

Министерство образования Российской Федерации
Воронежский государственный университет

Факультет прикладной математики и механики

Кафедра вычислительной математики

Численное решение задачи Коши для обыкновенных
дифференциальных уравнений методами типа Рунге-Кутты.

Часть 1 .

Методические указания по курсу «Численные методы»
для студентов 3 и 4 курсов д/о и в/о факультета ПММ

Составители: Корзунина В.В.

Шабунина З.А.

Воронеж - 2001

СОДЕРЖАНИЕ

1. Явные методы типа Рунге-Кутта решения обыкновенных дифференциальных уравнений.....	
1.1. Общая формулировка методов типа Рунге-Кутта.....	3
1.2. Метод первого порядка точности (одночленная формула, $q=1$)	5
1.3. Методы второго порядка точности (двучленные формулы, $q=2$)	6
1.4. Методы третьего порядка точности (трехчленные формулы, $q=3$)	9
1.5. Методы четвертого порядка точности (четырёхчленные формулы, $q=4$)	10
1.6. Методы порядка выше четвертого	11
1.7. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений методами типа Рунге-Кутта	11
2. Двухсторонние явные методы Рунге-Кутта.....	
2.1. Двучленные двухсторонние методы Рунге-Кутта	14
2.2. Трехчленные двухсторонние методы Рунге-Кутта	16
2.3. Организация счета в двухсторонних методах типа Рунге-Кутта	18
3. Повышение точности экстраполяционным методом Ричардсона.....	19
3.1. Повышение точности в методе Эйлера.....	20
3.2. Построение непрерывного приближенного решения	22
4. Практические способы оценки погрешности явных одношаговых методов решения задачи Коши	
4.1. Оценка глобальной погрешности по правилу Рунге.....	27
4.2. Оценка локальной погрешности по правилу Рунге	31
4.3. Оценка локальной погрешности на основе комбинации методов разного порядка точности	32
4.4. Вложенные методы оценки локальной погрешности	35
4.5. Мера погрешности приближенного решения.....	38
5. Автоматический выбор шага интегрирования задачи Коши.....	41
5.1. Метод удвоения и деления шага пополам	42
5.2. Метод выбора максимальной для заданной точности длины шага ...	45
6. Индивидуальные задания по численным методам решения задачи Коши.....	46
6.1. О демонстрации работы программ	46
6.2. Об ошибках, допущенных при задании входных параметров	50

В связи с систематическим сокращением числа лекционных часов по курсу “Численные методы”, полным исчезновением из учебных планов практических занятий по этому предмету и устойчивым существованием практики на ЭВМ, поддерживающей лекционный курс “Численные методы”, возникла острая необходимость в новой учебно-методической литературе, которая:

1. содержит краткое конспективное изложение лекционного материала;
2. включает теоретические материалы, передаваемые студентам самостоятельного изучения;
3. дает описание основных вычислительных алгоритмов и рекомендации к их практическому использованию;
4. включает в себя подробное индивидуальное задание на ЭВМ;
5. учит грамотно составить тестовые и демонстрационные примеры.

Настоящее пособие “Численное решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений методами типа Рунге - Кутта” является первым из серии методических разработок указанного типа. Оно написано на основе большого опыта ведения лекционных, практических и лабораторных занятий, накопленного на кафедре Вычислительной математики. Пособие состоит из двух частей. В первой части находятся материалы, перечисленные в п. п. 1 - 5, во второй - индивидуальные задания на ЭВМ. Индивидуальные задания составлены авторами так, чтобы они соответствовали девизу Р.В. Хемминга “Цель расчетов – не числа, а понимание”.

1. Явные методы типа Рунге-Кутта решения обыкновенных дифференциальных уравнений

1.1. Общая формулировка методов типа Рунге-Кутта

Пусть на отрезке $[x_0, x_0 + X]$ требуется найти численное решение задачи Коши

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad \begin{matrix} (1) \\ (2) \end{matrix}$$

на сетке узлов

$$x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N < x_0 + X. \quad (3)$$

Методы типа Рунге-Кутты являются явными одношаговыми методами, т.е. такими, которые последовательно в каждом узле x_i сетки (3) определяют приближенное решение y_i на основе известного значения приближенного решения y_{i-1} в предыдущем узле x_{i-1} . Основная идея метода была предложена К. Рунге в 1895г., а затем развита В. Кутта в 1901г. Согласно предложению Рунге, приближенное решение y_1 в узле $x_1 = x_0 + h$ ищется в виде линейной комбинации с постоянными коэффициентами

$$y_1 = y_0 + p_{q1}k_1(h) + p_{q2}k_2(h) + \dots + p_{qd}k_q(h), \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x_0, y_0), \\ k_2(h) &= hf(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}k_1(h)), \\ &\dots \\ k_q(h) &= hf(x_0 + a_qh, y_0 + b_{q1}k_1(h) + \dots + b_{q,q-1}k_{q-1}(h)). \end{aligned} \quad (5)$$

Коэффициенты a_i, b_{ij}, p_{qi} определяются из требования, чтобы погрешность равенства (4) на точном решении задачи (1),(2) имела возможно высокий порядок малости при произвольном шаге h для любых уравнений вида (1).

Запишем точное решение $y(x_1)$ в узле $x_0 + h$ по формуле Тейлора

$$y(x_1) = y_0 + hy'_0 + \frac{h^2}{2} y''_0 + \dots + \frac{h^s}{s!} y^{(s)}_0 + \frac{h^{s+1}}{(s+1)!} y^{(s+1)}(x), \quad (6)$$

где

$$y_0^{(k)} = y^{(k)}(x_0), \quad x_0 < x < x_1.$$

Погрешность метода на шаге, или локальная погрешность метода, есть величина

$$j_q(h) = y(x_0 + h) - y_0 - \sum_{i=1}^q p_{qi} k_i(h). \quad (7)$$

Ее разложение по степеням h должно начинаться с максимально возможной степени:

$$j_q(h) = \frac{h^{s+1}}{(s+1)!} j_q^{(s+1)}(0) + o(h^{s+1}). \quad (8)$$

Если коэффициенты a_i, b_{ij}, p_{qi} определены так, что погрешность имеет вид (8), то говорят, что формула (4) метода Рунге-Кутты имеет порядок точности S , при этом первое слагаемое в (8) называют главным членом локальной погрешности метода на шаге.

Известно, что если $q=1,2,3,4$, то можно подобрать такие коэффициенты a_i, b_{ij}, p_{qi} , что получится метод Рунге-Кутты порядка точности q . Для $q=5$ невозможно построить метод типа Рунге-Кутты пятого порядка точности. Подробное описание коэффициентов для $q=1,2,3,4$ можно найти в книге [1]. Ниже мы подробно описываем получение двучленных методов Рунге-Кутты ($q=2$), а для методов с большим количеством членов ограничиваемся приведением некоторых расчетных формул.

1.2. Метод первого порядка точности (одночленная формула, $q=1$)

Единственно возможный одночленный метод Рунге-Кутты первого порядка точности известен как метод Эйлера

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0), \quad (9)$$

для которого разложение (8) имеет вид

$$j_1(h) = \frac{h^2}{2} \left\{ f'_x + f f'_y \right\}_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}} + o(h^2). \quad (10)$$

1.3. Методы второго порядка точности (двухчленные формулы, q=2)

Двухчленные формулы метода Рунге-Кутты имеют вид

$$y_1 = y_0 + p_{21}k_1(h) + p_{22}k_2(h), \quad (11)$$

где

$$k_1(h) = hf(x_0, y_0),$$

$$k_2(h) = hf(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}k_1(h)).$$

В формулах (11) присутствуют четыре неизвестных параметра $a_2, b_{21}, p_{21}, p_{22}$. Для их определения построим вспомогательную функцию, являющуюся погрешностью на шаге конструируемого метода Рунге-Кутты.

$$j_2(h) = y(x_0 + h) - y_0 - p_{21}hf(x_0, y_0) - p_{22}hf(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}hf(x_0, y_0)). \quad (12)$$

Потребуем, чтобы в разложении по степеням h функции $j_2(h)$ максимальное число членов обратилось в нуль. Первые две производные по переменной h

$$j'_2(h) = y'(x_0 + h) - p_{21}f(x_0, y_0) - p_{22}f(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}hf(x_0, y_0)) -$$

$$- p_{22}h(a_2f'_x(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}hf(x_0, y_0)) + b_{21}f(x_0, y_0)f'_y(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}hf(x_0, y_0))),$$

$$j''_2(h) = y''(x_0 + h) - 2p_{22}(a_2f'_x(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}hf(x_0, y_0)) +$$

$$+ b_{21}f(x_0, y_0)f'_y(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}hf(x_0, y_0)))$$

$$- p_{22}h \frac{d}{dx}(a_2f'_x(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}hf(x_0, y_0)) +$$

$$+ b_{21}f(x_0, y_0)f'_y(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}hf(x_0, y_0)))$$

при $h = 0$ принимают значения

$$j'_2(0) = (1 - p_{21} - p_{22})f(x_0, y_0), \quad (13)$$

$$j_2''(0) = \left\{ (1 - 2a_2 p_{22}) f'_x + (1 - 2b_{21} p_{22}) f f'_y \right\}_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}}. \quad (14)$$

Для того, чтобы эти две первые производные обратились в нуль, необходимо, чтобы неизвестные параметры удовлетворяли системе уравнений

$$\begin{cases} 1 - p_{21} - p_{22} = 0 \\ 1 - 2a_2 p_{22} = 0 \\ 1 - 2b_{21} p_{22} = 0. \end{cases} \quad (15)$$

Третью производную

$$j_2'''(0) = \left\{ (1 - 3a_2^2 p_{22}) f''_{xx} + 2(1 - 3a_2 b_{21} p_{22}) f f''_{xy} + (1 - 3b_{21}^2 p_{22}) f^2 f''_{yy} + (f'_x + f f'_y) f'_y \right\}_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}} \quad (16)$$

за счет выбора параметров $a_2, b_{21}, p_{21}, p_{22}$ обратить в нуль для произвольной функции $f(x, y)$ нельзя. Следовательно, максимальное количество членов в разложении погрешности $j_2(h)$ по степеням h , обращающихся в нуль, равно двум:

$$j_q(h) = \frac{h^3}{6} j_2'''(0) + o(h^3). \quad (17)$$

Система уравнений (15) имеет однопараметрическое семейство решений. Если в качестве параметра выбрать a_2 , то

$$b_{21} = a_2, \quad p_{22} = \frac{1}{2a_2}, \quad p_{21} = 1 - \frac{1}{2a_2}, \quad (18)$$

причем $a_2 \neq 0$. Заметим, что параметр a_2 не может быть равным нулю, поскольку в этом случае теряет смысл второе уравнение системы (15).

Таким образом, мы показали, что формулы (11) образуют однопараметрическое семейство формул типа Рунге-Кутты второго порядка точности

$$y_1 = y_0 + \left(1 - \frac{1}{2a_2} \right) k_1(h) + \left(\frac{1}{2a_2} \right) k_2(h), \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x_0, y_0), \\ k_2(h) &= hf(x_0 + a_2 h, y_0 + a_2 k_1(h)), \end{aligned}$$

a_2 – числовой параметр, отличный от нуля.

Замечание 1. Для начальных задач Коши естественным является предположение, что решение в точке $(x_0 + h)$ зависит от поведения правой части уравнения (1) на отрезке $[x_0, x_0 + h]$. Поэтому в формулах (19) обычно полагают, что $a_2 \in (0, 1]$.

