

Санкт-Петербургский государственный университет

ЛЕВИН Кирилл Евгеньевич

Выпускная квалификационная работа

***Построение интерполянтов высокого порядка для
коллокационных методов***

Уровень образования: бакалавриат

Направление 01.03.02 «Прикладная математика и информатика»

Основная образовательная программа СВ.5005.2020 «Прикладная
математика, фундаментальная информатика и программирование»

Кафедра информационных систем

Научный руководитель:

канд. физ.-мат. наук, доцент

Еремин А. С.

Рецензент:

д-р физ.-мат. наук, профес-
сор

Кривовичев Г. В.

Санкт-Петербург

2024 г.

Saint Petersburg State University

LEVIN Kirill Evgenevich

Bachelor's Thesis

High order interpolants for collocation methods

Education level: bachelor

Speciality 01.03.02 «Applied mathematics and computer science»

Programme CB.5005.2020 «Applied mathematics and computer science»

Scientific supervisor:

PhD, A. S. Eremin

Reviewer:

Dr. Sci., G. V. Krivovichev

Saint Petersburg

2024

Содержание

Введение	3
Постановка задачи	3
Обзор литературы	4
Глава 1. Явные методы	5
1.1. Численное решение дифференциальных уравнений	5
1.2. Порядок точности метода	5
1.3. Непрерывные методы	8
1.4. Применение непрерывных методов в задачах с запаздыванием	11
1.5. Практическая оценка точности метода	12
Глава 2. Неявные методы	13
2.1. Преимущества и недостатки использования неявных методов	13
2.2. Коллокационные методы	15
Глава 3. Построение непрерывного метода высокого порядка . . .	17
3.1. Объединение подходов	17
3.2. Повышение равномерного порядка метода	19
3.2.1 Пошаговое улучшение	19
3.2.2 Точки сверхсходимости	20
3.2.3 Примеры точек сверхсходимости и построения интер- полянта 5-го порядка для метода типа Гаусса с тремя этапами	21
Глава 4. Практическая реализация	24
4.1. Программная среда	24
4.2. Тонкости реализации	24
4.3. Оценка полученного метода	25
Заключение	30
Список литературы	30

Введение

В современной математике и прикладных научных исследованиях задачи, связанные с дифференциальными уравнениями с запаздывающим аргументом, занимают особое место из-за их способности описывать процессы, происходящие в динамических системах, где текущее состояние зависит не только от настоящего, но и от прошлых значений. Исследование коллокационных методов численного решения дифференциальных уравнений обусловлено существованием так называемых жёстких задач, для которых обычные методы дают большую погрешность вычислений или не годятся вовсе. Актуальность данной выпускной квалификационной работы обусловлена необходимостью разработки эффективных численных методов для решения таких уравнений, что в свою очередь требует построения интерполянтов высокого порядка. Практическая значимость работы обусловлена возможностью применения разработанных методов в инженерных расчетах, физике, биологии и экономике, где моделирование процессов с учетом истории изменений является ключевым аспектом.

Численное решение дифференциальных уравнений является необходимым для получения аналитических результатов в случае сложных уравнений или когда аналитическое решение неизвестно. Результаты исследования могут быть использованы для повышения точности и ускорения вычислений в задачах, требующих учета запаздывающих эффектов. Таким образом, данная работа представляет собой важный шаг в развитии численных методов решения дифференциальных уравнений и может оказать значительное влияние на теоретические и практические аспекты их применения.

Постановка задачи

Целью настоящей работы является исследование существующих методов Рунге — Кутты с гауссовой коллокацией для решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), анализ их сходимости при решении дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом (ДУЗА) и построение на их основе непрерывных методов, позволяющих достичь порядка сходимости, аналогичного случаю ОДУ. Для достижения поставленной цели

были определены следующие задачи:

1. Изучить существующие гауссовы методы Рунге — Кутты для решения ОДУ. Используя коллокационный полином в качестве непрерывного расширения метода, оценить порядок их сходимости при решении ДУЗА.
2. Построить наиболее дешёвым образом интерполянты необходимого порядка для получения нужного порядка сходимости.
3. Провести серию вычислительных экспериментов для подтверждения заявляемого порядка сходимости.
4. Проанализировать полученные результаты и сформулировать рекомендации по их применению в различных областях.

Обзор литературы

В монографии Беллена и Ценнаро [3] содержатся сведения широкого спектра по численному решению ДУЗА, особенно по методам типа Рунге — Кутты. В книге Хайрера [1] можно найти теоретические и практические знания по применению явных и неявных, в частности, коллокационных методов Рунге — Кутты, а так же представлены примеры наиболее распространённых и известных методов. Во второй части этой книги [2] даны более глубокие сведения о применении неявных методов, их практической реализации и видам. Технический отчёт [4] стал источником для упомянутых тестовых уравнений различной природы.

Глава 1. Явные методы

1.1 Численное решение дифференциальных уравнений

Рассмотрим задачу. В области $D = \{x_0 \leq x \leq x_N, |y^i - y_0^i| \leq \hat{y}^i\} \in \mathbb{R}^{m+1}$ определена функция

$$f \equiv f(x, y), \quad (x, y) \in D. \quad (1)$$

Будем считать, что y и f — вектор-столбцы длины m .

Требуется найти решение уравнения

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (2)$$

с начальным условием

$$y_0 = y(x_0). \quad (3)$$

Одношаговыми методами называют методы, которые дают последовательные приближения $y_n + 1$ точных значений искомой функции $y(x_{n+1})$, основываясь на заранее заданных или ранее вычисленных значениях y_n узлах сетки x_n . Общий вид такого шага можно записать как

$$y_{n+1} = F(f, x_n, y_n, x_{n+1}, y_{n+1})$$

Можно заметить, что здесь в правой части содержится значение y_{n+1} , методы с такой зависимостью называются неявными, так как в них для нахождения искомого значения необходимо решать алгебраическую систему [2]. Методы, использующие этот подход, будут рассмотрены в следующей главе. В том случае, если такой зависимости нет, метод называется явным.

1.2 Порядок точности метода

Для численных методов решения задач одним из важнейших факторов является точность найденного решения. Повысить точность расчётов позволяет добавление нескольких промежуточных этапов на каждом шаге. Предположим, что правая часть рассматриваемого уравнения (1) имеет непрерывные

частные производные до порядка p . Можно так же отметить, что при этом искомое решение $y(x)$ будет иметь непрерывные производные до $(p + 1)$ -го порядка. Значение искомой функции в очередном узле сетки можно представить рядом Тейлора, если известно значение y_n в текущем.

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \dots + \frac{h^p}{p!} y^{(p)}(x_n) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!} y^{(p+1)}(\xi), \quad \xi \in (x_n, x_{n+1}).$$

Теперь, стоит ограничиться только первыми $p + 1$ членами разложения и заменить точное значение $y(x_n)$ его приближением y_n :

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2} y''_n + \dots + \frac{h^p}{p!} y_n^{(p)}. \quad (4)$$

Значения производных y', y'', \dots могут быть найдены с помощью последовательного дифференцирования функции f :

$$\begin{aligned} y'_n &= f(x_n, y_n), \\ y''_n &= [f'_x + f f'_y]|_{x_n}, \\ y'''_n &= [f''_{xx} + 2f f''_{xy} + f'_y(f'_x + f f'_y)]|_{x_n} \dots \end{aligned}$$

Таким образом для $p = 1$ получим явный метод Эйлера

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n),$$

а для $p = 2$ метод, который обеспечивает совпадение значений производных приближения вплоть до второй

$$y_{n+1} = y_n + h \left[f(x_n, y_n) + \frac{h}{2} (f'_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n) f'_y(x_n, y_n)) \right].$$

Такие расчётные схемы позволяют последовательно получать приближенные значения y_n с различным шагом, но их применение на практике ограничено задачами, в которых даны или легко вычисляются производные f старших порядков и является неэффективным.

