

1 Теоретический материал к семинару №1

1.1 Оценка погрешности по Ричардсону

Пусть некоторая величина U была вычислена на сетке с шагом h , тогда

$$U = U_h + R_h, \quad (1.1)$$

где U_h - вычисленное значение, а R_h - его погрешность. Теперь изменим шаг сетки в r раз. Получим аналогично

$$U = U_{rh} + R_{rh}. \quad (1.2)$$

Если метод сходится к точному решению с порядком p , то

$$R_h = ch^p + o(h^p), \quad (1.3)$$

где c - некоторая константа, независимая от h , причем $c \neq 0$. Записав аналогичное выражение для погрешности расчета с шагом rh и подставив результат в (1.2), а также подставив (1.3) в (1.1) получим

$$U = U_h + ch^p + o(h^p), \quad U = U_{rh} + cr^p h^p + o(h^p). \quad (1.4)$$

Пренебрегая членами более высокого порядка, чем h^p , вычтем из первого уравнения второе, тогда

$$0 = U_h - U_{rh} + ch^p(1 - r^p). \quad (1.5)$$

Выразим из этого равенства ch^p

$$ch^p = \frac{U_{rh} - U_h}{1 - r^p}. \quad (1.6)$$

Если отбросить члены более высокого, чем p порядка, то $R_{rh} = cr^p h^p$. Отсюда, учитывая (1.6), получим

$$R_{rh} = \frac{U_{rh} - U_h}{r^{-p} - 1}. \quad (1.7)$$

Эта формула дает асимптотически точную оценку погрешности на более подробной сетке. Добавив ее к U_{rh} , мы можем получить ответ с более высоким порядком точности

$$U_{rh}^* = U_{rh} + R_{rh} = U_{rh} + \frac{U_{rh} - U_h}{r^{-p} - 1} = \frac{r^{-p} U_{rh} - U_h}{r^{-p} - 1}. \quad (1.8)$$

1.2 Оценка погрешности по Эйткену

Недостатком рассмотренного метода вычисления погрешности является необходимость знания порядка метода p . Если сделать два последовательных сгущения в одинаковое число раз, то можно оценить порядок. В самом деле, рассмотрим отношение

$$\frac{U_{r^2h} - U_{rh}}{U_{rh} - U_h} = \frac{(1 - r^p) cr^p h^p}{(1 - r^p) ch^p} = r^p. \quad (1.9)$$

Здесь было дважды использовано выражение (1.6). Подставив r^p в выражение

$$R_{r^2h} = \frac{U_{r^2h} - U_{rh}}{r^{-p} - 1}. \quad (1.10)$$

получим требуемую оценку погрешности

$$R_{r^2h} = \frac{U_{r^2h} - U_{rh}}{\frac{U_{rh} - U_h}{U_{r^2h} - U_{rh}} - 1}. \quad (1.11)$$

Аналогично (1.8) можно вычислить уточненное решение

$$U_{r^2h}^* = U_{r^2h} + R_{r^2h} = U_{r^2h} + \frac{U_{r^2h} - U_{rh}}{\frac{U_{rh} - U_h}{U_{r^2h} - U_{rh}} - 1}. \quad (1.12)$$

1.3 Рекуррентное сгущение

Формулы (1.8) и (1.12) позволяют получать уточненные решения. Если имеются N последовательных расчетов на сгущающихся сетках, то группируя 1 и 2, 2 и 3, 3 и 4 и т.д. по формуле (1.8) получим $N - 1$ уточненных значений. Для сгущения по Эйткену вместо пар расчетов следует использовать тройки: 1,2 и 3, затем 2,3 и 4 и т.п. При этом получится уже $N - 2$ уточненных значений.

К полученному набору уточненных значений можно вновь применить описанную выше процедуру, но для уточнения по Ричардсону потребуются знание порядка точности уточненных значений, полученных на предыдущем шаге. Для уточнения по Эйткену это не нужно.

Ясно, что этот процесс можно продолжать, пока не останутся два уточненных значения в методе Ричардсона и три – в методе Эйткена.

1.4 Эффективный порядок метода

Из формулы (1.9) можно выразить эффективный порядок метода p

$$p = \log_r \frac{U_{r^2h} - U_{rh}}{U_{rh} - U_h}. \quad (1.13)$$

Для вычисления порядка требуется 3 сетки. Если имеются N расчетов, то по 1,2 и 3 расчету можно получить первую оценку порядка, по 2,3 и 4 – вторую и т.д. – всего $N - 2$ оценок. Потом можно построить график эффективного порядка, отложив по оси абсцисс номер тройки, а по оси ординат – соответствующее значение p . По такому графику можно наблюдать, к какому значению стремится p .