Замечание 2. Нельзя выбрать наилучшее значение параметра a_2 с точки зрения малости абсолютной величины главного члена погрешности (17). Для одних уравнений это будет одно значение, для других – другое [2].

Рассмотрим несколько наиболее часто используемых примеров двучленные формул метода Рунге-Кутты второго порядка.

1. Пусть $a_2 = 1$. Тогда

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{2}(K_1 + K_2), \quad (20)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf(x_0 + h, y_0 + K_1).$$

Погрешность на шаге метода (20), как следует из (16),(17),(18), имеет вид

$$j_2 = \frac{h^3}{6} \left\{ -\frac{1}{2}(f''_{xx} + 2ff''_{xy} + f^2 f''_{yy}) + (f'_x + ff'_y)f'_y \right\}_{x=x_0, y=y_0} + o(h^3). \quad (21)$$

2. Пусть $a_2 = \frac{1}{2}$. Тогда

$$y_1 = y_0 + K_2, \quad (22)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}K_1\right).$$

Погрешность на шаге метода (22), как следует из (16),(17),(18), имеет вид

$$j_2 = \frac{h^3}{6} \left\{ \frac{1}{4}(f''_{xx} + 2ff''_{xy} + f^2 f''_{yy}) + (f'_x + ff'_y)f'_y \right\}_{x=x_0, y=y_0} + o(h^3).$$

(23)

3. Пусть $a_2 = \frac{2}{3}$. Тогда

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{4}(K_1 + 3K_2), \quad (24)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + \frac{2}{3}K_1\right).$$

Погрешность на шаге метода (24), как следует из (16-18), имеет вид

$$j_2 = \frac{h^3}{6} \left\{ (f'_x + ff'_y) f'_y \right\}_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}} + o(h^3). \quad (25)$$

1.4. Методы третьего порядка точности (трехчленные формулы, q=3)

Формулы вида

$$y_1 = y_0 + p_{31}k_1(h) + p_{32}k_2(h) + p_{33}k_2(h), \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned} K_1(h) &= hf(x_0, y_0), \\ K_2(h) &= hf(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21}K_1(h)), \\ K_3(h) &= hf(x_0 + a_3h, y_0 + b_{31}K_1(h) + b_{32}K_2(h)), \end{aligned}$$

образуют три семейства формул типа Рунге-Кутты третьего порядка. Одно семейство – двухпараметрическое со свободными параметрами a_2, a_3 :

$$y_1 = y_0 + (1 - p_{32} - p_{33})K_1(h) + p_{32}K_2(h) + p_{33}K_2(h), \quad (27)$$

где p_{32}, p_{33} определяются из системы двух линейных уравнений

$$\begin{cases} p_{32}a_2 + p_{33}a_3 = \frac{1}{2} \\ p_{32}a_2^2 + p_{33}a_3^2 = \frac{1}{3}, \end{cases} \quad (28)$$

причем $a_2 \neq a_3, a_2 \neq \frac{2}{3}, a_2 \neq 0, p_{33} \neq 0$. Коэффициенты b_{ij} вычисляются простым пересчетом:

$$b_{21} = a_2, \quad b_{32} = (6a_2p_{33})^{-1}, \quad b_{31} = a_3 - b_{32}. \quad (29)$$

Два других семейства – однопараметрические со свободным параметром

$p_{33} \neq 0$. Для первого из этих семейств $a_2 = a_3 = \frac{2}{3}, p_{32} = \frac{3}{4} - p_{33}$, для второго –

$a_2 = \frac{2}{3}, a_3 = 0, p_{32} = \frac{3}{4}$. Для обоих семейств имеют место соотношения (29).

Наиболее употребительным методом третьего порядка является метод, получаемый из (27-29) при $a_2 = \frac{1}{2}, a_3 = 1$:

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3), \quad (30)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}K_1\right), K_3 = hf(x_0 + h, y_0 - K_1 + 2K_2).$$

Еще один пример метода ($a_2 = 1/3, a_3 = 2/3$):

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{4}(K_1 + 3K_3), \quad (31)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{1}{3}h, y_0 + \frac{1}{3}K_1\right), K_3 = hf\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + \frac{2}{3}K_2\right).$$

1.5. Методы четвертого порядка точности (четырёхчленные формулы, q=4)

В этом случае формулы типа Рунге-Кутты содержат 13 неизвестных параметров; условия, обеспечивающие четвертый порядок точности метода на шаге, дают 11 нелинейных уравнений. Подробные сведения о четырехчленных семействах формул можно найти в книге [1]. Ниже мы приводим три наиболее часто употребляемые формулы.

1. Стандартная формула Рунге-Кутты четвертого порядка

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad (32)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_1}{2}\right), K_3 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_2}{2}\right),$$

$$K_4 = hf(x_0 + h, y_0 + K_3),$$

2. Формула трех восьмых

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{8}(K_1 + 3K_2 + 3K_3 + K_4), \quad (33)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{1}{3}h, y_0 + \frac{1}{3}K_1\right),$$

$$K_3 = hf\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 - \frac{1}{3}K_1 + K_2\right), K_4 = hf(x_0 + h, y_0 + K_1 - K_2 + K_3).$$

3.

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 4K_3 + K_4), \quad (34)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{h}{4}, y_0 + \frac{K_1}{4}\right),$$

$$K_3 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_2}{2}\right), K_4 = hf(x_0 + h, y_0 + K_1 - 2K_2 + K_3).$$

1.6. Методы порядка выше четвертого

Для формул типа Рунге-Кутты степени больше четырех показано, что они требуют N -кратного вычисления правой части, где N больше степени. Эти формулы имеют громоздкие коэффициенты, и мы отправляем читателя к книгам [2,3].

1.7. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений методами типа Рунге-Кутта

Методы Рунге-Кутта без труда переносятся на решение задач Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений размерности M

$$\begin{cases} \bar{y}' = \bar{f}(x, \bar{y}), & x \in [A, B] \\ \bar{y}(x_0) = \bar{y}_0, \end{cases} \quad (35)$$

где $\bar{y} = (y^1, y^2, \dots, y^M)^T$, $\bar{f} = (f^1(x, y^1, \dots, y^M), \dots, f^M(x, y^1, \dots, y^M))^T$, $\bar{y}_0 = (y_0^1, y_0^2, \dots, y_0^M)^T$.

Формулы Рунге-Кутта записываются в векторном виде

$$\bar{y}_1 = \bar{y}_0 + p_{q1} \bar{K}_1(h) + p_{q2} \bar{K}_2(h) + \dots + p_{qq} \bar{K}_q(h), \quad (36)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{K}_1(h) &= h\bar{f}(x_0, \bar{y}_0), \\ \bar{K}_2(h) &= h\bar{f}\left(x_0 + a_2h, y_0 + b_{21} \bar{K}_1(h)\right), \\ &\dots \\ \bar{K}_q(h) &= h\bar{f}\left(x_0 + a_qh, y_0 + b_{q1} \bar{K}_1(h) + \dots + b_{q,q-1} \bar{K}_{q-1}(h)\right) \end{aligned}$$

В качестве примера рассмотрим систему двух дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{dy^1}{dx} = f^1(x, y^1, y^2), \\ \frac{dy^2}{dx} = f^2(x, y^1, y^2), \\ y^1(x_0) = y_0^1, \quad y^2(x_0) = y_0^2. \end{cases}$$

и двучленную формулу метода Рунге-Кутты (20)

$$\begin{cases} \bar{y}_1 = \bar{y}_0 + \frac{1}{2}(\bar{K}_1 + \bar{K}_2) \\ \bar{K}_1 = hf^1(x_0, \bar{y}_0), \bar{K}_2 = hf^1(x_0 + h, \bar{y}_0 + \bar{K}_1) \end{cases} \quad (37)$$

Обращаем внимание читателя на то, что в записях $\bar{y}_i, \bar{k}_i, y_i^l, k_i^l$ верхний индекс обозначает номер компоненты векторного решения, а нижний индекс – номер точки, в которой записывается рассматриваемое решение. Распишем покомпонентно векторную формулу (37):

$$\begin{aligned} y_1^1 &= y_0^1 + \frac{1}{2}(K_1^1 + K_2^1), \quad y_1^2 = y_0^2 + \frac{1}{2}(K_1^2 + K_2^2), \\ K_1^1 &= hf^1(x_0, y_0^1, y_0^2), \quad K_1^2 = hf^2(x_0, y_0^1, y_0^2), \\ K_2^1 &= hf^1(x_0 + h, y_0^1 + K_1^1, y_0^2 + K_1^2), \\ K_2^2 &= hf^2(x_0 + h, y_0^1 + K_1^1, y_0^2 + K_1^2). \end{aligned}$$

Выражения для главных членов погрешностей в случае решения систем уравнений (35) становятся громоздкими, мы их не приводим. Однако подчеркнем, что выводы относительно главных членов погрешности, сделанные для одного дифференциального уравнения, остаются в силе и для системы дифференциальных уравнений. Если для системы дифференциальных уравнений записывается аналог метода типа Рунге-Кутты порядка s , то главная часть погрешности для каждой компоненты решения y^1, y^2, \dots, y^M имеет также порядок $s + 1$:

$$j_q^l(h) = y^l(x_0 + h) - y_0^l - \sum_{i=1}^q p_{qi} k_i^l(h) = O(h^{s+1}) \quad (38)$$

Когда говорят, что решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений получено с абсолютной погрешностью ϵ , то подразумевают, что все компоненты решения имеют абсолютную погрешность, не превышающую ϵ .

2. Двухсторонние явные методы Рунге-Кутты

Как и в обычных, односторонних методах Рунге-Кутты, в двухсторонних методах приближенное решение в узле $x_0 + h$ будем искать в виде (4),(5). Относительно главной части погрешности на шаге $j_q(h)$ сделаем дополнительное предположение. А именно, будем считать, что главная часть погрешности может быть представлена в виде $gh^{s+1}\Psi[f]_0$, где g – некоторый параметр, $\Psi[f]_0$ – вполне определенный оператор, зависящий от функции f и вычисленный в точке (x_0, y_0) . Нас будет интересовать ситуация, когда допустимая область значений параметра g содержит пары значений, отличающихся только знаком. Тогда формулы Рунге-Кутты (4),(5) для двух равных по величине и противоположных по знаку значений параметра g ($g \neq 0$) будут давать верхнее и нижнее приближения к искомому решению. Такие формулы будем называть формулами двухстороннего метода Рунге-Кутты. Полученные приближенные решения будем обозначать y_1^+, y_1^- . Соответствующие этим приближенным решениям локальные погрешности на шаге равны

$$\begin{aligned} j_q^+(h) &= +gh^{s+1}\Psi[f]_0 + o(h^{s+1}) \\ j_q^-(h) &= -gh^{s+1}\Psi[f]_0 + o(h^{s+1}). \end{aligned} \quad (39)$$