Рунге и Кутта развили эту идею и предложили искать приближение (4), не требующее для вычисления поиска значений производных. Этот под-

ход для нахождения последовательных приближений y_{n+1} с использованием теории приближенных рядов Тейлора называется методом Рунге — Кутты.

Пусть s — целое положительное число. s -этапным методом для задачи (2) Рунге — Кутты называется расчётная схема

$$y(x_{n+1}) \approx y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i K_i,$$

$$K_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j), \quad i = 1, \dots, s. \quad (5)$$

Локальным порядком, или порядком точности, метода Рунге — Кутты называется число p , такое что для достаточно гладкой задачи (2), (3) при достаточно малых h выполняется:

$$||y(x_1) - y_1|| \leq Ch^{p+1}$$

То есть ряды Тейлора для точного решения $y(x_{n+1})$ и вычисленного на очередном шаге приближения y_{n+1} совпадают до члена со степенью p включительно.

Рассуждения, описанные выше, с помощью теории помеченных деревьев [1] приводят общему виду условий порядка метода с s этапами.

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1,$$

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2},$$

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3},$$

$$\sum_{i=1}^s b_i \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j = \frac{1}{6} \dots$$

Для удобной записи и демонстрации одношаговых методов типа Рунге — Кутты используют таблицу Бутчера. В ней расположены все коэффициенты метода. Например, для явного четырёхэтапного метода вид этой таблице

представлен в Таблице 1. Подразумевается, что на пустых местах стоят нули.

c_1				
c_2	a_{21}			
c_3	a_{31}	a_{32}		
c_4	a_{41}	a_{42}	a_{43}	
	b_1	b_2	b_3	b_4

Таблица 1: Таблица Бутчера явного метода

1.3 Непрерывные методы

Описанные выше подход, позволяет построить дискретное решение дифференциального уравнения. То есть существуют точки, в которых вычисляется решение, опираясь на значения допустимых погрешностей. При решении некоторых типов задач существует необходимость получения результатов в нескольких промежуточных точках. На первый взгляд решение очевидно: уменьшение длины шага каждый раз, когда это нужно. Но подобный подход является крайне неэффективным, потому что нарушает управление длиной шага, может привести к очень сильному росту времени расчётов и влияния погрешностей округления[1]. Для решения данной проблемы существуют методы с плотной выдачей.

Метод с плотной выдачей, или непрерывный метод Рунге — Кутты, — это метод способный выдавать значение решения во всех промежуточных точках $x^* = x_0 + h\theta$, $0 < \theta \leq 1$. При $\theta = 1$, получим обычный метод Рунге — Кутты. Особенностью этих методов является отсутствие необходимости пересчитывать значения промежуточных приближений

$$K_i^n = f(x_n + c_i h\theta, y_n + \sum_{j=1}^i a_{ij} K_j) \quad (6)$$

для того, чтобы делать промежуточные шаги. Это достигается за счёт введения зависимости значений коэффициентов b_i от параметра θ . Промежуточ-

ные значения $y(x^*)$ вычисляются по формуле

$$y(x_n + h\theta) \approx y_n + h \sum_{i=1}^s b_i(\theta) K_i^n$$

Здесь K^n — вектор промежуточных приближений, вычисленных для y_n ранее.

Таким образом можно получить непрерывное приближение искомой функции на интервалах между узлами сетки без существенного увеличения затрат вычислений. Недостатком данного подхода является необходимость хранить приближения K_i для каждого сделанного классическим способом шага. Но с развитием компьютерных технологий и увеличением объёма оперативной памяти фокус программистов сместился в сторону оптимизации времени работы программ, а не уменьшения затрат памяти.

Для подбора коэффициентов b_i непрерывного метода все так же необходимо решить систему уравнений порядка. Рассмотрим условия, накладываемый на коэффициенты для метода третьего порядка:

$$\begin{aligned} b_1(\theta) + b_2(\theta) + b_3(\theta) &= \theta, \\ b_2(\theta)c_2 + b_3(\theta)c_3 &= \frac{\theta^2}{2}, \\ b_2(\theta)c_2^2 + b_3(\theta)c_3^2 &= \frac{\theta^3}{3}, \\ b_3(\theta)a_{32}c_2 &= \frac{\theta^3}{6}. \end{aligned}$$

Если требовать независимости коэффициентов c_2, c_3, a_{32} от θ , то система неразрешима. Вместо неё рассматривают ослабленные условия. Третьего порядка требуют только в узловых точках, а для непрерывного приближения между ними второго.

$$\begin{aligned}
b_1(\theta) + b_2(\theta) + b_3(\theta) &= \theta, \\
b_2(\theta)c_2 + b_3(\theta)c_3 &= \frac{\theta^2}{2}, \\
b_2(1)c_2^2 + b_3(1)c_3^2 &= \frac{1}{3}, \\
b_3(1)a_{32}c_2 &= \frac{1}{6}.
\end{aligned} \tag{7}$$

Эти порядки называются дискретным и равномерным соответственно.

0				
$\frac{12}{23}$	$\frac{12}{23}$			
$\frac{4}{5}$	$\frac{-68}{375}$	$\frac{368}{375}$		
1	$\frac{31}{144}$	$\frac{529}{1152}$	$\frac{125}{384}$	
	$b_1(\theta)$	$b_2(\theta)$	$b_3(\theta)$	$b_4(\theta)$

Таблица 2: Таблица Бутчера непрерывного метода CREK. Третий дискретный и второй равномерный порядки.

$$\begin{aligned}
b_1(\theta) &= \frac{41}{72}\theta^3 - \frac{65}{48}\theta^2 + \theta \\
b_2(\theta) &= -\frac{529}{576}\theta^3 + \frac{529}{384}\theta^2 \\
b_3(\theta) &= -\frac{125}{192}\theta^3 + \frac{125}{128}\theta^2 \\
b_4(\theta) &= \theta^3 - \theta^2
\end{aligned}$$

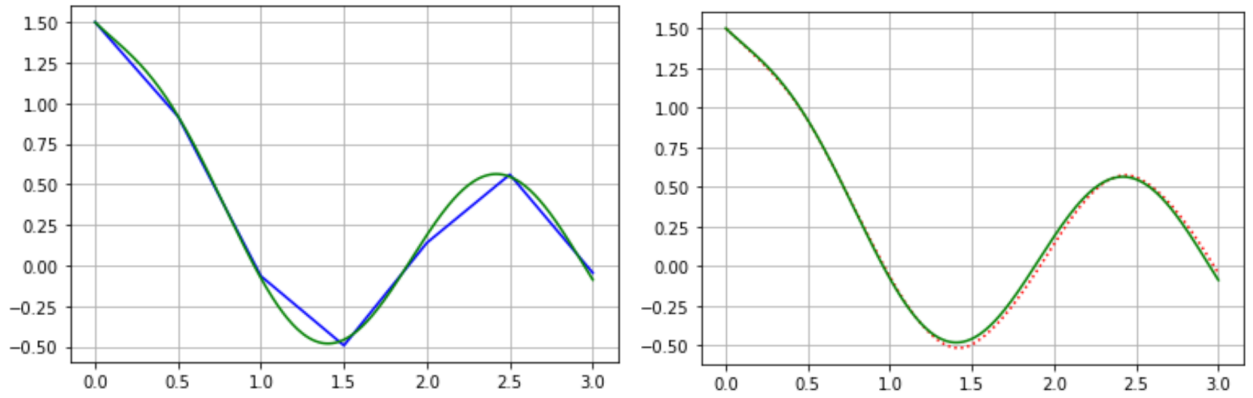


Рис. 1: Метод CREK третьего порядка (слева) и тот же метод с дополнительными точками (справа).

