5},$$

взятое при $x = x_{n+1}$;

 \hat{v}_{n+1} – численное решение, полученное PK(p)

на основе $(x_{n+0.5}, v_{n+0.5})$ с шагом $\frac{h}{2}$.

Шаг V

Воспользуемся гладкостью правой части дифференциального уравнения и представлением методов PK(p) в виде (16.5)-(16.7).

Тогда

$$A(x_{n+0.5}, v_{n+0.5}) = A(x_n + \frac{h}{2}, v_n + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^{s} p_i k_i) = A(x_n, v_n)(1 + O(h)).$$

Перепишем (16.34)

$$\hat{e}_{n+1} = A(x_n, v_n)(1 + O(h)) \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + o(h^{p+1}) =$$

$$= A(x_n, v_n) \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + o(h^{p+1})$$
(16.35)

Шаг VI

Воспользуемся свойством близких решений задачи Коши: если при некотором начальном значении аргумента разность решений задачи Коши невелика, то при достаточно малом изменении аргумента разность решений изменится на величину одного порядка с изменением аргумента.

В качестве начального значения аргумента рассмотрим $x = x_{n+0.5}$, а в качестве решений – решения задач (16.30) и (16.31)

$$\hat{u}^{(n)}(x)$$
 и $\hat{u}^{(n+0.5)}(x)$

соответственно.

При $x = x_{n+0.5}$ решение $\hat{u}^{(n)}(x)$ принимает значение $\hat{u}_{n+0.5}^{(n)}$.

При $x = x_{n+0.5}$ решение $\hat{u}^{(n+0.5)}(x)$ принимает значение $v_{n+0.5}$.

Разность решений «на старте» – то есть при $x = x_{n+0.5}$ – составит

$$\hat{u}_{n+0.5}^{(n)} - v_{n+0.5}.$$

Эта разность невелика и совпадает с $e_{n+0.5}$, см. (16.33).

Разность тех же решений при $x = x_{n+1}$ составит

$$\hat{u}^{(n)}(x_{n+1}) - \hat{u}^{(n+0.5)}(x_{n+1}) = \hat{u}_{n+1}^{(n)} - \hat{u}_{n+1}^{(n+0.5)}.$$

С учетом того, что

$$x_{n+1} = x_{n+0.5} + 0.5h$$
,

на основе свойства близких решений задачи Коши получим

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} - u_{n+1}^{(n+0.5)} = (1 + O(0.5h))(u_{n+0.5}^{(n)} - v_{n+0.5})$$
(16.36)

В силу (16.36) и (16.33)

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} - u_{n+1}^{(n+0.5)} = (1 + O(0.5h))e_{n+0.5} =$$

$$= A(x_n, v_n) \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + o(h^{p+1})$$
(16.37)

Шаг VII

Из (16.32) и (16.34) выразим значения решений вспомогательных задач:

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} = v_{n+1} + A(x_n, v_n)h^{p+1} + o(h^{p+1}), \tag{16.38}$$

$$\hat{u}_{n+1}^{(n+0.5)} = \hat{v}_{n+1} + A(x_n, v_n) \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + o(h^{p+1}). \tag{16.39}$$

Вычтем (16.39) из (16.38):

$$\hat{u}_{n+1}^{(n)} - u_{n+1}^{(n+0.5)} =$$

$$= v_{n+1} - \hat{v}_{n+1} + A(x_n, v_n)(h^{p+1} - \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1}) + o(h^{p+1})$$
(16.40)

Левые части формул (16.37) и (16.40) одинаковы, приравняем правые:

$$v_{n+1} - \hat{v}_{n+1} + A(x_n, v_n)(h^{p+1} - \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1}) + o(h^{p+1}) =$$

$$= A(x_n, v_n) \left(\frac{h}{2}\right)^{p+1} + o(h^{p+1})$$

откуда следует

$$\hat{v}_{n+1} - v_{n+1} = A(x_n, v_n) h^{p+1} \left(1 - \left(\frac{1}{2}\right)^p\right) + o(h^{p+1}). \tag{16.41}$$

Шаг VIII

Пренебрегая бесконечно малыми высоких порядков малости,

запишем (16.41) в виде

$$\hat{v}_{n+1} - v_{n+1} \approx A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} \cdot (1 - \left(\frac{1}{2}\right)^p),$$

что означает

$$e_{n+1} \approx A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} \approx \frac{\hat{v}_{n+1} - v_{n+1}}{2^p - 1} \cdot 2^p = 2^p \cdot S$$
 (16.42)

Утверждение 3 доказано.