Итак, коэффициенты a_i, b_{ij}, p_{qi} в двухсторонних методах Рунге-Кутты выбираются так, чтобы погрешность метода имела максимально возможный порядок по h при условии, что главная часть погрешности имеет множителем числовой параметр, могущий принимать значения, равные по величине и противоположные по знаку. Очевидно, что вычислив значения y_1^+, y_1^- , можно в качестве приближенного решения взять их среднее арифметическое

$$y_1^0 = \frac{1}{2}(y_1^+ + y_1^-), \quad (40)$$

погрешность которого на порядок выше погрешностей y_1^+, y_1^- :

$$y_q^0(h) = \frac{1}{2}(y_q^+(h) + y_q^-(h)) = o(h^{s+1}). \quad (41)$$

2.1. Двучленные двухсторонние методы Рунге-Кутты

Рассмотрим двучленную формулу (11). Если существует двухсторонний метод Рунге-Кутты второго порядка с двучленной формулой, то третья производная погрешности $j_2'''(h)$ в точке $h = 0$ должна иметь в качестве множителя числовой параметр для любой функции $f(x, y)$. Это невозможно, поскольку в выражении (16) для $j_2'''(0)$ последнее слагаемое не имеет числового множителя. Следовательно, двучленного двухстороннего метода Рунге-Кутты второго порядка не существует. Покажем, что можно построить двучленные двухсторонние методы первого порядка. В этом случае мы полагаем, что $j_2'(0) = 0, j_2''(0) \neq 0$. Из выражения (13) следует, что равенство нулю первой производной погрешности в точке $h = 0$ сводится к условию

$$1 - p_{21} - p_{22} = 0, \quad (42)$$

а пропорциональность $j_2''(0)$ числовому параметру g с учетом представления (14) – к равенствам

$$\begin{aligned} 1 - 2a_2 p_{22} &= 2g \\ 1 - 2b_{21} p_{22} &= 2g. \end{aligned} \quad (43)$$

Очевидно, что система уравнений (38),(39) относительно неизвестных $a_2, b_{21}, p_{21}, p_{22}, g$ имеет двухпараметрическое семейство решений. В самом деле, выразим p_{22}, a_2, b_{21} через значения параметров p_{21}, g :

$$p_{22} = 1 - p_{21}, \quad a_2 = \frac{1 - 2g}{2(1 - p_{21})} \text{ (при } p_{21} \neq 1), \quad b_{21} = \frac{1 - 2g}{2(1 - p_{21})}. \quad (44)$$

Таким образом, соотношения (44) при $p_{21} \neq 1$ определяют двухпараметрическое семейство двухсторонних формул Рунге-Кутты первого порядка.

Замечание 1. Случай $p_{21} = 1$ не представляет интереса. В самом деле, из уравнения (42) тогда следует, что $p_{22} = 0$, а уравнения (43) дают единственное решение для числового множителя g ($g = 1/2$).

Замечание 2. Если потребовать выполнения естественного условия $0 \leq a_2 \leq 1$, то решение (44) накладывает ограничения на выбор параметра g :

$$p_{21} - \frac{1}{2} \leq g \leq \frac{1}{2} \quad \text{при} \quad 1 - p_{21} > 0, \quad (45)$$

$$\frac{1}{2} \leq g \leq p_{21} - \frac{1}{2} \quad \text{при} \quad 1 - p_{21} < 0. \quad (46)$$

В двухстороннем методе Рунге-Кутты нас интересуют пары расчетных формул, соответствующие значениям $\pm g$. Поэтому условие (46) является недопустимым, а условие (45) для выбора параметров p_{21}, g лучше записать в виде

$$p_{21} < \frac{1}{2}, \quad |g| \leq \min\left(\frac{1}{2}, \left|p_{21} - \frac{1}{2}\right|\right). \quad (47)$$

Замечание 3. Если параметр $p_{21} = 0$, то $p_{22} = 1, a_2 = \frac{1}{2} - g, b_{21} = \frac{1}{2} - g$.

Соответствующие этим значениям пары расчетных формул двухстороннего метода Рунге-Кутты запишутся в виде

$$\begin{aligned} y_1^+ &= y_0 + hf\left(x_{1/2} + gh, y_{1/2} + ghf(x_0, y_0)\right) \\ y_1^- &= y_0 + hf\left(x_{1/2} - gh, y_{1/2} - ghf(x_0, y_0)\right) \end{aligned} \quad (48)$$

$$\text{где } x_{1/2} = x_0 + \frac{h}{2}, \quad y_{1/2} = y_0 + \frac{h}{2} f(x_0, y_0).$$

Вычисленное по формуле (40) приближенное значение приводит к следующей двучленной формуле

$$y_1^0 = y_0 + \frac{h}{2} \left(f\left(x_{1/2} + gh, y_{1/2} + ghf(x_0, y_0)\right) + f\left(x_{1/2} - gh, y_{1/2} - ghf(x_0, y_0)\right) \right). \quad (49)$$

Формулы типа (49) требуют 3-кратного вычисления правой части исходного уравнения, имеют погрешность порядка $O(h^3)$, но при этом одновременно определяются верхнее и нижнее приближения к искомому решению.

Примеры двучленных двухсторонних формул метода Рунге-Кутты:

$$1. \quad g = \frac{1}{2}, \quad p_{21} = 0.$$

$$\begin{aligned} y_1^+ &= y_0 + hf(x_0, y_0) \\ y_1^- &= y_0 + hf(x_0 + h, y_0 + hf(x_0, y_0)) \end{aligned} \quad (50)$$

$$2. \ g = \frac{1}{4}, \ p_{21} = 0.$$

$$\begin{aligned} y_1^+ &= y_0 + hf \left(x_0 + \frac{h}{4}, y_0 + \frac{h}{4} f(x_0, y_0) \right) \\ y_1^- &= y_0 + hf \left(x_0 + \frac{3}{4}h, y_0 + \frac{3}{4}hf(x_0, y_0) \right) \end{aligned} \quad (51)$$

$$3. \ g = \frac{1}{6}, \ p_{21} = 0.$$

$$\begin{aligned} y_1^+ &= y_0 + hf \left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{h}{3} f(x_0, y_0) \right) \\ y_1^- &= y_0 + hf \left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + \frac{2}{3}hf(x_0, y_0) \right) \end{aligned} \quad (52)$$

$$4. \ g = \frac{1}{4}, \ p_{21} = \frac{1}{4}.$$

$$\begin{aligned} y_1^+ &= y_0 + \frac{h}{4} f(x_0, y_0) + \frac{3}{4}hf \left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{h}{3} f(x_0, y_0) \right) \\ y_1^- &= y_0 + \frac{h}{4} f(x_0, y_0) + \frac{3}{4}hf(x_0 + h, y_0 + hf(x_0, y_0)) \end{aligned} \quad (53)$$

Напомним, что во всех двучленных двухсторонних методах Рунге-Кутта погрешность шага имеет вид

$$j_2(h) = gh^2 \{ f'_x + ff'_y \}_{x=x_0, y=y_0} + O(h^3). \quad (54)$$

2.2. Трехчленные двухсторонние методы Рунге-Кутта

Методы этого типа образуют несколько трехпараметрических семейств [2] и имеют погрешность на шаге порядка $O(h^3)$. В приведенных ниже примерах 1-2 погрешность на шаге имеет вид

$$j_3(h) = gh^3 \{ f'_x f'_y + ff''_y \}_{x=x_0, y=y_0} + O(h^4), \quad (55)$$

в примерах 3-4 – вид

$$j_3(h) = g \frac{h^3}{2} \{ f''_{xx} + 2ff''_{xy} + f^2 f''_{yy} \}_{x=x_0, y=y_0} + O(h^4). \quad (56)$$

$$1. \ g = 1.$$

$$\begin{aligned}
y_1^+ &= y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + K_2 + 4K_3^+) \\
y_1^- &= y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + K_2 + 4K_3^-),
\end{aligned} \tag{57}$$

где

$$\begin{aligned}
K_1 &= hf(x_0, y_0), \quad K_2 = hf(x_0 + h, y_0 + K_1), \\
K_3^+ &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{7}{4}K_1 - \frac{5}{4}K_2\right), \quad K_3^- = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 - \frac{5}{4}K_1 + \frac{7}{4}K_2\right).
\end{aligned}$$

$$2. \quad g = \frac{1}{24}.$$

$$\begin{aligned}
y_1^+ &= y_0 + \frac{1}{4}(K_1 + 3K_3^+) \\
y_1^- &= y_0 + \frac{1}{4}(K_1 + 3K_3^-),
\end{aligned} \tag{58}$$

где

$$\begin{aligned}
K_1 &= hf(x_0, y_0), \quad K_2^+ = hf\left(x_0 + \frac{h}{4}, y_0 + \frac{K_1}{4}\right), \quad K_2^- = hf\left(x_0 + \frac{5}{12}h, y_0 + \frac{5}{12}K_1\right), \\
K_3^+ &= hf\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + \frac{2}{3}K_2^+\right), \quad K_3^- = hf\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + \frac{2}{3}K_2^-\right).
\end{aligned}$$

$$3. \quad g = \frac{1}{2}.$$

$$\begin{aligned}
y_1^+ &= y_0 - \frac{1}{2}(3K_1 + 6K_2^+ + K_3^+) \\
y_1^- &= y_0 + \frac{3}{2}K_1 - \frac{2}{3}K_2^- + K_3^-,
\end{aligned} \tag{59}$$

где

$$\begin{aligned}
K_1 &= hf(x_0, y_0), \quad K_2^+ = hf\left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{K_1}{3}\right), \quad K_2^- = hf\left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0\right), \\
K_3^+ &= hf(x_0 + h, y_0 + 2K_1 - K_2^+), \quad K_3^- = hf\left(x_0 + h, y_0 + \frac{K_1}{2} + \frac{K_2^-}{2}\right).
\end{aligned}$$

$$4. \quad g = \frac{1}{2}.$$

$$\begin{aligned}
y_1^+ &= y_0 + K_3^+ \\
y_1^- &= y_0 + \frac{1}{3}(2K_1 + 3K_3^-),
\end{aligned} \tag{60}$$

где

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{K_1}{3}\right),$$

$$K_3^+ = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_2}{2}\right), K_3^- = hf\left(x_0 + \frac{5}{6}h, y_0 + \frac{5}{6}K_2\right).$$

2.3. Организация счета в двухсторонних методах типа Рунге-Кутты

Согласно полученным в предыдущих пунктах двухсторонним методам, любой из них задается двумя формулами

$$\begin{aligned} y_i^+ &= y_i^+(x_{i-1}, h_{i-1}, y_{i-1}), \\ y_i^- &= y_i^-(x_{i-1}, h_{i-1}, y_{i-1}), \end{aligned} \quad (61)$$

которые позволяют из начальной точки x_0 перейти в следующую точку x_1 и получить два приближенных значения y_1^+, y_1^- . Далее вычисления приближенного решения может проходить по различным схемам.

Схема 1. Значения y_1^+, y_1^- ($i = 2, 3, \dots$) определяются независимо друг от друга

$$\begin{aligned} y_i^+ &= y_i^+(x_{i-1}, h_{i-1}, y_{i-1}^+), \\ y_i^- &= y_i^-(x_{i-1}, h_{i-1}, y_{i-1}^-), \end{aligned}$$

т.е. по значению $y_1^+(y_1^-)$ вычисляется $y_2^+(y_2^-)$, по значению $y_2^+(y_2^-)$ вычисляется $y_3^+(y_3^-)$ и так далее до конца отрезка интегрирования.