1.4 Применение непрерывных методов в задачах с запаздыванием

Дифференциальное уравнение с запаздывающим аргументом представляет собой уравнение, в котором производная функции зависит не только от её текущего значения, но также от значения в прошлом. Формально, дифференциальное уравнение с запаздывающим аргументом записывается в виде:

$$y'(x) = f(x, y(x), y(x - \tau)),$$

где $y(x)$ представляет собой искомую функцию, f — заданная функция, зависящая от текущего значения $y(x)$ и значения $y(x - \tau)$, то есть из прошлого, а τ — задержка времени.

Применение обыкновенных методов Рунге — Кутты для решения таких задач является неэффективным в силу того, что вычисление $y(x - \tau)$ становится рекурсивным. Ключевой особенностью применения метода Рунге — Кутты для решения задач с запаздывающим аргументом является модификация функционала решателя с плотной выдачей с целью аппроксимации значений $y(x)$ в прошлом, даже при некрatных шагах или переменном запаздывании.

Для этого при возникновении потребности стоит находить ближайший к нужному x_m принадлежащий узловой сетке, в котором приближение решения y_m и уже вычислено и вычислять добавочный шаг (6). Для адаптации решателя понадобится хранить не только историю вычисленных приближе-

ний y_n , но и историю посчитанных промежуточных приближений шагов K^n . Можно заметить, что теперь приближения(6) преобразуются в

$$K_i^n = f(x_n + c_i h \theta, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j, y_m + h \sum_{l=1}^s b_k(\theta) K_l^m)$$

В задачах с запаздыванием обычно вместо или дополнительно к начальному условию $y(0) = x_0$ задана предыстория для $x \leq x_0$.

1.5 Практическая оценка точности метода

Для практической оценки точности методов используют модуль разности приближенного решения на конце промежутка и точного решения, вычисленного в этой точке. Существует теорема, которая утверждает: если метод Рунге — Кутты имеет на отрезке локальный порядок точности p , порядок его глобальной погрешности стремится к p [3]. Используя эти знания, можно разработать алгоритм для получения оценки глобальной погрешности метода на различных узловых сетках и с различным начальным шагом.

Если в логарифмической шкале построить графики степени глобальной погрешности, относительно рассматриваемой длины шага. Полученная ломаная показывает скорость убывания глобальной погрешности с уменьшением длины шага.

Примеры графиков для оценки порядка сходимости метода:

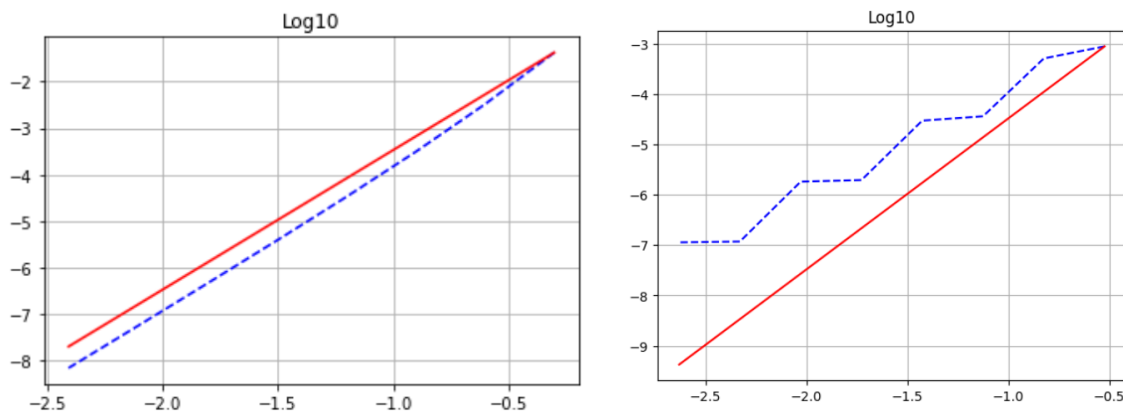


Рис. 2: Наличие (слева) и отсутствие (справа) ожидаемого порядка сходимости.

Глава 2. Неявные методы

2.1 Преимущества и недостатки использования неявных методов

Неявные методы Рунге — Кутты представляют собой эффективный инструмент численного решения дифференциальных уравнений. Одним из основных преимуществ неявных методов является их устойчивость при решении жестких задач [2], где явные методы могут потребовать чрезмерно малые шаги интегрирования. Благодаря этой устойчивости, неявные методы Рунге — Кутты позволяют эффективно решать широкий спектр задач, включая те, где происходит быстрое изменение функций или вариации коэффициентов.

Однако неявные методы Рунге — Кутты также имеют недостатки. Использование неявных методов требует решения системы уравнений на каждом шаге интегрирования, что может быть вычислительно затратным, особенно для систем большой размерности. Это может привести к увеличению времени вычислений по сравнению с явными методами. Кроме того, выбор правильного неявного метода и настройка его параметров может потребовать дополнительных усилий и экспертного опыта.

Таким образом, неявные методы Рунге — Кутты представляют собой мощный инструмент для численного решения дифференциальных уравнений, обладающий высокой устойчивостью при работе с жесткими задачами. Однако необходимо учитывать затраты на решение систем уравнений и правильный выбор параметров при использовании этих методов.

Первые неявные методы использовал Кутта для оценок локальной погрешности, однако вскоре были выведены первые расчетные схемы, позволяющие производить численное интегрирование задачи Коши с помощью неявных методов. Это были неявный метод Эйлера

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}),$$

и неявный метод средней точки

$$K_1 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right), \quad y_{n+1} = y_n + hK_1.$$

Общий вид неявного s -этапного метода Рунге — Кутты записывают так:

$$K_i = f\left(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j\right),$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i K_i.$$

А таблица бутчера для неявных методов имеет квадратный вид.

c_1	a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}
c_2	a_{21}	a_{22}	a_{23}	a_{24}
c_3	a_{31}	a_{32}	a_{33}	a_{34}
c_4	a_{41}	a_{42}	a_{43}	a_{44}
	b_1	b_2	b_3	b_4

Таблица 3: Таблица Бутчера неявного метода

c_1	a_{11}	a_{12}	0
c_2	a_{21}	a_{22}	0
\hat{c}_3	\hat{a}_{31}	\hat{a}_{32}	0
	\hat{b}_1	\hat{b}_2	\hat{b}_3

Таблица 4: Таблица Бутчера неявного метода

Выше уже было упомянуто, что при использовании неявные методов последовательное нахождение промежуточных приближений K_i уже не является возможным. В этом случае для получения этих приближений необходимо решить нелинейную систему уравнений относительно K_i . Нахождение эффективного способа решения этой системы — главная проблема реализации неявных методов Рунге — Кутты. В первых версиях решателя для решения этой системы мной был использован метод простой итерации, предлагаемый в источниках [2], как элементарный. Так как к этому моменту тестирование проводится только на нежёстких задачах, это упрощение не должно сказаться на практических результатах.