Существует еще один способ определения эффективного порядка – построение графика $\lg |U_{rh} - U_h|$ от $-\lg h$ (или от $\lg N$, где N – число интервалов сетки). Действительно, согласно (1.6)

$$\lg |U_{rh} - U_h| = \lg (|c| (1 - r^p)) + (-p) (-\lg h). \quad (1.14)$$

Отсюда видно, что график должен быть близок к прямой, тангенс угла наклона которой даст нам $-p$. Угол наклона можно определить, например, методом наименьших квадратов (в системе MATLAB Tools/Basic Fitting/linear в окне графика).

Замечание. Выше при выводе и конечной записи всех формул использовался шаг сетки h и множитель r , означающий отношение шага сгущенной сетки к шагу исходной. Часто более удобно использовать число интервалов сетки N , а в качестве множителя r – отношения числа интервалов новой сетки к числу интервалов старой. Очевидно, что

«новый» r будет обратной величиной к «старому». Поэтому для перехода от шагов сетки к числам интервалов необходимо провести следующие замены:

$$r \rightarrow r^{-1}, U_{rh} \rightarrow U_{rN}, U_{r^2h} \rightarrow U_{r^2N}, R_{rh} \rightarrow R_{rN}, R_{r^2h} \rightarrow R_{r^2N}. \quad (1.15)$$

Например, в этих обозначениях основная формула (1.7) будет выглядеть как

$$R_{rN} = \frac{U_{rN} - U_N}{r^p - 1}. \quad (1.16)$$

1.5 Задачи к семинару №1

1. Вычислить $f = 21b^2 - 2a^2 + 44b^4 - 10a^2b^2 + \frac{a}{2b}$ при $a = 77617$ и $b = 33096$.
2. Вычислить собственные значения матрицы \mathbf{A} аналитически и средствами MATLAB. Отобразить результат на комплексной плоскости.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 10^{-2m} \\ 1 & 1 & \ddots & & & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & 1 \end{pmatrix}_{2m \times 2m}$$

Расчет выполнить при $m = 20, 23, 30$.

3. Получить формулу Симпсона из формулы трапеций с помощью однократного сгущения сетки в 2 раза и формулы Рундсона (1.7).
4. Вычислить интеграл

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

численно по формуле трапеций при числе интервалов сетки $N = 16, 32, 64, 128, 256$. Затем с помощью формулы (1.13) или формулы (1.14) построить график эффективного порядка. Провести уточнение решения по формуле Рундсона, получив из 5 расчетных значений 4 уточненных. По уточненным значениям вновь построить график эффективного порядка.

5. Вычислить интеграл

$$\int_0^1 \frac{1}{2\sqrt{x}} dx$$

по формуле средних прямоугольников при тех же N . Определить эффективный порядок, провести уточнение по Эйткену (получив 3 уточненных значения), вновь определить эффективный порядок. После этого провести еще одно уточнение решения по Эйткену и сравнить полученный результат с точным значением интеграла.

2 Теоретический материал к семинару №2

Схема Рунге-Кутты для решения задачи Коши

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}, t) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases} \quad (2.1)$$

имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \tau_n \sum_{k=1}^s b_k \boldsymbol{\omega}_k, & \tau_n &= t_{n+1} - t_n; \\ \boldsymbol{\omega}_k &= \mathbf{f} \left(\mathbf{u}_n + \tau_n \sum_{l=1}^L \alpha_{kl} \boldsymbol{\omega}_l, t_n + \tau_n a_k \right), & 1 \leq k \leq s. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь τ_n - шаги по времени, s - число стадий, коэффициенты α_{kl} образуют матрицу Бутчера \mathbf{A} , а a_k и b_k - элементы векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} , вместе с матрицей Бутчера полностью задающих схему Рунге-Кутты.