Схема 2. Пусть для определенности в точке x_1 вычисленные значения y_1^+, y_1^- связаны неравенством $y_1^- \leq y_1^+$. Исходя из y_1^- можно получить два значения $\bar{y}_2^-, \bar{\bar{y}}_2^-$ приближенного решения в точке x_2 , проведя вычисления по обеим формулам двустороннего метода. Меньшее из $\bar{y}_2^-, \bar{\bar{y}}_2^-$ принимается за y_2^- . Аналогично, исходя из y_1^+ , вычисляются два значения $\bar{y}_2^+, \bar{\bar{y}}_2^+$ и большее из них принимается за y_2^+ . Если получится, что $y_2^- > y_2^+$, то считается, что двусторонний метод при выбранном значении шага неприменим, вычисления прекращаются. Если $y_2^- \leq y_2^+$, то вычислительный процесс продолжается подобным образом.

Схема 3. Пусть опять, как и в схеме 2, значения y_1^+, y_1^- связаны неравенством $y_1^- \leq y_1^+$. Вычисление приближенных значений y_2^+, y_2^- происходит аналогично

вычислениям по схеме 2. Отличие заключается в том, что в качестве y_2^- принимается большее из $\bar{y}_2^-, \bar{\bar{y}}_2^-$, а в качестве y_2^+ – меньшее из $\bar{y}_2^+, \bar{\bar{y}}_2^+$.

Схема 4. В этой схеме вычисление приближенного решения осуществляется попеременно – то по одной, то по другой формуле. Например, если принять, что $y_1 = y_1^+(x_0, h_0, y_0)$, то $y_2 = y_2^-(x_1, h_1, y_1)$, $y_3 = y_3^+(x_2, h_2, y_2)$, $y_4 = y_4^-(x_3, h_3, y_3)$ и т.д. Построенное приближенное решение будет характеризоваться тем, что на каждом шаге главная часть локальной погрешности, как правило, изменяет знак на противоположный.

3. Повышение точности экстраполяционным методом Ричардсона

Пусть решение некоторого дифференциального уравнения ищется с помощью численного метода первого порядка точности относительно шага сетки h . Если использовать этот метод с параметром h , а затем $h/2$, то второе решение будет в два раза точнее первого. Если получить решение с параметром $h/3$, то оно будет в три раза более точным и т.д. Если нам потребуется получить решение в 10^3 раз точнее, чем приближенное решение, соответствующее параметру h , то необходимо в 10^3 раз уменьшить шаг сетки. Понятно, что в этом случае возникают проблемы с ошибками округления и временем счета.

Однако, если есть дополнительная информация о достаточной гладкости решения, то можно сделать экстраполяцию решения по шагу сетки, которая дает поразительные результаты. Допустим, что решение исходной дифференциальной задачи позволяет предположить, что приближенное решение имеет три ограниченных производных по параметру h . Тогда можно доказать, что линейная комбинация трех приближенных решений, соответствующих $h, h/2, h/3$, будет давать точность $O(h^3)$.

Если безразмерный параметр h взять равным $1/10$, то для получения точности решения порядка 10^{-3} методом первого порядка число узлов сетки

пропорционально 10^3 . Метод экстраполяции по Ричардсону обеспечит такую же точность исходя из трех решений с числом узлов, пропорциональных соответственно 10, 20, 30!

Использование приближенных решений на последовательности сеток – основная идея метода экстраполяции Ричардсона, высказанная им в начале этого века.

Метод Ричардсона в принципе позволяет получить уточненные решения любого порядка точности, если обеспечены соответствующие условия гладкости.

3.1. Повышение точности в методе Эйлера

Рассмотрим начальную задачу Коши

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f(t, u) & t \in (0, 1) \\ u(0) = u_0, \end{cases} \quad (63)$$

где $f(t, u) \in C^r([0, 1] \times (-\infty, +\infty))$, $r \geq 2$, r – целое.

Предположим, что решение задачи (1) существует, единственно и $u \in C^{r+1}[0, 1]$.

Замечание . При рассмотрении экстраполяции по Ричардсону предполагается, что аргумент приведен к безразмерному виду (изменяется на отрезке $[0, 1]$). Этим объясняется использование обозначений, отличных от обозначений предыдущих параграфов.

Приближенное решение задачи (63), полученное методом Эйлера (9) на равномерной сетке $\bar{v}_t = \{t_j = jt, j = 0, 1, \dots, M\}$ с шагом $t = \frac{1}{M}$ обозначим u^t .

Для фиксированных целых чисел $0 < N_1 < \dots < N_r$ построим сетки \bar{v}_{t_k} с шагами $t_k = \frac{1}{N_k M}$, где M может неограниченно возрастать. На каждой из сеток получим приближенное решение методом Эйлера. Заметим, что все решения u^{t_k} определены на сетке \bar{v}_{t_k} с шагом $t = \frac{1}{M}$.

Рассмотрим систему

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^r g_k = 1 \\ \sum_{k=1}^r g_k t_k^j = 0, j = 1, \dots, r-1 \end{cases} \quad (64)$$

линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных g_1, g_2, \dots, g_r . Поскольку определитель системы (определитель Вандермонда) отличен от нуля, имеется единственное решение g_1, g_2, \dots, g_r . С этими весами в узлах сетки \bar{v}_t составим линейную комбинацию

$$U^H = \sum_{k=1}^r g_k u^{t_k}. \quad (65)$$

Полученное решение U^H называют откорректированным решением или решением, экстраполированным по Ричардсону. Погрешность решения U^H имеет порядок t^r :

$$\max_{\bar{v}_t} |U^H - u| = O(t^r). \quad (66)$$

Строгое доказательство приведенного выше утверждения о порядке точности U^H можно найти в книге [4].

Замечание об оценке погрешности.

Пусть определено решение задачи Коши с постоянным шагом H на сетке \bar{v}_t экстраполяционным методом Ричардсона порядка r . То есть выбраны r целых чисел $0 < N_1 < \dots < N_r$, построены сетки $\bar{v}_{t_k}, k = 1, 2, \dots, r$, и методом Эйлера получены решения $u^{t_1}, u^{t_2}, \dots, u^{t_r}$, из которых построена линейная комбинация $U^H = \sum_{k=1}^r g_k u^{t_k}$ (65), которая является численным решением порядка r . Для оценки погрешности решения U^H поступим следующим образом. Возьмем целое число N_{r+1} , удовлетворяющее условию $N_r < N_{r+1}$, и на сетке $\bar{v}_{t_{r+1}}$ проинтегрируем методом Эйлера еще раз исходную задачу Коши. Далее по уже вычисленным решениям и вновь полученному решению $u^{t_{r+1}}$, т.е. исходя из набора решений $u^{t_1}, u^{t_2}, \dots, u^{t_r}, u^{t_{r+1}}$,

построим новую линейную комбинацию $\bar{U}^H = \sum_{k=1}^{r+1} \bar{g}_k u^{t_k}$ типа (65), которая будет являться уже решением $(r+1)$ -ого порядка. Очевидно, что в узлах сетки \bar{V}_t абсолютная величина разности U^H и \bar{U}^H есть величина порядка $O(t^r)$ и ее значение дает главную часть погрешности приближенного решения U^H .

3.2. Построение непрерывного приближенного решения

Отметим одно из неудобств применения экстраполирования по Ричардсону. Откорректированное решение отыскивается в точках, являющихся общими узлами всех сеток, которых может оказаться мало. Кроме того, приближенное решение может потребоваться в точках, вообще не являющихся узлами сеток. Для таких точек возможно применение интерполяции сплайнами, многочленами и т.п. Простейший выход – применение интерполяционных полиномов Лагранжа.

Продолжим приближенное решение u^{t_k} , определенное на сетке \bar{V}_{t_k} , на весь отрезок $[0,1]$ следующим образом. Возьмем произвольный элементарный отрезок $[t_j, t_{j+1}]$ сетки \bar{V}_{t_k} . Решение u^{t_k} определено лишь на концах этого отрезка в узлах t_j, t_{j+1} . Выберем дополнительно к ним еще $r-2$ ближайших узлов сетки \bar{V}_{t_k} и на отрезке $[t_j, t_{j+1}]$ определим непрерывное приближенное решение $u^{t_k}(t)$, совпадающее с интерполяционным полиномом Лагранжа, построенным по r выбранным узлам. В результате интерполяции по всем элементарным отрезкам мы получим непрерывную функцию, совпадающую с u^{t_k} в узлах сетки \bar{V}_{t_k} . Будем обозначать ее $u^{t_k}(t)$. Используем построенные интерполанты $u^{t_k}(t)$ для вычисления приближенного непрерывного откорректированного решения $U^H(t)$ в форме

$$U^H(t) = \sum_{k=1}^r g_k u^{t_k}(t), \quad t \in [0,1], \quad (67)$$

где веса g_k те же, что и в линейной комбинации (65).

Погрешность непрерывного откорректированного решения $U^H(t)$, так же как и погрешность сеточного решения U^H , имеет порядок t^r :

$$\max_{[0,1]} |U^H(t) - u(t)| = O(t^r). \quad (68)$$

Замечание о коэффициентах интерполяционных полиномов откорректированного решения.

Каждый из построенных интерполянтов $u^{t_k}(t)$ есть непрерывная функция, являющаяся на каждом из элементарных отрезков соответствующей сетки \bar{v}_{t_k} интерполяционным полиномом степени $r-1$. Откорректированное решение U^H - это также непрерывная функция, являющаяся полиномом степени $r-1$ на каждом из элементарных отрезков самой мелкой сетки \bar{v}_{t_r} . Нетрудно видеть, что коэффициенты интерполяционных полиномов откорректированного решения на каждом из элементарных участков сетки \bar{v}_{t_r} являются линейными комбинациями соответствующих коэффициентов интерполяционных полиномов для u^{t_k} с теми же коэффициентами, что и линейная комбинация (67).

Замечание об интерполяционных многочленах Лагранжа.

Если $f(x) \in C^r[0,1]$ и известны значения $f(x_j)$ в r равноотстоящих точках $x_j = x_1 + (j-1)h$ отрезка $[0,1]$, то для интерполяционного полинома Лагранжа

$$L_{r-1}(x) = \sum_{i=1}^r f(x_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad (69)$$

справедливо соотношение

$$f(x) - L_{r-1}(x) = \frac{1}{2!} f^{(r)}(x) v_r(x),$$

$$\text{где } x \in [x_1, x_r], x \in [0,1], v_r(x) = \prod_{j=1}^r (x - x_j).$$

Для $v_r(x)$ имеет место оценка

$$|V_r(x)| \leq \frac{h^r}{4}(r-1)!.$$

Следовательно,

$$|f(x) - L_{r-1}(x)| \leq \frac{h^r}{4^r} \max_{x \in [0,1]} |f^{(r)}(x)|. \quad (70)$$

Замечание о решении системы уравнений (64).

Если в системе уравнений (64) $t_i = \frac{1}{i}$, то решение можно выписать в виде [4]

$$g_k = \frac{(-1)^{r-k} k^r}{k!(r-k)!}, k = 1, 2, \dots, r. \quad (71)$$

Если в системе уравнений (64) $t_i = \frac{1}{i^2}$, то решение можно выписать в виде [4]

$$g_k = 2 \frac{(-1)^{r-k} k^{2r}}{(r+k)!(r-k)!}, k = 1, 2, \dots, r. \quad (72)$$

4. Практические способы оценки погрешности явных одношаговых методов решения задачи Коши

При численном решении задачи Коши (1),(2) погрешность (ошибка) результатов складывается из трех составляющих: погрешность исходных данных (задание начального значения y_0 с некоторой ошибкой), погрешность метода решения (погрешность дискретизации) и погрешность округлений. Далее мы будем полагать, что значения y_0 в (2) заданы верно.