2.2 Коллокационные методы

В процессе работы с неявными методами выяснилось, что они могут быть рассмотрены в некотором смысле эквивалентными Коллокационным методам. Понятие коллокации как раз и обозначает совпадение частных производных у некоторого искомого многочлена порядка s в s узлах приближения.

Пусть задано s — число этапов и некоторые вещественные числа c_1, \dots, c_s . Тогда условия коллокации многочлена $u(x)$ задаются следующим образом:

$$\begin{aligned} u(x_0) &= y_0, \\ u'(x_n + hc_i) &= f(x_n + hc_i, u(x_n + hc_i)). \end{aligned}$$

Численно находить приближение решения задачи (2), (3) можно с помощью шагов вида:

$$y_{n+1} = u(x_n + h).$$

Утверждается [1], что неявный s -этапный метод Рунге — Кутты эквивалентен коллокационному, если его коэффициенты a_{ij} , b_i , c_i удовлетворяют уравнениям:

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \int_0^{c_i} l_j(t) dt, \quad b_j = \int_0^1 l_j(t) dt, \quad i, j = 1, \dots, s., \\ l_j(t) &= \prod_{k \neq j} (t - c_k) \setminus \prod_{k \neq j} (c_j - c_k). \end{aligned} \quad (8)$$

Неявные и, в особенности, коллокационные методы обладают важнейшим для рассматриваемых задач свойством. В отличие от явных методов Рунге — Кутты, которые не достигают порядка сходимости больше s , а для высоких порядков требуют большого количества этапов и, соответственно, вычислений, коллокационные методы могут быть построены с порядком сходимости вплоть до $2s$ [1]. В общем случае неявные методы достигают порядка s , однако Бутчер показал, что при особом выборе точек вычисления промежуточных приближений c_i можно достичь порядка сходимости метода $2s$. Такие методы называются неявными методами типа Гаусса.

На практике стоит сначала вычислить значения c_i . Узловые значения квадратурной формулы Гаусса на отрезке $[0, 1]$ являются корнями смещенного полинома Лежандра, то есть для их нахождения необходимо решение уравнения

$$\frac{d}{dt}[\tau^s(\tau^s - 1)] = 0.$$

После этого легко решить уравнения (8) и получить все параметры метода. Примеры существующих методов порядка $2s$:

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

Таблица 5: Двухэтапный метод типа Гаусса (метод Хаммера — Холлингсуорта)

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30}$	$\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{5}{18}$

Таблица 6: Трехэтапный метода типа Гаусса (метод Ила)

Сравнить эффективность работы методов можно даже визуально. Двухэтапный метод средней точки, даёт сильное отклонение от точного решения, в отличие от метода типа Гаусса с таким же количеством этапов.

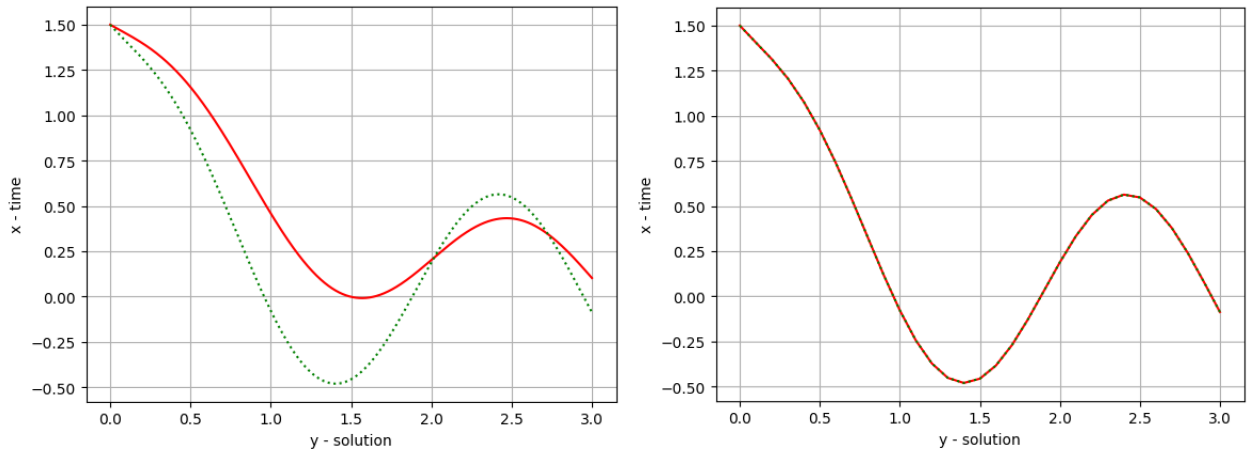


Рис. 3: Двухэтапные явный метод средней точки и неявный метод типа Гаусса, примененные с одинаковым шагом вычислений для решения задачи (14)

Глава 3. Построение непрерывного метода высокого порядка

3.1 Объединение подходов

Вернемся к уравнениям (7) — условиям порядка конструируемого метода. Для неявного трехэтапного метода они будут иметь вид

$$\begin{aligned}
 b_1(\theta) + b_2(\theta) + b_3(\theta) &= \theta, \\
 b_1(\theta)c_1 + b_2(\theta)c_2 + b_3(\theta)c_3 &= \frac{\theta^2}{2}, \\
 b_1(\theta)c_1^2 + b_2(\theta)c_2^2 + b_3(\theta)c_3^2 &= \frac{\theta^3}{3}, \\
 b_1(\theta)(a_{11}c_1 + a_{12}c_2 + a_{13}c_3) + b_2(\theta)(a_{21}c_1 + a_{22}c_2 + a_{23}c_3) + \\
 + b_3(\theta)(a_{31}c_1 + a_{32}c_2 + a_{33}c_3) &= \frac{\theta^3}{6}.
 \end{aligned}$$

В этом случае за счёт большего количества ненулевых коэффициентов метода имеется возможность построить непрерывное расширение метода, имеющее равномерный порядок 3.

При рассмотрении условий порядка, которые соответствуют случаю чистых квадратур — $\sum_{i=1}^s b_i(\theta)c_i^{k-1} = \theta^k/k$, $k \in \mathbb{N}$ — становится очевидным, что для выполнения q таких уравнений при всех θ необходимо рассматривать метод с по меньшей мере q этапами. В связи с этим гауссовы методы

наивысшего дискретного порядка $p = 2s$ удовлетворяют лишь условиям равномерного порядка s , а условия порядков с $s + 1$ по $2s$ удовлетворяются в дискретном варианте.