Выводы

При выполнении условий, гарантирующих существование и единственность решения задачи Коши, включая условия на гладкость функции f(x,u), гладкость решений задач (16.30)-(16.31) и представление локальных погрешностей в виде (16.32)-(16.34), для двойного счета с половинным шагом при достаточно малом h

$$e^{n+1} \approx A(x_n, v_n) \cdot h^{p+1} \approx 2^p \cdot S$$

то есть величина $2^p \cdot S$ может служить оценкой неизвестного главного члена локальной погрешности в точке (x_{n+1}, v_{n+1}) .

Решение задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений

Рассмотрим задачу Коши для линейной автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) $\it m$ -го порядка вида

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = Au \\ u(x_0) = u_0 \end{cases} \tag{16.48}$$

с матрицей A размерности $m \times m$.

Пусть u = 0 – устойчивое равновесие системы.

Пусть λ_i , i=1,...m – собственные числа матрицы A.

Так как u = 0 – устойчиво, их действительные части отрицательны:

$$Re(\lambda_i) < 0, i = 1, ...m$$
.

Определение. Система ОДУ (16.48) с устойчивым равновесием u=0 называется жесткой, если

$$\max_{i=1,\dots m} \left| Re(\lambda_i) \right| >> \min_{i=1,\dots m} \left| Re(\lambda_i) \right| \tag{16.49}$$

(модули действительных частей собственных чисел существенно различны, причем сами действительные части имеют **отрицательный** знак).

Существенным свойством жесткой системы ОДУ является следующее:

- решение содержит несколько компонент, среди которых есть быстро затухающие и затухающие медленно;
- имеется участок интегрирования, на котором влияние быстро затухающей компоненты является достаточно заметным (такой участок называют погранслоем);
- после того, как погранслой пройден, быстро затухающая компонента не оказывает существенного влияния на решение;
- после прохождения погранслоя решение меняется достаточно медленно, но попытки увеличить шаг численного интегрирования могут приводить к некорректным численным результатам и вычислительной неустойчивости;
- применение специальных методов решения задачи Коши позволяет снять ограничение на выбор шага интегрирования после прохождения погранслоя.

Рассмотрим указанные проблемы на модельном примере.

Модельная задача – пример жесткой системы ОДУ

Рассмотрим пример жесткой системы ОДУ – линейную автономную систему 2-го порядка. На этом примере, применяя метод Эйлера, исследуем особенности явных и неявных методов решения задачи Коши для жестких систем ОДУ и покажем свойство вычислительной неустойчивости.

Рассмотрим задачу

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = Au \\ u(x_0) = u_0 \end{cases} \tag{16.50}$$

где неизвестной функцией является

$$u(x) = \begin{pmatrix} u^{(1)}(x) \\ u^{(2)}(x) \end{pmatrix},$$

начальному условию соответствует уравнение

$$u(x_0) = \begin{pmatrix} u^{(1)}(x_0) \\ u^{(2)}(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0^{(1)} \\ u_0^{(2)} \end{pmatrix} = u_0$$

Правую часть системы определяет матрица A размерности 2×2 с постоянными коэффициентами:

$$Au = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^{(1)} \\ u^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}u^{(1)} + a_{12}u^{(2)} \\ a_{21}u^{(1)} + a_{22}u^{(2)} \end{pmatrix}.$$

Полагаем, что матрица $\it A$ имеет собственные числа

$$\lambda_1 = -1000, \ \lambda_2 = -0.01.$$
 (16.51)

Они отрицательны и существенно отличаются по модулю.

Тогда система ОДУ (16.50) имеет нулевое равновесие u=0 типа «устойчивый узел».

Система (16.50) является жесткой, потому что

$$\lambda_1 \ll \lambda_2 < 0 \tag{16.52}$$

Построим точное решение задачи Коши.

Обозначим собственные векторы матрицы $\,A\,$ через $\,W_1,\,\,W_2\,$. Тогда решение (16.50) имеет вид

$$u(x) = \alpha_1 W_1 e^{-1000(x - x_0)} + \alpha_2 W_2 e^{-0.01(x - x_0)}$$
(16.53)

где α_1, α_2 – коэффициенты разложения начального условия u_0 по базису из собственных векторов:

$$u(x_0) = u_0 = \alpha_1 W_1 + \alpha_2 W_2$$
.