Погрешность метода – это свойство используемого метода. Если бы все арифметические вычисления выполнялись точно, то полная, или общая, погрешность была бы равна погрешности метода, т.е. погрешность метода является неустранимой погрешностью.

Важно понимать, что погрешность метода можно оценивать двояко – локально и глобально. Локальная погрешность – это ошибка, сделанная на данном

шаге при условии, что предыдущие значения решения точны и нет ошибки округления. Поясним сказанное. Пусть $y_n(x)$ – решение задачи Коши

$$\begin{cases} \frac{dy_n(x)}{dx} = f(t, y_n(x)) \\ y_n(x_n) = y_n, \end{cases} \quad (72)$$

то есть $y_n(x)$ является решением исходного уравнения (1), определенным не начальным условием (2) в точке x_0 , а значением вычисленного решения y_n в точке x_n . Локальная погрешность e_n есть разность между точным решением $y_n(x_n + h)$ и вычисленным решением y_{n+1} , определяемыми одними и теми же данными в точке x_n :

$$e_n = y_n(x_{n+1}) - y_{n+1}. \quad (73)$$

Подчеркнем, что в приведенном выражении (73) y_{n+1} – это вычисленное каким-либо приближенным методом значение в точке x_{n+1} в предположении об отсутствии ошибок округления. Локальная погрешность методов типа Рунге-Кутты именно в таком аспекте уже обсуждалась в п.1.1 (см. формулу (8)).

Глобальная погрешность – это разность между точным решением задачи Коши (1),(2) в точке x_n , определяемым начальным значением в точке x_0 , и вычисленным решением y_n (все ошибки округления игнорируются):

$$e_n = y(x_n) - y_n. \quad (74)$$

Замечание 1. Пусть задача Коши (1),(2) решается методом Эйлера (9) и правая часть уравнения (1) не зависит от y . Тогда точное решение $y(x)$ есть просто интеграл $y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t)dt$ и метод Эйлера фактически совпадает с численным методом интегрирования по формулам левых прямоугольников:

$$y_n = y_0 + \sum_{k=0}^{n-1} h_k f(x_k). \quad (75)$$

Локальная погрешность e_n на одном подинтервале равна

$$e_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(t)dt - h_k f(x_k), \quad (76)$$

глобальная погрешность равна

$$e_k = \int_{x_0}^{x_n} f(t)dt - \sum_{k=0}^{n-1} h_k f(x_k), \quad (77)$$

Сравнивая соотношения (76),(77), видим, что в рассматриваемом случае глобальная погрешность равна сумме локальных погрешностей метода:

$$e_n = \sum_{k=0}^{n-1} e_n. \quad (78)$$

В общем случае, когда правая часть уравнения (1) зависит от двух переменных x и $y(x)$, локальная погрешность метода на любом подинтервале зависит от значений решения, вычисленных на предыдущих интервалах. Вследствие этого глобальная погрешность не будет равна сумме локальных погрешностей.

2. Пусть на всем отрезке интегрирования задачи Коши (1),(2) от начального x_0 до конечного x_n шаг постоянен и равен h . Тогда общее число шагов $N = (x_n - x_0)/h$. Предположим, что вычисление приближенного решения проводится некоторым явным методом типа Рунге-Кутты порядка s , что в соответствии с определением (8) означает, что локальная погрешность метода есть величина порядка $O(h^{s+1})$. Глобальная погрешность e_N в конечной точке интегрирования x_n , грубо говоря, может быть представлена в виде суммы N слагаемых, каждое из которых имеет порядок $O(h^{s+1})$, поэтому глобальная погрешность имеет порядок $N \cdot O(h^{s+1}) = O(h^s)$:

$$e_N = O(h^s). \quad (79)$$

Замечание 3. Посмотрим, что происходит с локальной и глобальной погрешностью метода Эйлера ($s=1$) при уменьшении длины шага.

Пусть длина шага уменьшилась в 2 раза: $\tilde{h} = h/2$, тогда локальная погрешность \tilde{e}_k уменьшается примерно в $2^{s+1}=4$ раза. Но так как

для достижения конца отрезка интегрирования теперь потребуется вдвое больше шагов, то глобальная ошибка уменьшится только в $2^s=2$ раза.

Влияние погрешности округления на приближенные значения решения задачи Коши (1),(2) проиллюстрируем на примере метода Эйлера с постоянным шагом. Пусть на каждом шаге метода Эйлера делается наихудшая возможная ошибка округления E

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k) + E, \quad (80)$$

тогда полная ошибка вследствие округлений равна NE . Суммируя глобальную погрешность метода (408) и погрешности округления, получаем, что общая погрешность R

$$R \cong O(h) + NE \leq ch + E(x_n - x_0)/h, \quad (81)$$

где константа c не зависит от значения шага h . Из последнего соотношения следует, что существует оптимальное значение шага h_{opt} , которое минимизирует общую погрешность R

$$h_{opt} \cong \sqrt{\frac{x_n - x_0}{c} \cdot E}. \quad (82)$$

Замечание 4. Справедливости ради заметим, что в методе Эйлера общая погрешность, накопившаяся от округлений, на самом деле ведет себя как \sqrt{NE} , поскольку погрешность округлений является скорее случайной величиной, чем константой, как мы предположили в предыдущих рассуждениях.

4.1. Оценка глобальной погрешности по правилу Рунге

Пусть задача Коши (1),(2) решается каким-либо явным методом типа Рунге-Кутты порядка s на сетке с постоянным шагом h . Локальную погрешность метода (8) запишем в виде

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \mathcal{Y}(x_n, y_n)h^{s+1} + O(h^{s+2}), \quad (83)$$

$$\text{где } \mathcal{Y}(x_n, y_n) = \frac{1}{(s+1)!} j_q^{(s+1)}(0) \Big|_{\substack{x=x_n \\ y=y_n}}.$$

Если погрешность начального условия и погрешности округлений считать равными нулю, то для глобальной погрешности метода e_n имеет место асимптотическое представление [5]

$$e_n = z(x_n)h^s + O(h^{s+1}), \quad (84)$$

$$\text{где } z(x_n) = \int_{x_0}^{x_n} y(x, y(x)) \exp \left(\int_x^{x_n} \frac{\partial f}{\partial y}(t, y(t)) dt \right) dx.$$

Пренебрегая членом $O(h^{s+1})$ в оценке (84), запишем формулу для глобальной погрешности e_n в виде

$$e_n \cong z(x_n)h^s. \quad (85)$$

Далее будем предполагать, что рассматриваются только такие задачи Коши, для которых глобальная погрешность e_n в виде (85) достаточно адекватно отражает полную погрешность R_n приближенного метода:

$$R_n \cong z(x_n)h^s. \quad (86)$$

На представлении полной погрешности в виде (86) основывается метод Рунге оценки глобальной погрешности. Согласно методу Рунге, приближенное решение задачи Коши в некоторой точке x_n вычисляется дважды с разными шагами (обычно с шагом h и $h/2$), но одним и тем же методом. Два полученных приближенных решения позволяют апостериорно судить о погрешности решения.

Пусть в точке x_n вычислено решение \bar{y}_n с шагом h ; погрешность этого решения на основании (86) равна

$$y(x_n) - \bar{y}_n \cong z(x_n)h^s. \quad (87)$$

Решение, вычисленное по той же формуле с шагом $h/2$, обозначим в точке x_n через $\bar{\bar{y}}_n$. Погрешность решения $\bar{\bar{y}}_n$ опять оценим по соотношению (86):

$$y(x_n) - \bar{\bar{y}}_n \cong z(x_n) \left(\frac{h}{2} \right)^s. \quad (88)$$

Исключив из (87-88) значение точного решения $y(x_n)$, получим

$$z(x_n) \cong \frac{\bar{\bar{y}}_n - \bar{y}_n}{h^s \left(1 - \frac{1}{2^s} \right)}. \quad (89)$$

Теперь оценки погрешности для приближенных значений $\bar{y}_n, \bar{\bar{y}}_n$ принимают вид

$$\bar{R}_n = y(x_n) - \bar{y}_n \cong (\bar{\bar{y}}_n - \bar{y}_n) / \left(1 - \frac{1}{2^s}\right), \quad (90)$$

$$\bar{\bar{R}}_n = y(x_n) - \bar{\bar{y}}_n \cong (\bar{\bar{y}}_n - \bar{y}_n) / (2^s - 1). \quad (91)$$

Заметим, что полученные приближенные значения $\bar{y}_n, \bar{\bar{y}}_n$ можно уточнить, положив

$$y(x_n) \cong \bar{y}_n + \bar{R}_n \quad (92)$$

или

$$y(x_n) \cong \bar{\bar{y}}_n + \bar{\bar{R}}_n. \quad (93)$$

При этом порядок точности увеличивается на единицу

$$y(x_n) - y_n = O(h^{s+1}), \quad (94)$$

но вопрос о значении погрешности уточненного решения остается открытым.

Замечание 1. Приведенные выше рассуждения справедливы и в том случае, когда сетки с разным числом узлов неравномерны, но их можно описать функциями $h(x)$, отношение которых $\bar{h}(x)/\bar{\bar{h}}(x) = r = \text{const}$. Обычно в качестве решения в точке x_n принимают значение $\bar{\bar{y}}_n$ как более точное по сравнению с \bar{y}_n .

Замечание 2. Если задана максимально допустимая погрешность e и оказалось, что $|\bar{\bar{R}}| > e$, то необходимо повторить вычисления с более мелким шагом. Величину нового шага h_e можно определить, положив

$$|z(x_n)| h_e^s = e,$$

откуда находим

$$h_e = \sqrt[s]{e/|z(x_n)|}. \quad (95)$$

Подставляя (89) и (91) в последнее выражение, получаем

$$h_e = \frac{h}{2} \sqrt[s]{\frac{(2^s - 1)e}{|\bar{\bar{y}}_n - \bar{y}_n|}} = \frac{h}{2} \sqrt[s]{\frac{e}{|\bar{\bar{R}}_n|}}. \quad (96)$$

Замечание 3. Из формулы (96) следует, что при $|\overline{R}| > e$ новое значение шага уменьшается, при $|\overline{R}| < e$ – увеличивается. Этим обстоятельством пользуются тогда, когда на отрезке интегрирования задачи Коши есть несколько контрольных точек, в которых погрешности приближенного решения должны не превосходить наперед заданных допустимых погрешностей.

Замечание 4. Идея определения шага интегрирования, при котором достигается заданная точность, по двум приближенным значениям решения может быть использована не только при двойном пересчете приближенного решения по правилу Рунге. Так, ею можно воспользоваться при численном решении задачи Коши двухсторонними методами Рунге-Кутты. Пусть порядок двухстороннего метода равен S . Тогда с учетом выражений для локальных погрешностей метода на шаге (39) запишем главные части полных погрешностей в виде

$$y(x_n) - y_n^+ \cong R_n^+ = g_z(x_n)h^s,$$

$$y(x_n) - y_n^- \cong R_n^- = -g_z(x_n)h^s,$$

откуда

$$2g_z(x_n)h^s = y_n^- - y_n^+.$$

Величину нового шага h_e можно определить, если положить

$$|g_z(x_n)|h_e^s = e/2.$$

Отсюда находим

$$h_e = h \sqrt{\frac{2e}{|y_n^- y_n^+|}}. \quad (97)$$

Замечание 5. В случае решения системы дифференциальных уравнений (35) правило Рунге записывается для каждой из компонент решения y^1, y^2, \dots, y^M

$$\begin{aligned}\bar{R}_n^l &= y^l(x_n) - \bar{y}_n^l \cong (\bar{\bar{y}}_n^l - \bar{y}_n^l) / \left(1 - \frac{1}{2^s}\right), l = 1, 2, \dots, M, \\ \bar{\bar{R}}_n^l &= y^l(x_n) - \bar{\bar{y}}_n^l \cong (\bar{\bar{y}}_n^l - \bar{y}_n^l) / (2^s - 1), l = 1, 2, \dots, M.\end{aligned}$$

4.2. Оценка локальной погрешности по правилу Рунге

Метод Рунге практической оценки локальной погрешности является наиболее распространенным, хотя и не самым эффективным методом. Он заключается в том, что по одной и той же выбранной вычислительной формуле считаются два приближения к решению в одной точке, но с разными шагами. Сравнение этих двух приближенных значений позволяет получить апостериорную оценку погрешности.