При этом, в любом случае, если мы строим коллокационный метод со степенью (и равномерным порядком точности) q , то часть дискретных условий более высоких порядков (см. напр. [1]) будет выполняться автоматически. Например, второй порядок коллокационного полинома даёт выполнение условий

$$\sum_{j=1}^s a_{ij}c_j = \frac{c_i^2}{2}, \quad i = 1, \dots, s.$$

В этом случае, к примеру, полная система условий четвёртого порядка с равномерным вторым для двухэтапного метода упростится до

$$\begin{aligned} b_1(\theta) + b_2(\theta) &= \theta, \\ b_1(\theta)c_1 + b_2(\theta)c_2 &= \frac{\theta^2}{2}, \\ b_1(1)c_1^2 + b_2(1)c_2^2 &= \frac{1}{3}, \\ b_1(1)c_1^3 + b_2(1)c_2^3 &= \frac{1}{4}, \\ b_1(1)(a_{11}c_1^2 + a_{12}c_2^2) + b_2(1)(a_{21}c_1^2 + a_{22}c_2^2) &= \frac{1}{12}. \end{aligned} \tag{9}$$

Далее вводится изначальное предположение об общем виде функций $b_i(\theta)$:

$$b_i(\theta) = \sum_{j=1}^m b_{ij}\theta^j \tag{10}$$

Задача состоит в нахождении коэффициентов b_{ij} , которые бы при подстановке (10) в уравнения (9) обращало бы их в равенства для всех θ .

Решив эту задачу, получим непрерывный неявный метод Рунге — Кутты, возможно с дискретным порядком большим, чем равномерный. Следует отметить, что для коллокационных методов коллокационный многочлен автоматически удовлетворяет условиям равномерного порядка s .

Интерполяционные полиномы $b_i(\theta)$ для неявного непрерывного двух-

этапного метода типа Гаусса:

$$\begin{aligned} b_1(\theta) &= \left(\frac{1 + \sqrt{3}}{2}\right)\theta - \frac{\sqrt{3}}{2}\theta^2, \\ b_2(\theta) &= \left(\frac{1 - \sqrt{3}}{2}\right)\theta + \frac{\sqrt{3}}{2}\theta^2. \end{aligned} \quad (11)$$

И для аналогичного метода с тремя этапами:

$$\begin{aligned} b_1(\theta) &= \frac{10}{9}\theta^3 - \frac{10 + \sqrt{15}}{6}\theta^2 + \frac{5 + \sqrt{15}}{6}\theta, \\ b_2(\theta) &= -\frac{20}{9}\theta^3 + \frac{10}{3}\theta^2 - \frac{2}{3}\theta, \\ b_3(\theta) &= \frac{10}{9}\theta^3 - \frac{10 - \sqrt{15}}{6}\theta^2 + \frac{5 - \sqrt{15}}{6}\theta. \end{aligned} \quad (12)$$

3.2 Повышение равномерного порядка метода

3.2.1 Пошаговое улучшение

Если после s_q этапов у нас в распоряжении имеется интерполянт порядка q , то мы можем добавить к методу $q + 1$ явный этап, взяв значения этого интерполянта в точках $c_{s_q+1}, c_{s_q+2}, \dots, c_{s_q+q+1}$, и получить аналогично формулам (5) новые значения правых частей ОДУ

$$K_{s_q+i} = f \left(x_n + c_{s_q+i}h, y_n + h \sum_{j=1}^{s_q} b_j(c_{s_q+i})K_j \right), \quad i = 1, \dots, q + 1. \quad (13)$$

Пользуясь вычисленными наклонами (3.2.2), мы можем построить новый интерполянт

$$y(x_n + \theta h) \approx \eta_{q+1}(x_n + \theta h) = y_n + h \sum_{i=s_q+1}^{s_q+q+1} b_i(\theta)K_i,$$

который в силу использования $q + 1$ точки сможет удовлетворить условиям $q + 1$ равномерного порядка.

Выполняя те же действия с новым q , мы можем повысить порядок до любого необходимого, затрачивая на каждый следующий порядок всё большее число этапов $q + 1$. Чтобы избежать этого можно использовать так называемые точки сверхсходимости [3].

3.2.2 Точки сверхсходимости

В некоторых точках интерполянты порядка q могут давать сходимость большего порядка. В частности, очевидно, что в точках $\theta = 0$ и $\theta = 1$ применяемые нами интерполянты совпадают с решением, полученным дискретным методом, и потому в этих точках приближение сходится с порядком p дискретного метода. Такие точки называются точками сверхсходимости. Их можно найти решая относительно θ условия более высокого равномерного порядка, чем q . Отметим, что чаще всего если такие точки существуют, то они удовлетворяют лишь порядку $q + 1$ (конечно, за исключением концов шага).

Рассмотрим вычисления и, не ограничивая общности, будем считать, что точка $\theta = c_{s_q+1}$ является точкой сверхсходимости порядка $q + 1$. Приближение интерполянтом порядка q в этой точке является этапным приближением

$$Y_{s_q+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s_q} b_i(c_{s_q+1}) K_i.$$

После построения интерполянты мы обнаружим, что он проходит через точку $(x_n + c_{s_q+1}h, Y_{s_q+1})$, то есть

$$Y_{s_q+1} = y_n + h \sum_{i=s_q+1}^{s_q+q+1} b_i(c_{s_q+1}) K_i.$$

Таким образом, выбирая $q + 2$ точки на интерполянте $\eta_{q+1}(x_n + \theta h)$ для построения интерполянты $\eta_{q+2}(x_n + \theta h)$, мы можем вновь использовать точку $(x_n + c_{s_q+1}h, Y_{s_q+1})$ и сэкономить на вычислении

$$K_{s_q+1} = f(x_n + c_{s_q+1}h, Y_{s_q+1}),$$

которое мы уже совершали ранее.

Заметим, что если для некоторого r точка $\theta = c_k$ не является точкой сходимости порядка $q + 1$, то повторное её использование не даст подобного эффекта, из-за того, что

$$Y_r = y_n + h \sum_{i=1}^{s_q} b_i(c_r) K_i \neq y_n + h \sum_{i=s_q+1}^{s_q+q+1} b_i(c_r) K_i,$$

и функцию f придётся вычислять в другой точке, пусть и с той же абсциссой.

3.2.3 Примеры точек сверхсходимости и построения интерполянта 5-го порядка для метода типа Гаусса с тремя этапами

Рассмотрим сначала непрерывный двухэтапный метод типа Гаусса. Для поиска его точек сверхсходимости необходимо решить уравнение:

$$b_1(\theta)c_1^2 + b_2(\theta)c_2^2 = \frac{\theta^3}{3}.$$

Это выражение обращается в равенство в трёх точках $0, 1, \frac{1}{2}$. Значит, для этого метода можно построить новые интерполянты b_i с порядком сходимости $s + 1$. Для этого стоит выбрать найденную точку сверхсходимости абсциссой дополнительного явного шага c_{s+1} и посчитать в ней коэффициенты $a_{(s+1)j} = b_j(c_{s+1})$, а затем снова решить систему условий порядка.