Точное решение жесткой системы ОДУ (16.50) имеет следующие свойства:

Свойство 1. При $x\to +\infty$ решение u(x) жесткой системы ОДУ (16.50) стремится к равновесию u=0: $\lim_{x\to +\infty} u(x)=0$

(что и следовало ожидать, так как система является линейной автономной и $\it u=0$ – устойчивый узел).

Свойство 2. Решение u(x) жесткой системы ОДУ (16.50) состоит из двух компонент. Первая компонента

$$\alpha_1 W_1 e^{-1000(x-x_0)}$$

достаточно быстро стремится к нулю, а вторая компонента

$$\alpha_2 W_2 e^{-0.01(x-x_0)}$$

стремится к нулю достаточно медленно.

Таким образом, влияние быстрого слагаемого на решение (16.53) достаточно быстро исчезает, и решение задачи (16.50) при достаточно больших x определяется медленно меняющимся слагаемым.

Применяя численные методы, проверим, сохранит ли численное решение жесткой системы ОДУ принципиально важное свойство точного решения: стремление к нулевому равновесию при $x_n \to +\infty$.

Решение жесткой системы ОДУ явным методом Эйлера

Решим задачу (16.50) явным методом Эйлера.

В данном случае метод принимает вид

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n A v_n = (E + h_n A) v_n \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$
 (16.54)

Утверждение 7. При решении задачи (16.50) явным методом Эйлера (16.54) с постоянным шагом интегрирования $h_n = h = const$ численное решение стремится к нулевому равновесию при $x_n \to +\infty$ тогда и только тогда, когда

$$0 < h < \frac{2}{\max\left(\left|\lambda_{1}\right|, \left|\lambda_{2}\right|\right)} = \frac{2}{\left|\lambda_{1}\right|}.$$

Доказательство

Пусть в методе (16.54) $h_n = h = const$. Тогда

$$v_{n+1} = (E + hA)v_n = (E + hA)^2v_{n-1} = \dots = (E + hA)^{n+1}v_0$$

Так как $v_0=u_0=\alpha_1W_1+\alpha_2W_2$, численное решение имеет следующую структуру:

$$v_{n+1} = (E + hA)^{n+1} (\alpha_1 W_1 + \alpha_2 W_2) = \alpha_1 (E + hA)^{n+1} W_1 + \alpha_2 (E + hA)^{n+1} W_2$$

Используем свойства собственных чисел и собственных векторов. Так как

$$AW_1 = \lambda_1 W_1 \Longrightarrow (E + hA)W_1 = (1 + \lambda_1 h)W_1$$
,

запишем

$$(E + hA)^{n+1}W_1 = (E + hA)^n (E + hA)W_1 = (E + hA)^{n-1} (1 + \lambda_1 h)W_1 =$$

$$= (1 + \lambda_1 h)(E + hA)^n W_1 = \dots = (1 + \lambda_1 h)^{n+1} W_1$$

Аналогично для собственного числа $\,\lambda_2\,$ и собственного вектора $\,W_2\,$:

$$(E + hA)^{n+1}W_2 = (1 + \lambda_2 h)^{n+1}W_2$$

(В выкладках используется следующее: W_1 является собственным вектором матрицы A и поэтому остается собственным вектором для матриц (E+hA) и $(E+hA)^{n+1}$. В двух последних случаях вектору W_1 соответствуют собственные числа $(1+\lambda_1h)$ и $(1+\lambda_1h)^{n+1}$ соответственно. Аналогично для W_2).

Таким образом,

$$v_{n+1} = \alpha_1 (1 + \lambda_1 h)^{n+1} W_1 + \alpha_2 (1 + \lambda_2 h)^{n+1} W_2.$$
(16.55)

(Численное решение является линейной комбинацией собственных векторов, а коэффициенты этой комбинации определяются начальными условиями задачи (16.50), собственными числами матрицы A, шагом интегрирования h и номером шага метода n+1).

Из (16.55) следует: для того, чтобы при $x_n \to +\infty$ численная траектория стремилась к нулевому равновесию, необходимо поставить условия $|1+h\lambda_1|<1, |1+h\lambda_2|<1$, то есть $-1<1+h\lambda_1<1$, $-1<1+h\lambda_2<1$. С учетом условия $\lambda_1<<\lambda_2<0$ (см. (16.51)) получим

$$-2 < h\lambda_1 < 0 \Longrightarrow 0 < h < \frac{2}{|\lambda_1|},$$

$$-2 < h\lambda_2 < 0 \Longrightarrow 0 < h < \frac{2}{|\lambda_2|}$$

$$0 < h < \frac{2}{max(|\lambda_1|,|\lambda_2|)} = \frac{2}{|\lambda_1|}.$$

Утверждение 7 доказано.