Обозначим через \bar{y}_1 решение, полученное по выбранной расчетной формуле типа (4),(5) в точке $x_1 = x_0 + h$. Главный член локальной погрешности обозначим через $y(x_0, y_0)h^{s+1}$, подчеркнув тем самым, что решение получено из точки x_0 :

$$y(x_0 + h) - \bar{y}_1 = y(x_0, y_0)h^{s+1}. \quad (98)$$

Обозначим через \hat{y} решение, полученное по правилу (4,5) в точке $x_0 + \frac{h}{2}$, главный член погрешности которого равен

$$y\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) - \hat{y} = y(x_0, y_0)\left(\frac{h}{2}\right)^{s+1}. \quad (99)$$

Из точки $x_0 + \frac{h}{2}$ вычислим приближение $\bar{\bar{y}}_1$ к решению в точке $x_0 + h$ с погрешностью

$$\hat{y}(x_0 + h) - \bar{\bar{y}}_1 = y\left(x_0 + \frac{h}{2}, \hat{y}\right)\left(\frac{h}{2}\right)^{s+1}, \quad (100)$$

где $\hat{y}(x)$ – точное решение уравнения (1), удовлетворяющее условию

$$\hat{y}\left(x + \frac{h}{2}\right) = \hat{y}.$$

Если в качестве приближения к решению в точке x принять $\bar{\bar{y}}_1$, то согласно правилу Рунге [6] главная часть погрешности метода на двух последовательных шагах $h/2$ равна

$$y(x_0 + h) - \bar{\bar{y}}_1 = (\bar{\bar{y}}_1 - \bar{y}_1)/(2^s - 1). \quad (101)$$

Вычисленное приближенное значение $\bar{\bar{y}}_1$ можно уточнить, прибавив к нему величину главного члена погрешности, то есть положив

$$y(x_1) \cong y_1 = \bar{\bar{y}}_1 + (\bar{\bar{y}}_1 - \bar{y}_1)/(2^s - 1). \quad (102)$$

Тогда

$$y(x_1) - y_1 = O(h^{s+2}). \quad (103)$$

В данном способе оценки погрешности формула Рунге-Кутты (4,5) применяется три раза и требуется $3q-1$ вычислений правой части $f(x, y)$ дифференциального уравнения (1), поэтому при сложных и трудоемких для вычисления правых частях этот способ влечет большие вычислительные затраты.

4.3. Оценка локальной погрешности на основе комбинации методов разного порядка точности

Этот метод, так же как и метод оценки погрешности Рунге, основан на сравнении двух приближенных значений решения в одной точке, только эти значения вычисляются по формулам типа (4),(5) разных порядков точности с одним и тем же шагом.

Пусть выбраны два метода типа Рунге-Кутты разных порядков. Один метод порядка p :

$$y_1^p = y_0 + \sum_{i=1}^r p_i k_i, \quad (104)$$

где

$$k_1 = hf(x_0, y_0), k_i = hf\left(x_0 + a_i h, y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j\right),$$

другой – порядка s :

$$y_1^s = y_0 + \sum_{i=1}^{\tilde{r}} \tilde{p}_i \tilde{k}_i, \quad (105)$$

где

$$\tilde{k}_1 = hf(x_0, y_0), \tilde{k}_i = hf\left(x_0 + a_i h, y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \tilde{b}_{ij} \tilde{k}_j\right).$$

Пусть $p > s, r \geq \tilde{r}$. Тогда оценка локальной погрешности r^s формулы (105) имеет вид

$$r^s = y_1^p - y_1^s + O(h^{p+1})$$

или, оставляя только члены главного порядка,

$$r^s \cong y_1^p - y_1^s. \quad (106)$$

Полученная оценка погрешности (106) требует $\tilde{r} + r - 1$ вычислений правой части уравнения (1).

Если коэффициенты в формулах (104) и (105) таковы, что

$$a_i = \tilde{a}_i, b_{ij} = \tilde{b}_{ij}, i = 1, 2, \dots, \tilde{r}, \quad (107)$$

то $k_i = \tilde{k}_i, i = 1, 2, \dots, \tilde{r}$, и для локальной погрешности (13?) получается выражение вида

$$r^s \cong y_1^p - y_1^s = \sum_{i=1}^r q_i k_i. \quad (108)$$

где $q_i = p_i - \tilde{p}_i, i = 1, 2, \dots, \tilde{r}, \quad q_i = p_i, i = \tilde{r} + 1, \dots, r$

Величина

$$E = \sum_{i=1}^r q_i k_i \quad (109)$$

называется контрольным членом. Использование контрольных членов для комбинаций специально подобранных формул позволяет уменьшить по сравнению с правилом Рунге (102) и оценкой (106) количество вычислений правой части уравнения (1).

Пример 1. Комбинация независимых формул.

Для метода третьего порядка ($s = 3, \tilde{r} = 3$)

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{4}(K_1 + 3K_3), \quad (110)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{1}{3}h, y_0 + \frac{1}{3}K_1\right), K_3 = hf\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + \frac{2}{3}K_2\right),$$

формула которого принадлежит двухпараметрическому семейству (27) и соответствует значениям $a_2 = \frac{1}{3}, a_3 = \frac{2}{3}$, остаточный член оценим с помощью метода трех восьмых (33) четвертого порядка ($p = 4, r = 4$)

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{8}(K_1 + 3K_2 + 3K_3 + K_4), \quad (111)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{1}{3}h, y_0 + \frac{1}{3}K_1\right)$$

$$K_3 = hf\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 - \frac{1}{3}K_1 + K_2\right), K_4 = hf(x_0 + h, y_0 + K_1 - K_2 + K_3).$$

Замечание . Если оценивать погрешность метода (110) по правилу Рунге, то требуется 8 обращений к правой части $f(x, y)$ вместо пяти по рассмотренному в примере 1 методу.

Пример 2. Комбинация специально подобранных формул.

Методы (30)

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3), \quad (112)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_1}{2}\right), K_3 = hf(x_0 + h, y_0 - K_1 + 2K_2),$$

и (22)

$$y_1 = y_0 + K_2, \quad (113)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_1}{2}\right),$$

удовлетворяют условию (107), при этом $p = 3, s = 2, r = 3, \tilde{r} = 2$. Контрольный член (109) записывается в виде

$$E = \frac{1}{6}(K_1 - 2K_2 + K_3) \quad (114)$$

и имеет порядок $O(h^3)$.

Пример 3. Комбинация специально подобранных формул.

Стандартный метод Рунге-Кутты четвертого порядка (32)

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad (115)$$

$$K_1 = hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_1}{2}\right), K_3 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_2}{2}\right),$$

$$K_4 = hf(x_0 + h, y_0 + K_3),$$

и метод второго порядка (22) удовлетворяют условию (107), при этом $p = 4, s = 2, r = 4, \tilde{r} = 2$. Контрольный член (109) записывается в виде

$$E = \frac{1}{6}(K_1 - 4K_2 + 2K_3 + K_4) \quad (116)$$

и имеет порядок $O(h^3)$.

Замечание . Если оценку погрешности метода (22) проводить по правилу Рунге, то потребуется пять обращений к правой части исходного уравнения. В примере 2 для такой оценки достаточно трех обращений, в примере 3 – двух обращений к правой части.

4.4. Вложенные методы оценки локальной погрешности

Вложенные методы оценки локальной погрешности решения задачи Коши – это методы, основанные на комбинации приближенных методов порядка p и $p+1$. Как и в предыдущем пункте, два приближенных значения решения в одной точке позволяют получить погрешность интегрирования метода порядка p . Но вложенные методы – это такие методы, в которых метод p -ого порядка получается как “побочный продукт” метода $(p+1)$ -ого порядка. Если в предыдущем пункте брались два самостоятельных метода типа Рунге-Кутты (4),(5), в которых коэффициенты a_i, b_{ij}, p_{qi} определялись из условия минимума погрешности на шаге, то во вложенном методе берется один метод типа Рунге-Кутта порядка $p+1$. Для этого метода вычисляются необходимые значения $k_i(h)$ и с их помощью подбирается новый приближенный метод порядка p , который, естественно, уже не минимизирует погрешность на шаге и в этом смысле не является методом Рунге-Кутты. Алгебра получения таких методов достаточно громоздка, особенно для методов порядка $p > 4$, однако за 1967-1969 годы

Инглендом, Синтани и Фельбергом было получено множество таких методов. Ниже приведены простейшие примеры вложенных методов.

Замечание . Иногда в качестве “побочного продукта” берут метод порядка меньше, чем p . В этом случае вычислительные формулы значительно упрощаются (см. пример 1).

Пример 1.

Стандартный метод Рунге-Кутта четвертого порядка (32)

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad (117)$$

позволяет оценить метод второго порядка

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{2}(-K_1 + 2K_2 + 2K_3 - K_4). \quad (118)$$

Контрольный член записывается в виде

$$E = \frac{2}{3}(K_1 - K_2 - K_3 - K_4), \quad (119)$$

имеет порядок $O(h^3)$ и известен как контрольный член Егорова.

Пример 2.

Метод Рунге-Кутта третьего порядка (30)

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3) \quad (120)$$

позволяет оценить метод второго порядка (20)

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{2}(K_1 + K_3). \quad (121)$$

Контрольный член имеет порядок $O(h^3)$ и записывается в виде

$$E = -\frac{1}{3}(K_1 - 2K_2 + K_3). \quad (122)$$

Пример 3.

Пятичленная формула метода Рунге-Кутта четвертого порядка, предложенная Мерсоном,

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 4K_4 + K_5), \quad (123)$$

где

$$\begin{aligned}
K_1 &= hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{K_1}{3}\right), K_3 = hf\left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{K_1}{6} + \frac{K_2}{6}\right), \\
K_4 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_1}{8} - \frac{3}{8}K_3\right), K_5 = hf\left(x_0 + h, y_0 + \frac{K_1}{2} - \frac{3}{2}K_3 + 2K_4\right),
\end{aligned} \quad (124)$$

позволяет оценить метод третьего порядка

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{10}(K_1 + 3K_3 + 4K_4 + 2K_5). \quad (125)$$

Контрольный член порядка $O(h^4)$ в данном случае записывается в виде

$$E = \frac{1}{30}(2K_1 - 9K_3 + 8K_4 - K_5). \quad (126)$$

Пример 4.