Для реализации на компьютере в системе MATLAB удобнее записать (2.2) в векторной форме

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \tau_n \boldsymbol{\omega} \mathbf{b}^T, & \tau_n &= t_{n+1} - t_n; \\ \boldsymbol{\omega}_k &= \mathbf{f}(\mathbf{u}_n + \tau_n \boldsymbol{\omega} \boldsymbol{\alpha}_k^T, t_n + \tau_n a_k), & 1 \leq k \leq s, \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $\boldsymbol{\omega}_k$ - k -тая строка матрицы промежуточных результатов $\boldsymbol{\omega}$, первоначально полагаемой нулевой, \mathbf{b} - вектор-строка коэффициентов b и $\boldsymbol{\alpha}_k$ - k -тая строка матрицы Бутчера. Верхний индекс T означает транспонирование.

2.1 Задачи к семинару №2

1. Записать расчетные формулы для схемы Кутты, если

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1/6 \\ 1/3 \\ 1/3 \\ 1/6 \end{pmatrix}^T.$$

2. Перейти к длине дуги в задаче

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = u^2 + t^2 \\ u(t_0) = u_0 \end{cases}.$$

3. Реализовать схему Кутты на компьютере.

а) Правая часть:

```
function y = f(t, u)
    y = u + t^2 + 1;
end
```

Начальное условие:

$$u_0 = 0.5;$$

b) Правая часть:

```
function y = f(t, u)
    om      = [ sin(t) cos(t) sin(t+pi/4) ];
    Omega   = [ 0      -om(3) om(2);
                om(3)  0      -om(1);
                -om(2) om(1)  0      ];
    y = Omega * u;
end
```

Начальное условие:

```
u0 = [1; -0.5; 0.6];
```

Временной отрезок для обеих функций - от 0 до 1. Провести 7 расчетов на сгущающихся вдвое сетках, начиная с минимально возможной сетки из 1 интервала. Для первой функции построить график эффективного порядка метода от числа интервалов сетки (по последнему узлу, т.е. в последнем узле сетки при $t = 1$), для второй - построить график решения (3 кривые на одном графике).

4. Реализовать явную схему Рунге-Кутты в общем виде. Для отладки использовать 7-стадийную схему Хаммуда 6 порядка:

```
butcher = [ 0      0      ...
            0      0      ...
            0      0      0;
            4/7    0      ...
            0      0      ...
            0      0      0;
            115/112 -5/16  ...
            0      0      ...
            0      0      0;
            589/630 5/18   ...
            -16/45  0      ...
            0      0      0;
            229/1200-29/6000*5^.5 119/240-187/1200*5^.5 ...
            -14/75+34/375*5^.5   -3/100*5^.5   ...
            0      0      0;
            71/2400-587/12000*5^.5 187/480-391/2400*5^.5 ...
            -38/75+26/375*5^.5   27/80-3/400*5^.5   ...
            (1+5^.5)/4           0      0;
            -49/480+43/160*5^.5   -425/96+51/32*5^.5 ...
            52/15-4/5*5^.5        -27/16+3/16*5^.5 ...
            5/4-3/4*5^.5          5/2-0.5*5^.5      0 ];
a      = [ 0      4/7 5/7 6/7 (5-5^.5)/10 (5+5^.5)/10 1      ];
b      = [ 1/12 0   0   0   5/12      5/12      1/12  ];
```

Провести 7 расчетов на сгущающихся вдвое сетках, начиная с минимально возможной сетки из 1 интервала. Протестировать на тех же тестовых функциях, построить такие же графики.

3 Теоретический материал к семинару №3

Семейство одностадийных схем Розенброка для задачи Коши

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}, t) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases} \quad (3.1)$$

имеет следующий вид:

$$\begin{cases} (\mathbf{E} - \alpha\tau\mathbf{f}_{\mathbf{u}}) \boldsymbol{\omega} = \mathbf{f}\left(\mathbf{u}, t + \frac{\tau}{2}\right) \\ \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \tau \operatorname{Re} \boldsymbol{\omega} \end{cases} \quad (3.2)$$

Здесь α - параметр схемы, τ - шаг схемы по времени, $\mathbf{f}_{\mathbf{u}}$ - матрица производных правой части по вектору \mathbf{u} , \mathbf{u} и $\hat{\mathbf{u}}$ - численное решение в текущий и следующий моменты времени соответственно. Практический интерес представляют схемы из семейства одностадийных схем Розенброка при

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \alpha = 1, \quad \alpha = \frac{1+i}{2}.$$