Вычислительная неустойчивость

Предположим, что шаг h недостаточно мал: $\left|1+h\lambda_{1}\right|>1$, но $\left|1+h\lambda_{2}\right|<1$.

Так как собственные числа отрицательны, $1+h\lambda_1<-1$. Тогда

$$(1+h\lambda_1)^{n+1} = (-1)^{n+1}|1+h\lambda_1|^{n+1}$$

При $x_n \to +\infty$ модуль численного решения (16.55) стремится к бесконечности $\lim_{x_n \to +\infty} |v_n| = \infty$, а само решение на каждом шаге численного метода меняет знак: $\sup_{x_n \to +\infty} (v_n) = -\mathrm{sign} \ (v_{n+1})$.

Свойства такого численного решения не соответствуют свойствам истинного решения задачи, см. (16.53).

Описанное выше явление принято называть вычислительной неустойчивостью.

Комментарий

В рассматриваемом примере получим ограничения

$$0 < h < \frac{2}{1000} = 0.002, \ 0 < h < \frac{2}{0.01} = 200.$$

Для «правдоподобного» численного счета нужно брать шаг 0 < h < 0.002 .

Данное ограничение определяется быстро затухающей компонентой,

не оказывающей существенного влияния на решение.

Решение жесткой системы ОДУ неявным методом Эйлера

Решим задачу (16.50) неявным методом Эйлера.

При решении задачи Коши для системы ОДУ

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = f(x, u) \\ u(x_0) = u_0 \end{cases} \tag{16.1}$$

неявный метод Эйлера записывается в виде

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n f(x_{n+1}, v_{n+1}) \end{cases}$$

При решении задачи (16.50) метод принимает вид

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n A v_{n+1} \end{cases}$$

Так как

$$v_{n+1} - h_n A v_{n+1} = (E - h_n A) v_{n+1} = v_n$$

неявный метод Эйлера представим в виде

$$\begin{cases}
x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\
v_{n+1} = (E - h_n A)^{-1} v_n
\end{cases}$$
(16.56)

Утверждение 8. При решении задачи (16.50), (16.51) неявным методом (16.56) с постоянным шагом интегрирования $h_n=h=const$ численное решение стремится к нулевому равновесию при $x_n \to +\infty$ при любом выборе шага h>0.

Доказательство

Пусть в методе (16.54) $h_n = h = const$.

Тогда

$$v_{n+1} = (E + hA)v_n = (E + hA)^2v_{n-1} = \dots = (E + hA)^{n+1}v_0$$

Так как

$$v_0 = u_0 = \alpha_1 W_1 + \alpha_2 W_2$$
,

численное решение имеет следующую структуру:

$$v_{n+1} = [(E - hA)^{-1}]^{n+1} (\alpha_1 W_1 + \alpha_2 W_2) =$$

$$= \alpha_1 [(E - hA)^{-1}]^{n+1} W_1 + \alpha_2 [(E - hA)^{-1}]^{n+1} W_2$$

Используем свойства собственных чисел и собственных векторов. Так как

$$AW_1 = \lambda_1 W_1 \Longrightarrow (E - hA)W_1 = (1 - \lambda_1 h)W_1 \Longrightarrow (E - hA)^{-1}W_1 = \left(\frac{1}{1 - \lambda_1 h}\right)W_1,$$

запишем

$$[(E - hA)^{-1}]^{n+1}W_1 = \left(\frac{1}{1 - \lambda_1 h}\right)^{n+1} W_1.$$

Аналогично для собственного числа λ_2 и собственного вектора W_2 :

$$[(E - hA)^{-1}]^{n+1}W_1 = \left(\frac{1}{1 - \lambda_1 h}\right)^{n+1} W_1$$

(В этих выкладках вектор W_1 является собственным вектором матрицы A и поэтому собственным вектором для матрицы (E-hA) и собственным вектором для обратной к ней матрицы $(E-hA)^{-1}$. В двух последних слу-

чаях вектору W_1 соответствуют собственные числа $(1-\lambda_1 h)$ и $(1-\lambda_1 h)^{-1}$ соответственно. Далее матрица $(E-hA)^{-1}$ возводится в степень n+1 и вектор W_1 остается собственным вектором для новой матрицы $(E-hA)^{-(n+1)}$. Собственному вектору W_1 соответствует собственное число $(1-\lambda_1 h)^{-(n+1)}$. Аналогично для W_2).