Шестичленная формула метода Рунге-Кутты пятого порядка, построенная Инглендом,

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{336}(14K_1 + 35K_4 + 162K_5 + 125K_6), \quad (127)$$

где

$$\begin{aligned}
K_1 &= hf(x_0, y_0), K_2 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_1}{2}\right), K_3 = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_1}{4} + \frac{K_2}{4}\right), \\
K_4 &= hf(x_0 + h, y_0 - K_2 + 2K_3), K_5 = hf\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + \frac{7}{27}K_1 + \frac{10}{27}K_2 + \frac{1}{27}K_4\right), \\
K_6 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{5}, y_0 - \frac{1}{625}(28K_1 - 125K_2 + 546K_3 + 54K_4 + 378K_5)\right),
\end{aligned} \quad (128)$$

дает оценку для метода четвертого порядка

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 4K_3 + K_4) \quad (129)$$

в виде контрольного члена порядка $O(h^5)$

$$E = \frac{1}{336}(-42K_1 - 224K_3 - 21K_4 + 162K_5 + 125K_6). \quad (130)$$

Замечание . Методы, приведенные в примерах 1-4, позволяют уменьшить число обращений к правой части исходного уравнения по сравнению с тем, которое имеет место при пользовании правилом Рунге:
 пример 1 – метод второго порядка, четыре обращения вместо пяти;
 пример 2 – метод второго порядка, три обращения вместо пяти;

пример 3 – метод третьего порядка, пять обращений вместо восьми;
 пример 4 – метод четвертого порядка, шесть обращений вместо
 одиннадцати.

4.5. Мера погрешности приближенного решения

Выше рассматривались практические способы оценки глобальных и локальных абсолютных погрешностей решения, которые лежат в основе многих алгоритмов получения приближенных решений с наперед заданной верхней границей погрешности. Однако бывают ситуации, когда задание абсолютных погрешностей решения не только неразумно, но и приводит к принципиальной невозможности получения решения на данной ЭВМ. В самом деле, пусть допустимая абсолютная погрешность равна 10^{-k} , а максимальное значение решения – 10^{-p} . Тогда для того, чтобы требуемая точность была достигнута, количество используемых при вычислениях десятичных знаков t должно удовлетворять неравенству

$$t > k + p. \quad (131)$$

Очевидно, что значение t может превзойти длину разрядной сетки ЭВМ и вычисления станут невозможны.

Подобные ситуации не возникают, когда задается не абсолютная, а относительная погрешность приближенного решения. Однако при заданной относительной погрешности надо следить, чтобы приближенное решение не обращалось в нуль, вернее, чтобы приближенное решение не попадало в малую окрестность нуля.

Более гибким инструментом, чем абсолютная и относительная погрешности, является мера погрешности. Мерой погрешности приближенного решения называется дискретная функция

$$V_n = \frac{|y(x_n) - y_n|}{|y_n|^p} q^p, \quad (132)$$

где q – некоторое положительное число, выбираемое с учетом особенностей решаемой задачи; $p = 0$ при $|y_n| \leq q$; $p = 1$ при $|y_n| > q$.

Легко видеть, что при $|y_n| \leq q$ мера погрешности V_n совпадает с абсолютной погрешностью приближенного решения, а при $|y_n| > q$ – с ее взвешенной относительной погрешностью.

Замечание 1. На практике идея рассмотрения меры погрешности реализуется следующим образом. Пусть $e^{(Абс)}, e^{(Отн)}$ – наибольшие допустимые значения абсолютной и относительной погрешностей соответственно. Тогда считают, что мера погрешности удовлетворяет заданным требованиям, если выполняется условие

$$|e_n| \leq n|y_n| + m, \quad (133)$$

где

$$n = \begin{cases} 0, & \text{если } |y_n| \leq q, \\ e^{(Отн)}, & \text{если } |y_n| > q, \end{cases} \quad m = \begin{cases} e^{(Абс)}, & \text{если } |y_n| \leq q, \\ 0, & \text{если } |y_n| > q. \end{cases} \quad (134)$$

Заметим, что если в некоторой точке x_n верно равенство $|y_n| = 1$, то относительная и абсолютная погрешности приближенного решения в этой точке совпадают. Поэтому часто задают одно значение $e^{(0)}$ и проверяют выполнение условия (133), где

$$n = \begin{cases} 0, & \text{если } |y_n| \leq 1, \\ e^{(0)}, & \text{если } |y_n| > 1, \end{cases} \quad m = \begin{cases} e^{(0)}, & \text{если } |y_n| \leq 1, \\ 0, & \text{если } |y_n| > 1. \end{cases} \quad (135)$$

Замечание 2. О приближенном решении с наперед заданным числом верных знаков.

Пусть требуется построить приближенное решение, имеющее m верных знаков при записи в десятичной системе счисления. Предположим, что значение y_n имеет порядок p , тогда оно представимо в виде

$$y_n = a_1 \cdot 10^{p-1} + a_2 \cdot 10^{p-2} + \dots + a_m \cdot 10^{m-1} + \dots \quad (a_1 \neq 0). \quad (136)$$

Напомним, что цифра a_k считается верной, если абсолютная погрешность не превосходит $\frac{1}{2}10^{p-k}$. Если мы хотим иметь m

верных знаков, то необходимо потребовать, чтобы абсолютная погрешность приближенного решения удовлетворяла неравенству

$$|y(x_n) - y_n| \leq \frac{1}{2} 10^{p-m} \quad (137)$$

При этом относительная погрешность не будет зависеть от порядка p :

$$\frac{|y(x_n) - y_n|}{|y_n|} \leq \frac{1}{2} 10^{1-m} \quad (138)$$

Итак, чтобы найти приближенное решение с верными знаками, нужно искать значение шага интегрирования из условия (138) и при этом следить, чтобы y_n не обратилось в нуль

4.6. Способы оценки погрешности приближенного решения систем уравнений.

Так же как и сами методы типа Рунге-Кутты, полученные в 2.1 для одного дифференциального уравнения, практические способы оценки их погрешности легко переносятся на случай решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Пусть численно решается система уравнений (501) каким-либо методом типа Рунге-Кутты (502).

Апостериорная оценка глобальной погрешности по правилу Рунге.

Выпишем покомпонентно оценки погрешности, аналогичные (307),(308):

$$\bar{R}_n^i = y^i(x_n) - \bar{y}_n^i \cong (\bar{\bar{y}}_n^i - \bar{y}_n^i) / (1 - 1/2^s), \quad i = 1, 2, \dots, M$$

$$\bar{\bar{R}}_n^i = y^i(x_n) - \bar{\bar{y}}_n^i \cong (\bar{\bar{y}}_n^i - \bar{y}_n^i) / (2^s - 1), \quad i = 1, 2, \dots, M$$

Здесь черта над обозначениями является не символом вектора, а ставится в знак того, что решение (или погрешность) получено с шагом h .

Наиболее часто считают, что для глобальной погрешности решения достигается некоторая точность ϵ , если эта точность достигнута для всех компонент решения:

$$|\bar{R}_n^i| \leq \epsilon, \quad i = 1, 2, \dots, M.$$

Однако бывает, что физический смысл задачи или иные соображения подсказывают, что оценку погрешности достаточно производить только по одной из компонент решения. Вспомнив, что погрешность решения системы дифференциальных уравнений является вектором размерности M , можно представить ситуации, когда оценка погрешности проводится по некоторой векторной норме погрешности.

Оценка локальной погрешности при решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений также проводится чаще всего покомпонентно, т.е. тем или иным методом оценки локальной погрешности (методом Рунге, или на основе комбинаций формул разных порядков точности, или вложенным методом) вычисляются главные части погрешностей $y^i(x_0 + h) - y_1^i$ для всех компонент решения ($i = 1, 2, \dots, M$). Затем определяется наибольшая из погрешностей, которая и принимается за оценку погрешности системы. Однако за локальную погрешность решения системы уравнений можно принять и иные объекты – локальную погрешность некоторой фиксированной компоненты решения, среднее арифметическое погрешностей отдельных компонент и т.п.

Заметим, что в тестах Заданий всегда особо оговаривается, что принимается за оценку погрешности численного интегрирования системы уравнений.

5. Автоматический выбор шага интегрирования задачи Коши

Интуитивно понятно, что переменных шаг интегрирования позволяет учитывать особенность поведения решения и минимизировать вычислительные затраты при сохранении требуемой точности численного решения. Методами вариационного вычисления показано, что при заданном уровне глобальной погрешности решения вычислительные затраты будут минимальны, если локальная погрешность на каждом шаге будет постоянна. Этот факт является центральной идеей алгоритмов автоматического выбора шага.

Замечание . Погрешность округления в настоящем методе не учитывается.

5.1. Метод удвоения и деления шага пополам

Пусть для получения приближенного решения задачи Коши (1),(2) выбран некоторый метод типа Рунге-Кутта и имеется в распоряжении способ оценки локальной погрешности выбранного метода. Как и ранее, обозначим через e_{n+1} локальную погрешность метода в точке $x_n + h$, а приближенное значение, вычисленное с шагом h — y_{n+1}^h . Пусть наибольшая допустимая локальная погрешность шага интегрирования равна $e > 0$. Тогда если

$$|e_{n+1}| > e, \quad (139)$$

то приближенное значение y_{n+1}^h считается неудовлетворительным по точности и выбирается новое значение шага

$$h^{(1)} = h/2. \quad (140)$$

С этим новым шагом по той же формуле Рунге-Кутта вычисляется новое значение $y_{n+1}^{h^{(1)}}$ в новой точке $x_n + h^{(1)}$. Если оценка локальной погрешности $e_{n+1}^{(1)}$ на новом шаге $h^{(1)}$ опять превосходит заданную наибольшую допустимую локальную погрешность e

$$|e_{n+1}^{(1)}| > e, \quad (141)$$

то шаг снова делится пополам

$$h^{(2)} = h^{(1)}/2. \quad (142)$$

и вычисления повторяются. Так происходит до тех пор, пока локальная погрешность не станет меньше или равна e при какой-то величине шага, которую обозначим h_n :

$$|e_{n+1}| \leq e. \quad (143)$$

Дальнейшее интегрирование уравнения будет производиться из точки $x_{n+1} = x_n + h_n$ с шагом h_{n+1} , который выбирается по следующему правилу. Если локальная погрешность e_{n+1} на шаге $h_n = x_{n+1} - x_n$ удовлетворяет неравенству

$$|e_{n+1}| < \frac{e}{k}, \quad (144)$$

где k — константа, то шаг интегрирования удваивается $h_{n+1} = 2h_n$. Если выполняется неравенство

$$\frac{e}{k} \leq |e_{n+1}| \leq e, \quad (145)$$

то шаг интегрирования не меняется,

$$h_{n+1} = h_n. \quad (146)$$

Константа k полагается равной 2^s , где s — порядок используемой оценки локальной погрешности метода.

Таким образом осуществляется изменение шага интегрирования в зависимости от характера решения: там, где высока точность приближенного решения, шаг возрастает, а там, где заданная точность не достигается, шаг уменьшается. Изложенный выше алгоритм отражает лишь основную идею метода удвоения и деления шага пополам. В хороших программных реализациях этот метод содержит много особенностей, которые делают его более надежным и экономичным. В нижеследующих замечаниях приведены некоторые из этих особенностей.

Замечание 1. Для сокращения числа бесполезных проверок применимости шага интегрирования алгоритм модифицируется следующим образом. Если при интегрировании из точки x_n в точку $x_{n+1} = x_n + h_n$ шаг интегрирования уменьшался хотя бы один раз, то при выборе следующего значения шага интегрирования h_{n+1} удвоение предыдущего шага не происходит, даже если удовлетворяются соотношения (144). Иными словами, если на данном шаге была неудачная попытка применения шага интегрирования, то для следующего шага не допускается увеличение его длины.