Векторная переменная $\boldsymbol{\omega}$ получается из решения системы линейных уравнений с правой частью $\mathbf{f}(\mathbf{u}, t + \tau/2)$ и матрицей системы $\mathbf{E} - \alpha\tau\mathbf{f}_{\mathbf{u}}$. Эту матрицу *не следует* обращать численно, так как если вычислять $\boldsymbol{\omega}$ как

$$(\mathbf{E} - \alpha\tau\mathbf{f}_{\mathbf{u}})^{-1} \mathbf{f}\left(\mathbf{u}, t + \frac{\tau}{2}\right),$$

то это потребует большего объема вычислений, чем решение линейной системы. Особенно заметна разница в производительности, если матрица системы имеет ленточную форму, что часто бывает при применении схем Розенброка к решению систем дифференциальных уравнений, возникающий при численном решении уравнений в частных производных.

Матрицу производных $\mathbf{f}_{\mathbf{u}}$ при реализации схем Розенброка в общем виде лучше вычислять численно с помощью центральной разности с шагом $\Delta u = 10^{-5}$. Ее надо строить таким образом, чтобы в 1 строке $\mathbf{f}_{\mathbf{u}}$ были производные 1 компоненты вектор-столбца \mathbf{f} , по всем компонентам \mathbf{u} , во 2 строке - производные 2 компоненты \mathbf{f} по всем компонентам \mathbf{u} и т.д.

3.1 Задачи к семинару №3

1. Решить задачу Коши с правой частью, задаваемой функцией

```
function y = f(t, u)
    y = [-50*(u(1) - cos(t)) + 10*u(2);
        1.2*u(1) - u(2)*u(1)];
end
```

на временном отрезке $[0; 0.75]$ при начальном значении $\mathbf{u}_0 = [1; 1]$ с помощью явной схемы Рунге-Кутты второго порядка типа предиктор-корректор, задаваемой матрицей Бутчера \mathbf{A} и векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} (см. предыдущий семинар)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}^T.$$

Расчет провести с шагом по времени $\tau = 1/8$ и $\tau = 1/128$.

2. Реализовать семейство одностадийных схем Розенброка в общем виде. Для тестирования использовать задачу Коши из предыдущей задачи. Положить на один график результаты расчета этой задачи при $\alpha = 1/2, \alpha = 1, \alpha = (1 + i)/2$. Взять шаг по времени $\tau = 1/8$. На тот же график положить результат расчета, полученный явной схемой, при $\tau = 1/128$. На графике должны присутствовать обе компоненты вектора решения (т.е. всего должно быть 8 кривых). Для построения графика удобно использовать, например, такую команду

```
plot(t,cros,'r+- ',t,ros05,'g+- ',t,ros1,'b+- ',t0,rk2,'k');
```

Здесь t задает редкую сетку по времени, а $t0$ – более подробную.

Объяснить поведение кривых численного решения в терминах A -устойчивость, Lp -устойчивость, t -монотонность.

4 Теоретический материал к семинару №4

Дифференциально-алгебраическая система содержит как дифференциальные, так и алгебраические уравнения. В общем виде она записывается как

$$\begin{cases} \mathbf{G} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{u}, t) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases} \quad (4.1)$$

где \mathbf{G} - матрица коэффициентов при производных.

Для ее решения можно использовать семейство схем Розенброка, заменив в них матрицу \mathbf{E} матрицей \mathbf{G}

$$\begin{cases} (\mathbf{G} - \alpha\tau\mathbf{F}_{\mathbf{u}}) \boldsymbol{\omega} = \mathbf{F}(\mathbf{u}, t + \frac{\tau}{2}) \\ \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \tau \text{Re } \boldsymbol{\omega} \end{cases} \quad (4.2)$$

Здесь α - параметр схемы, τ - шаг схемы по времени, $\mathbf{F}_{\mathbf{u}}$ - производная правой части по переменной \mathbf{u} , \mathbf{u} и $\hat{\mathbf{u}}$ - численное решение в текущий и следующий моменты времени соответственно.

Для получения второго порядка в одностадийной схеме Розенброка для задачи Коши необходимо брать $\alpha = 1/2$ или $\alpha = (1 + i)/2$. Для неавтономных дифференциально-алгебраических систем даже при этих α получить второй порядок точности не удастся из-за противоречивых требований к выбору смещения по времени при вычислении правой части. Поэтому для получения второго порядка необходимо провести автономизацию, то есть убрать явную зависимость от времени в правой части.