Таким образом,

$$v_{n+1} = \left(\frac{1}{1 - h\lambda_1}\right)^{n+1} \alpha_1 W_1 + \left(\frac{1}{1 - h\lambda_2}\right)^{n+1} \alpha_2 W_2. \tag{16.57}$$

(Численное решение является линейной комбинацией собственных векторов, а коэффициенты этой комбинации определяются начальными условиями задачи (16.50), собственными числами матрицы A, шагом интегрирования h и номером шага метода n+1).

С учетом условия $\lambda_1 << \lambda_2 < 0$ при любом h>0

$$0 < \left(\frac{1}{1 - h\lambda_1}\right) < 1, \ 0 < \left(\frac{1}{1 - h\lambda_2}\right) < 1. \tag{16.58}$$

Из (16.57) и (16.58) следует, что при $x_n \to +\infty$ численная траектория задачи (16.50), (16.51), полученная методом (16.57), стремится к нулевому равновесию при любом h>0 .

Утверждение доказано.

Комментарий

В примере не нужны ограничения на шаг. При любом выборе h>0 вычислительная неустойчивость отсутствует.

Выводы

При решении задачи (16.50), (16.51) явным методом Эйлера приходится выбирать малый шаг, ограничение на который определяется быстро исчезающей компонентой решения, и интегрировать медленно меняющееся решение с малым шагом интегрирования.

Так как после затухания быстро исчезающей компоненты само решение меняется медленно, его можно было бы искать с достаточно большим шагом интегрирования. Явным методом это делать нельзя, мешает вычислительная неустойчивость.

Решение задачи (16.50), (16.51) неявным методом Эйлера не требует ограничений на шаг, медленно меняющееся решение можно вычислить с достаточно большим шагом интегрирования.

Ограничения на выбор шага при решении жестких систем ОДУ типичны для многих явных методов, многие неявные методы свободны от таких ограничений. Недостаток неявных методов – более сложная схема расчета точек численной траектории.

Развитие представлений о жестких системах ОДУ и примеры неявных методов

Понятие жесткой системы уравнений, введенное в начале данного параграфа, можно обобщить на более широкий класс систем ОДУ (не обязательно линейных).

Принципиально важно наличие в таких системах следующих свойств: наличие быстро затухающей и медленно меняющейся компоненты, наличие пограничного слоя, вычислительная неустойчивость многих методов при попытках интегрировать медленно меняющееся решение с недостаточно малым шагом численного интегрирования.

Примеры неявных одношаговых методов типа Рунге-Кутта, а также их канонический вид

1) Неявный метод Эйлера

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot f(x_{n+1}, v_{n+1}) \\ n = 0, 1, 2... \end{cases}$$
 (16.60)

2) Неявный одностадийный метод типа Рунге-Кутта оптимального (2-го) порядка

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot k_1 \\ k_1 = f(x_n + \frac{h_n}{2}, v_n + \frac{h_n}{2} \cdot k_1) \\ n = 0, 1, 2... \end{cases}$$
(16.61)

3) Неявный двухстадийный метод типа Рунге-Кутта 2-го порядка

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + \frac{h_n}{2} \cdot (k_1 + k_2) \\ k_1 = f(x_n, v_n) \\ k_2 = f(x_n + \frac{h_n}{2}, v_n + \frac{h_n}{2} \cdot (k_1 + k_2)) \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$
(16.62)

3) Неявный двухстадийный метод типа Рунге-Кутта 3-го порядка

$$\begin{cases} x_{0}, \ v_{0} = u_{0}, \ x_{n+1} = x_{n} + h_{n}, \\ v_{n+1} = v_{n} + \frac{h_{n}}{2} \cdot (k_{1} + k_{2}) \\ k_{1} = f \left(x_{n} + \frac{3 + \sqrt{3}}{6} \cdot h_{n}, \ v_{n} + \frac{3 + \sqrt{3}}{6} \cdot h_{n} \cdot k_{1} \right) \\ k_{2} = f \left(x_{n} + \frac{3 - \sqrt{3}}{6} \cdot h_{n}, \ v_{n} + h_{n} \cdot \left(-\frac{\sqrt{3}}{3} \cdot k_{1} + \frac{3 + \sqrt{3}}{6} \cdot k_{2} \right) \right) \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$