Подставляя c_{s+1} в (11), получаем коэффициенты a_{31} и a_{32} равные, соответственно, $\frac{2+\sqrt{3}}{8}$ и $\frac{2-\sqrt{3}}{8}$. Найденные вновь полиномы приближения $\hat{b}_i(\theta)$:

$$\begin{aligned}\hat{b}_1(\theta) &= 2\theta^3 - \frac{\sqrt{3}+6}{2}\theta^2 + \frac{3+\sqrt{3}}{2}\theta, \\ \hat{b}_2(\theta) &= 2\theta^3 + \frac{\sqrt{3}-6}{2}\theta^2 + \frac{3-\sqrt{3}}{2}\theta, \\ \hat{b}_3(\theta) &= -4\theta^3 + 6\theta^2 - 2\theta.\end{aligned}$$

Для непрерывного трехэтапного метода рассуждения аналогичные, за исключением необходимости поиска пары точек сверхсходимости. Решения-

ми уравнения

$$b_1(\theta)c_1^3 + b_2(\theta)c_2^3 + b_3(\theta)c_3^3 = \frac{\theta^4}{4}$$

являются θ равные $0, 1, \frac{5-\sqrt{5}}{10}, \frac{5+\sqrt{5}}{10}$.

Для этого случая уже не получится обойтись одним дополнительным этапом, стоит сначала воспользоваться подходом (3.2.1). Вводим 4 дополнительных явных этапа с абсциссам c_i равными найденным корням и двенадцатью новыми коэффициентами a_{ij} . Определяем последние, подставляя последовательно новые c_i в (12). Решая систему уравнений для четвёртого порядка получаем новые $b_i(\theta)$:

$$\begin{aligned} b_i(\theta) &= 0 \quad i = 1, \dots, 3, \\ b_4(\theta) &= -\frac{5}{4}\theta^4 + \frac{10}{4}\theta^3 - 3\theta^2 + \theta, \\ b_5(\theta) &= \frac{5}{4}\theta^2((\theta - 1)^2\sqrt{5} - \frac{2}{3}\theta + 1), \\ b_6(\theta) &= -\frac{5}{4}\theta^2((\theta - 1)^2\sqrt{5} + \frac{2}{3}\theta - 1), \\ b_7(\theta) &= \frac{5}{4}\theta^4 - \frac{10}{4}\theta^3 + 3\theta^2. \end{aligned}$$

Вновь повторяем первый шаг, но теперь с новыми $b(\theta)$ и для ограничения пятого порядка — $\sum_{i=1}^8 b_i(\theta)c_i^4 = \frac{\theta^5}{5}$. Это выражение имеет 5 корней — 0 кратности 2, 1 кратности 2 и $\frac{1}{2}$, который является искомой точкой. Добавляем её по известной схеме в метод и, в последний раз вычисляя из уравнений

порядка новые интерполянты b_i имеем:

$$\begin{aligned}b_i(\theta) &= 0 \quad i = 1, \dots, 3, \\b_4(\theta) &= 2\theta^5 - \frac{24}{5}\theta^4 + \frac{22}{3}\theta^3 - 4\theta^2 + \theta, \\b_5(\theta) &= -10\theta^2 \left(-(\theta - 1)^2 \frac{\sqrt{5}}{8} + \theta^3 - \frac{5}{2}\theta^2 + \frac{25}{12}\theta - \frac{5}{8} \right), \\b_6(\theta) &= -10\theta^2 \left((\theta - 1)^2 \frac{\sqrt{5}}{8} + \theta^3 - \frac{5}{2}\theta^2 + \frac{25}{12}\theta - \frac{5}{8} \right), \\b_7(\theta) &= 2\theta^5 - \frac{15}{4}\theta^4 + \frac{7}{3}\theta^3 - \frac{1}{4}\theta^2, \\b_8(\theta) &= 16\left(\theta - \frac{1}{2}\right)\theta^2(\theta - 1)^2.\end{aligned}$$

Глава 4. Практическая реализация

4.1 Программная среда

Для экспериментов в процессе изучения был разработан и улучшался со временем универсальный решатель уравнений на языке Python. Функции для решения систем уравнений или поиска приближений из сторонних библиотек не были использованы. В ходе работы удалось совместить все подходы, в следствие чего, для того чтобы воспользоваться решателем пользователю нужно задать только необходимые параметры метода и условия задачи. Кроме того, особенности программы позволяют не задумываться о способе приближения значения из прошлого или его хранении, достаточно просто задать функцию правой части в виде $f(x, y, z)$. Она сможет использовать аргумент z для обращения к прошлому интуитивным путём:

```
def f(x, y, z):  
    return y + z(x - PI) + 3 * cos(x) + 5 * sin(x)
```

В рамках решателя был реализован программный метод, позволяющий получить изображение значений полной погрешности относительно точного решения на логарифмической шкале. Это сильно упрощает практическую оценку порядка сходимости метода и предоставляет удобный способ визуального представления оценки результатов работы.

4.2 Тонкости реализации

Вернёмся к алгебраической системе, упомянутой в параграфе 1.1. Она имеет вид:

$$\begin{pmatrix} z_i \\ \vdots \\ z_s \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} hf(x_n + hc_1, y_n + z_1) \\ \vdots \\ hf(x_n + hc_s, y_n + z_s) \end{pmatrix}.$$

Здесь рассматриваются малые величины

$$z_i = h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(x_n + hc_j, y_n + z_j)$$

Чтобы решить эту систему методом Ньютона необходимо иметь доступ к производной $\frac{\partial f}{\partial y}$ или вычислять её численно.

Для программной реализации данного подхода использованы упрощенные итерации метода Ньютона[2], основная суть которых в замене всех матриц Якоби $\frac{\partial f}{\partial y}(x_n + hc_i, y_n + z_i)$ на общее приближение $J = \frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n)$.

Еще одной особенностью реализации решателя, является необходимость поиска значений, вычисленных на предыдущих шагах. Крайне неэффективным подходом было бы перебирать все точки истории, но есть простое решение. Так как все значения считаются последовательно, можно воспользоваться одним из базовых алгоритмов - бинарным поиском. Он использует тот факт, что значения хранятся отсортированными по возрастанию. Таким образом за одно сравнение область поиска сокращается в два раза. Алгоритмическая сложность бинарного поиска $O(\log_2(n))$. Так, например, для построения приближения на сетке с 50000 узлами в худшем случае на каждом шаге понадобится не более 16 сравнений.

4.3 Оценка полученного метода

Для проверки методов, упомянутых в главах 1, 2 и 3 были выбраны подходящие задачи различной природы [4]:

1. Простая задача без запаздывания для проверки базовых свойств методов:

$$y'(x) = \cos(x) - \sin(x),$$

$$x_0 = 0,$$

$$y(x_0) = 1,$$

$$y(x) = \sin(x) + \cos(x).$$

2. Сложная задача без запаздывания для проверки методов высоких порядков:

$$\begin{aligned}
 y'(x) &= -2(y(x) - \cos(3x)), \\
 x_0 &= 0, \\
 y(x_0) &= 1.5, \\
 y(x) &= \frac{4}{13} \cos(3x) + \frac{6}{13} \sin(3x) + \frac{31}{26} \exp(-2x). \tag{14}
 \end{aligned}$$