4.1 Задачи к семинару №4

1. Требуется рассчитать работу транзисторного усилителя. Для этого необходимо решить дифференциально-алгебраическую систему.

Параметры электрической схемы:

```
global r0 r1 r2 r3 r4 r5 ub;
r0 = 1000; r1 = 9000; r2 = r1; r3 = r1; r4 = r1; r5 = r1;
c1 = 1e-6; c2 = 2e-6; c3 = 3e-6; ub = 6;
```

Начальные условия:

```
u0 = [0; ub*r1/(r1+r2); ub*r1/(r1+r2); ub; 0];
```

Матрица коэффициентов при производных:

```
G = [-c1  c1  0  0  0;
      c1 -c1  0  0  0;
      0   0 -c2  0  0;
      0   0  0 -c3  c3;
      0   0  0  c3 -c3];
```

Правая часть:

```
function y = ue(t)
    y = 0.1*sin(200*pi*t);
end

function y = ff(u)
    y = 1e-6*(exp(u/0.026)-1);
end

function y = F(t, u)
    global r0 r1 r2 r3 r4 r5 ub;
    y = [u(1)/r0-ue(t)/r0;
          0.01*ff(u(2)-u(3))-ub/r2+u(2)*(1/r1+1/r2);
          u(3)/r3-ff(u(2)-u(3));
          0.99*ff(u(2)-u(3))-ub/r4+u(4)/r4;
          u(5)/r5];
end
```

Расчет провести с шагом $h = 1/5000$ на временном отрезке от 0 до 0.3 при $\alpha = 1/2$ и $\alpha = (1+i)/2$. Вывести результат расчета на график (на одном графике будет 2 семейства кривых для двух разных α , в каждом семействе по 5 кривых, соответствующих 5 компонентам \mathbf{u}). Объяснить разницу между численными решениями при разных α .

2. Определить эффективный порядок метода с помощью сгущения сеток. Для экономии времени расчет вести до $t = 0.01$. Провести автономизацию и вновь определить эффективный порядок.

5 Теоретический материал к семинару №5

Необходимо решить краевую задачу

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \left((k_0 + k_1 u^2) \frac{du}{dx} \right) = f(x) \\ u(a) = u(b) = 0 \end{cases}, \quad (5.1)$$

где $[a; b]$ - отрезок, на котором ищется решение.

Для этой задачи можно написать следующую разностную схему:

$$\begin{cases} (u_{n+1} - u_n) \left(k_0 + k_1 \frac{u_n^2 + u_{n+1}^2}{2} \right) - (u_n - u_{n-1}) \left(k_0 + k_1 \frac{u_n^2 + u_{n-1}^2}{2} \right) - h^2 f_n = 0 \\ u_0 = u_N = 0 \end{cases}. \quad (5.2)$$

Здесь h - шаг равномерной сетки, N - число интервалов сетки. Данная система уравнений является нелинейной и решать ее лучше всего методом Ньютона.

Многомерный метод Ньютона для задачи

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0 \quad (5.3)$$

является итерационным и выглядит так:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x}_s)}{\partial \mathbf{x}_s} \Delta \mathbf{x}_s = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_s) \\ \mathbf{x}_{s+1} = \mathbf{x}_s + \Delta \mathbf{x}_s \end{cases}, \quad (5.4)$$

где $\partial \mathbf{F}(\mathbf{x}_s)/\partial \mathbf{x}_s$ - матрица первых производных. В качестве условия окончания итераций можно взять

$$\|\Delta \mathbf{x}_s\| < \varepsilon, \quad (5.5)$$

где $\varepsilon \approx 10^{-12}$ для 64-разрядных вычислений. Сходимость метода сильно зависит от выбранного начального приближения. Вблизи решения сходимость квадратичная, вдали от него ее может вообще не быть. Одно из возможных решений – использовать вектор из случайных чисел. В случае неудачи можно сгенерировать еще один и повторить расчет, пока расчет не получится.

5.1 Задачи к семинару №5

Уточним условие. Отрезок, на котором следует искать решение - $[-1; 1]$, число интервалов сетки $N = 128$, $k_0 = 1$, $k_1 = 0.05$, в качестве начального приближения в данном случае удобно брать нулевой вектор. Функция $f(x)$ в правой части задается так:

```
function y = ff(x)
    y = 100*exp(-(10*(x-0.5)).^2);
end
```

Построить график решения.