$$(16.63)$$

4) Неявный двухстадийный метод типа Рунге-Кутта оптимального (4-го) порядка

$$\begin{cases} x_{0}, v_{0} = u_{0}, x_{n+1} = x_{n} + h_{n}, \\ v_{n+1} = v_{n} + \frac{h_{n}}{2} \cdot (k_{1} + k_{2}) \\ k_{1} = f \left(x_{n} + \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} \right) \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot \left(\frac{k_{1}}{4} + \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \right) \cdot k_{2} \right) \right) \\ k_{2} = f \left(x_{n} + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} \right) \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot \left(\left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} \right) \cdot k_{1} + \frac{k_{2}}{4} \right) \right) \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$

$$(16.64)$$

5) Неявный трехстадийный метод типа Рунге-Кутта оптимального (6-го) порядка

$$\begin{cases} x_{0}, \ v_{0} = u_{0}, \ x_{n+1} = x_{n} + h_{n}, \\ v_{n+1} = v_{n} + h_{n} \cdot \left(\frac{5}{18} \cdot k_{1} + \frac{4}{9} \cdot k_{2} + \frac{5}{18} \cdot k_{3}\right) \\ k_{1} = f\left(x_{n} + \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}\right) \cdot h_{n}, \ v_{n} + h_{n} \cdot \left(\frac{5}{36} \cdot k_{1} + \left(\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15}\right) \cdot k_{2} + \left(\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30}\right) \cdot k_{3}\right)\right) \\ k_{2} = f\left(x + \frac{h_{n}}{2}, v_{n} + h_{n} \cdot \left(\left(\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}\right) \cdot k_{1} + \frac{2}{9} \cdot k_{2} + \left(\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24}\right) \cdot k_{3}\right)\right) \\ k_{3} = f\left(x_{n} + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}\right) \cdot h_{n}, \ v_{n} + h_{n} \cdot \left(\left(\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30}\right) \cdot k_{1} + \left(\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15}\right) \cdot k_{2} + \frac{5}{36} \cdot k_{3}\right)\right) \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$

$$(16.65)$$

Неявные одношаговые методы типа Рунге-Кутта записывают в каноническом виде

$$\begin{cases} x_0, \ v_0 = u_0, \ x_{n+1} = x_n + h_n, \\ v_{n+1} = v_n + h_n \cdot F(x_n, v_n, h_n, v_{n+1}) \\ n = 0, 1, 2 \dots \end{cases}$$
 (16.66)

где

$$F(x_n, v_n, h_n) = p_1 \cdot k_1(h_n) + p_2 \cdot k_2(h_n) + \dots + p_s \cdot k_s(h_n). \tag{16.67}$$

Число S — количество стадий — характеризует **трудоемкость** метода.

Неявный метод имеет параметры

$$p_i$$
, $i = 1,...s$

$$\alpha_i$$
, $i = 1,...s$

$$\beta_{ij}$$
, $i = 1,...s$, $j = 1,...s$.

Тогда формулы для расчета k_i (h_n) , i=1,...s, то есть коэффициентов метода, принимают вид

$$k_{1} = f(x_{n} + \alpha_{1} \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot (\beta_{11} \cdot k_{1} + \dots + \beta_{1s} \cdot k_{s}))$$

$$k_{2} = f(x_{n} + \alpha_{2} \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot (\beta_{21} \cdot k_{1} + \dots + \beta_{2s} \cdot k_{s}))$$

$$k_{3} = f(x_{n} + \alpha_{3} \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot (\beta_{31} \cdot k_{1} + \dots + \beta_{3s} \cdot k_{s}))$$

$$\dots$$

$$k_{s} = f(x_{n} + \alpha_{s} \cdot h_{n}, v_{n} + h_{n} \cdot (\beta_{s1} \cdot k_{1} + \beta_{s2} \cdot k_{2} + \dots + \beta_{ss} \cdot k_{s}))$$
(16.68)

Чтобы найти коэффициенты k_i (h_n), i=1,...s, необходимо решить линейную или нелинейную (в зависимости от правой части дифференциального уравнения) систему уравнений.

Поэтому методы типа Рунге-Кутта, заданные формулами (16.66)-(16.68), в общем случае оказываются неявными.