3. Задача с постоянным запаздыванием $\tau = 1$ для проверки непрерывных методов (Y -предыстория):

$$\begin{aligned}
 y'(x) &= -y(x-1), \\
 x_0 &= 0, \\
 y(x_0) &= 1, \\
 Y(x) &= 1 \quad (x \leq x_0), \\
 y(x) &= \begin{cases} 1 & x \leq 0, \\ 1-x & 0 \leq x \leq 1, \\ 1-x + \frac{(x-1)^2}{2} & 1 \leq x \leq 2, \\ 1-x + \frac{(x-1)^2}{2} - \frac{(x-2)^3}{6} & 2 \leq x \leq 3, \\ 1-x + \frac{(x-1)^2}{2} - \frac{(x-2)^3}{6} + \frac{(x-3)^4}{24} & 3 \leq x \leq 4, \\ 1-x + \frac{(x-1)^2}{2} - \frac{(x-2)^3}{6} + \frac{(x-3)^4}{24} - \frac{(x-4)^5}{120} & 4 \leq x \leq 5. \end{cases}
 \end{aligned}$$

4. Задача с переменным запаздыванием $\tau \equiv \tau(x, y)$:

$$\begin{aligned} y'(x) &= y(y(x) - \sqrt{2} + 1) \\ x_0 &= 1, \\ y(x_0) &= 1, \\ Y(x) &= 1 \quad (x \leq x_0), \\ y(x) &= \begin{cases} \sqrt{x} & 1 \leq x \leq 2, \\ \frac{x}{4} + \frac{1}{2} + (1 - \frac{1}{\sqrt{2}})\sqrt{x} & x \geq 2. \end{cases} \end{aligned}$$

В процессе выполнения работы были протестированы возможности методов CERK, типа Гаусса второго и третьего порядка, сконструированные неявные непрерывные методы на всех упомянутых задачах, но представлены будут только релевантные результаты:

1. Метод CREK действительно сходится с порядком 3 для различных задач:

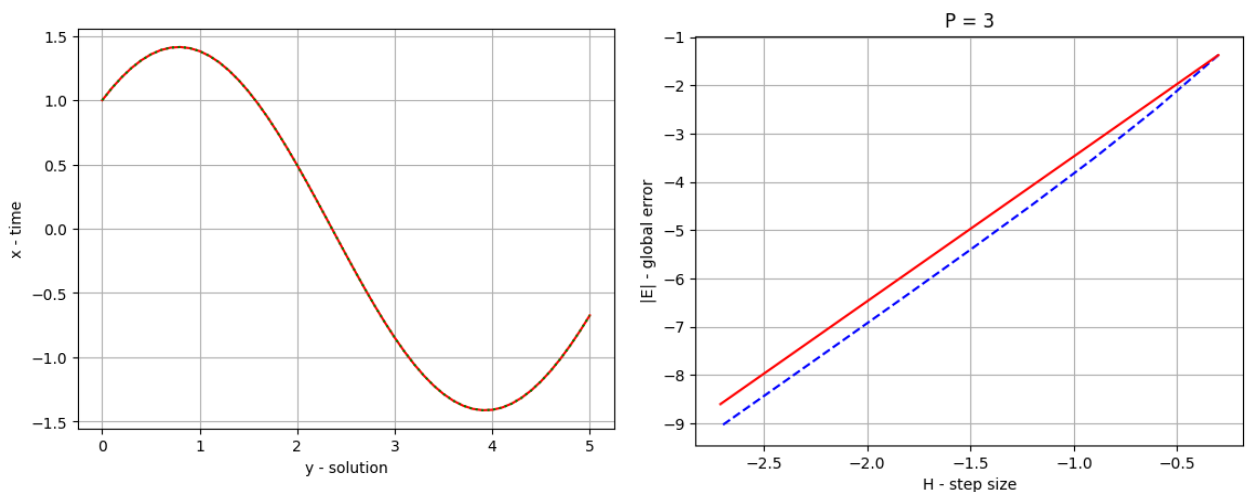


Рис. 4: График решения и ломаная сходимости метода CREK для задачи 2

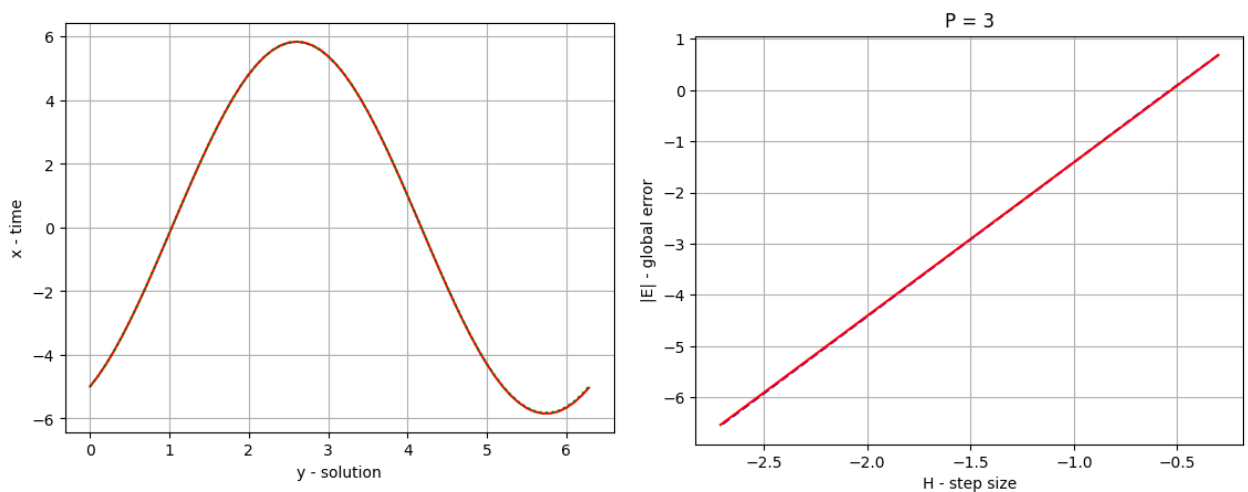


Рис. 5: График решения и ломаная сходимости метода CREK для задачи 4

2. Двухэтапный метод типа Гаусса сходится с порядком 4 для обыкновенных задач и с порядком 4 для задач с запаздыванием: Этот результат

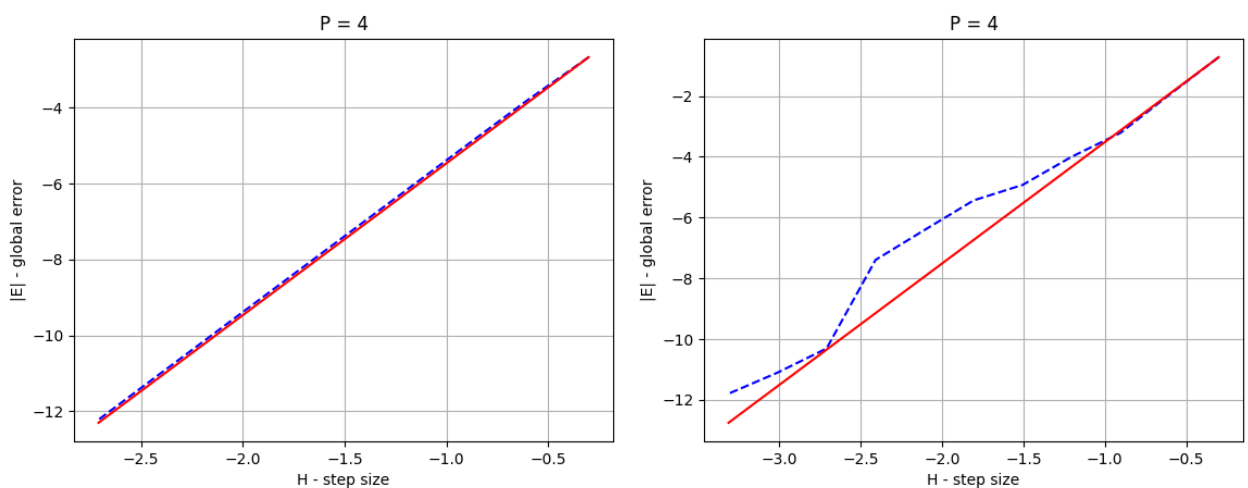


Рис. 6: Ломаные сходимости двухэтапного метода типа Гаусса для задачи 2 и 4

превосходит теоретические предположения. Так как согласно теореме из [3], неявный непрерывный метод должен иметь порядок сходимости $s + 1$, то есть для рассматриваемого метода 3.

3. Трехэтапный метод типа Гаусса сходится с порядком 6 для обыкновенных задач и с порядком 4 для задач с запаздыванием:

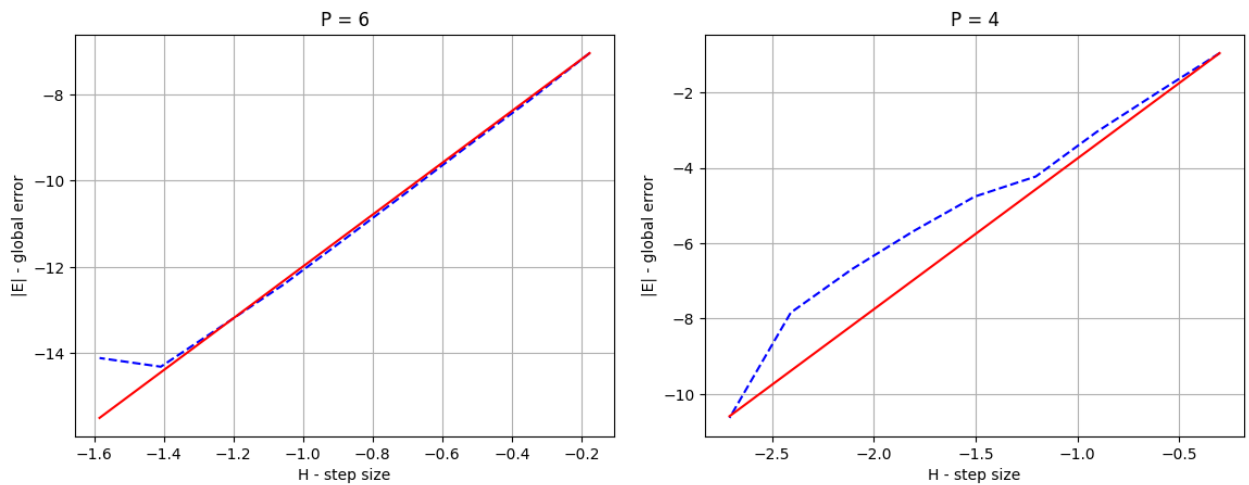


Рис. 7: Ломаные сходимости трехэтапного метода типа Гаусса для задачи 2 и 4

Этот результат подтверждает утверждение из предыдущего пункта.

4. Трехэтапный метод типа Гаусса с использованием точек сверхсходимости сходится с порядком 6 для обыкновенных задач и с порядком 5 для задач с запаздыванием:

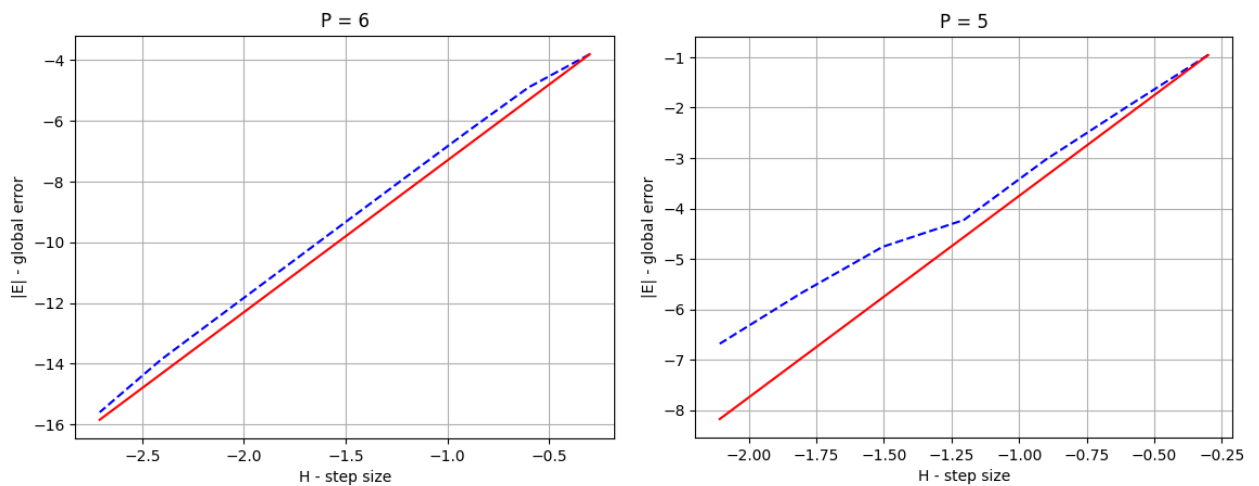


Рис. 8: Ломаные сходимости двухэтапного метода типа Гаусса для задач 2 и 4

Заключение

В ходе исследования были изучены разнообразные одношаговые методы Рунге — Кутты для численного решения дифференциальных уравнений, включая их обобщения. Основное внимание было уделено применению неявных методов для решения задач с запаздывающим аргументом различной природы. Также были изучены особенности практической реализации решателя, использующего указанные подходы.

Проведено тестирование как существующих, так и собственных методов на различных задачах, включая обыкновенные дифференциальные уравнения и уравнения с запаздыванием. Полученные результаты позволили оценить эффективность методов и их пригодность для дальнейшего улучшения. В процессе тестирования выявлены как положительные результаты, соответствующие теоретическим предположениям, так и аспекты, требующие дополнительного объяснения.

Была проведена аналитическая оценка сложности реализации и применения неявных методов. Для тестирования была разработана программа-решатель, позволяющая получать графики решений и оценивать порядок сходимости метода с возможностью настройки шага интегрирования.

Список литературы

- [1] *Хайпер Э., Нёрсетт С. П., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / пер. с англ. И. А. Кульчицкого, С. С. Филиппова, под ред. С. С. Филиппова. М.: Мир, 1990, 512 с.
- [2] *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи / пер. с англ. под ред. С. С. Филиппова. М.: Мир, 1999, 685 с.
- [3] *Bellen A., Zennaro M.* Numerical methods for delay differential equations. Oxford: Oxford University Press, 2013, 396 p.
- [4] *Paul C. A. H.* A test set of functional differential equations, Tech. Rep. 243, Manchester Centre for Computational Mathematics. University of Manchester, Feb 1994, 43 p.