Замечание 2. За два шага вперед проверяется точка конца интервала интегрирования с тем, чтобы исправить при необходимости величину шага, чтобы достигнуть конца отрезка интегрирования без слишком резких изменений в величине шага.

Замечание 3. Пользователь должен иметь возможность заказывать время счета по программе. Это можно сделать тремя способами: или программист ставит счетчик числа вычислений правой части уравнения, ограничив число вычислений правой части некоторым параметром, или ставит ограничение на длину шага интегрирования, или ставит ограничения на число шагов интегрирования. Реакция программы на превышение этих параметров оговаривается с заказчиком программы, в роли которого в учебном процессе выступает преподаватель, ведущий занятия.

Замечание 4. При выборе следующего шага число удвоений длины шага может быть ограничено некоторым параметром; обычно не допускают 5-кратного удвоения длины шага.

Замечание 5. Чтобы избежать зацикливаний программы, необходимо проверять, что в условиях машинной арифметики выполняется неравенство

$$x_n + h_n \neq x_n, \quad (147)$$

т.е. что величина h_n не меньше расстояния от x_n до соседнего справа (при $h_n > 0$) или слева (при $h_n < 0$) вещественного числа, которое представлено на используемой ЭВМ. Для этого шаг интегрирования должен удовлетворять условию

$$|h| \geq \max\{s, r\}, \quad (148)$$

где s – наименьшее положительное число, представимое на данной ЭВМ, $t \equiv macheps \cdot |x|$, $macheps$ – машинное эпсилон [7].

Значение, близкое к машинному эпсилон, вычисляется последующему простому алгоритму:

$$\begin{array}{l}
R := 1 \\
\text{пока } (1 + R) > 1 \\
\quad \text{нц} \\
\quad \quad R := R/2 \\
\quad \text{кц} \\
\text{macheps} := R * 2
\end{array} \tag{149}$$

Замечание 6. Для того, чтобы избежать неприятностей, о которых говорилось в Замечании 5, можно ставить ограничения на число делений первоначального шага интегрирования. Например, если ограничить количество делений двадцатью, то допускается максимальное уменьшение шага в 10^6 раз.

Замечание 7. Выбор оптимального самого первого шага интегрирования – трудная задача, если решать ее в полном объеме. Самый простой выход – положить первоначальный шаг равным некоторой части отрезка интегрирования, надеясь на то, что метод удвоения и деления шага пополам довольно быстро выйдет на удовлетворительное значение длины шага.

5.2. Метод выбора максимальной для заданной точности длины шага

Напомним, что минимальные вычислительные затраты при решении задачи Коши (1),(2) методами типа Рунге-Кутта имеют место тогда, когда на всех шагах интегрирования локальная погрешность метода постоянна и равна некоторому e . Пусть решение в точке x_n вычислено и идет проверка удовлетворительности шага h для определения следующей точки интегрирования $x_{n+1} = x_n + h$. С этой целью считается погрешность e_{n+1} (главная часть погрешности, см. соотношение (84)), с которой определяется значение y_{n+1} в точке $x_n + h$, и сравнивается с e . Если

$$|y(x_n, y_n)|h^{s+1} = |e_{n+1}| > e, \tag{150}$$

то значение шага h признается неудовлетворительным и выбирается новый шаг интегрирования h_e из соотношения

$$h_e = ah, \tag{151}$$

где параметр a введен для того, чтобы главная часть локальной погрешности была точно равна e :

$$|y(x_n, y_n)| h_e^{s+1} = e. \quad (152)$$

Из соотношений (150)- (152) легко получаем значение нового шага h_e

$$h_e = \sqrt[s+1]{\frac{e}{|e_{n+1}|}} \cdot h, \quad (153)$$

при этом

$$a = \sqrt[s+1]{\frac{e}{|e_{n+1}|}} < 1. \quad (154)$$

Новым узлом интегрирования будет являться узел $x_{n+1} = x_n + h_e$.

Если локальная погрешность e_{n+1} не превосходит заданного e

$$|e_{n+1}| \leq e, \quad (155)$$

шаг h считается удовлетворительным и в качестве следующего узла интегрирования принимается узел $x_{n+1} = x_n + h$, при этом также определяется шаг h_e по формуле (153), где a будет уже больше единицы, т.е. шаг h_e будет больше шага h . Дальнейшее интегрирование уравнения (1) из точки x_{n+1} начинается с проверки удовлетворительности шага h_e .

К описанному в этом пункте методу выбора шага интегрирования в полной мере относятся Замечания 2,5,7 из предыдущего пункта.

Замечание . При практической реализации параметр a заменяется на параметр

$$a^* = 0,9a.$$

6. Индивидуальные задания по численным методам решения задачи Коши

6.1. О демонстрации работы программ

Во время сдачи преподавателю программы студент на ряде примеров, которые подготавливает самостоятельно, должен показать, что его программа работает в соответствии с заданием. Например, если задача Коши решается

методом Рунге-Кутты третьего порядка, надо показать, что реализован в самом деле метод третьего порядка точности. Для этого достаточно выполнить ряд тестовых примеров – в задачах Коши, в которых решение является полиномом нулевой, первой, второй и третьей степени, должно получаться точное решение, а если решение есть полином более высокой степени, то численное решение имеет погрешность. Если в соответствии с заданием автоматический выбор шага интегрирования реализуется методом удвоения и деления шага пополам, то необходимо подобрать примеры с заранее известной погрешностью и специальным образом задавать точность с тем, чтобы решение получалось в заранее предсказанных точках и т.п.

Построение тестовых примеров не должно требовать большой вычислительной работы. Однако их составление невозможно без глубокого понимания программируемого метода.

Ниже приведен ряд замечаний по разработке иллюстрирующих тестовых примеров. Внимательное их изучение даже в случае, если они непосредственно не относятся к индивидуальному заданию студента, знакомят читающего с основными принципами и идеями, лежащими в основе построения тестовых примеров для решения начальных задач (1)-(2) методами типа Рунге-Кутты.

Замечание о начальной точке интегрирования.

Ниже при составлении тестовых примеров для простоты выкладок полагаем $x_0 = 0$.

Замечание о составлении дифференциального уравнения с заранее известным решением.

Допустим, мы хотим составить уравнение, решение которого есть $y(x) = x^3$. Учитывая, что $y'(x) = 3x^2$, запишем несколько примеров таких уравнений:

$$y' = 3x^2, \quad y' = y - x^2(x - 3), \quad y' = x(y - x^3 + 3x).$$

Замечание о составлении дифференциальной задачи, которая при численном решении дает заранее известную погрешность метода на шаге.

Пример 1.

Пусть программируемый метод Рунге-Кутты второго порядка (22), погрешность на шаге которого имеет вид (23). Предположим, что правая часть уравнения не зависит от y . Тогда в выражении для погрешности (23) остается одно первое слагаемое. Если потребовать, чтобы вторая производная f''_{xx} равнялась константе, то очевидно, что на любом шаге интегрирования погрешность метода будет постоянна. Здесь в качестве тестового примера удобно взять задачу $y' = 12x^2$, $y(0) = 0$, поскольку в этом случае погрешность на шаге (23) имеет наиболее простой вид $j_2 \equiv h^3$.

Пример 2.

Можно подбирать тестовые примеры с наперед известными погрешностями метода на шаге, не используя выражения для погрешности, как это сделано в примере 1.

Пусть программируемый метод четвертого порядка (33). Опять положим, что правая часть исходного уравнения не зависит от y . Тогда согласно (7) непосредственно вычислим погрешность

$$j_4(h) = y(x_0 + h) - y_0 - \frac{h}{8} \left(f(x_0) + 3f\left(x_0 + \frac{h}{3}\right) + 3f\left(x_0 + \frac{2}{3}h\right) + f(x_0 + h) \right), \quad (156)$$

раскладывая точное решение $y(x_0 + h)$ и функцию f в ряд Тейлора в окрестности точки x_0 :

$$j_4(h) = -f^{IV} \frac{h^5}{9 \cdot 6!}. \quad (157)$$

Очевидно, что в качестве простейшего тестового примера удобно взять функцию f с постоянной четвертой производной, например, $f^{IV} = 9 \cdot 6!$. Тогда погрешность на шаге $j_4(h) = -h^5$, а искомая демонстрационная задача Коши имеет вид

$$\begin{cases} y' = \frac{9 \cdot 6!}{24} x^4, \\ y(0) = 0. \end{cases} \quad (158)$$

Замечание о составлении тестового примера, демонстрирующего удвоение шага интегрирования при автоматическом выборе шага методом удвоения и деления шага пополам.

Пусть решается задача Коши методом Рунге-Кутты порядка S и каким-либо методом на каждом шаге оценивается погрешность решения. Тогда если в качестве тестового примера взять задачу Коши, решением которой является полином степени не выше S , то погрешность на каждом шаге будет равна нулю (численный метод будет давать точное решение) и, следовательно, шаг интегрирования будет постоянно удваиваться.

К примеру, пусть начальный шаг интегрирования задается равным 0.005. Тогда последовательность точек, в которых будет выдаваться решение, такова:

$$x_0 = 0, x_1 = 0.005, x_2 = 0.015, x_3 = 0.035, x_4 = 0.075, x_5 = 0.155 \text{ и так далее.}$$

Замечание о составлении тестового примера, демонстрирующего уменьшение шага интегрирования в два раза при автоматическом выборе шага методом удвоения и деления шага пополам.

Пусть программируется метод Рунге-Кутты второго порядка (22). Из Примера 1 о составлении дифференциальной задачи с заранее известной погрешностью метода на шаге следует, что при интегрировании уравнения $y' = 12x^2$ от начального условия $y(0) = 0$ погрешность метода на любом шаге равна h^3 . Пусть начальный шаг интегрирования H , а требуемая точность решения $\left(H/2^k\right)^3$, где k – некоторое целое число. Тогда очевидно, что при вычислении первой точки первоначальный шаг будет k раз поделен на два, а далее расчетные точки будут следовать с постоянным шагом, равным $H/2^k$:

$$x_0 = 0, x_1 = H/2^k, x_2 = 2 \cdot (H/2^k), x_3 = 3 \cdot (H/2^k) \text{ и так далее.}$$

Приведенные выше рассуждения делались в предположении отсутствия погрешностей округления. Для того, чтобы они не повлияли на предполагаемую последовательность точек вычисления решения, рекомендуем значение точности брать чуть меньше, чем $\left(H/2^k\right)^3$, например $\left(H/2^k\right)^3\left(1-\left(H/2^k\right)^3\right)$.

Замечание о тестировании, связанном с глобальной погрешностью методов типа Рунге-Кутта.

При тестировании этого рода используют тот факт, что глобальная погрешность методов типа Рунге-Кутта равна сумме погрешностей на отдельных шагах интегрирования, если правая часть исходного уравнения не зависит от $y(x)$, а является только функцией аргумента x . В этом случае подбирается задача Коши (см. Замечание о составлении дифференциальной задачи, которая при численном решении дает заранее известную погрешность метода на шаге) с заранее известными погрешностями на шаге и проводится их непосредственное суммирование.

6.2. Об ошибках, допущенных при задании входных параметров

Одним из обязательных требований, предъявляемых к разрабатываемым подпрограммам, является их безаварийная работа. В частности, при любых входных данных выполнение подпрограммы должно успешно завершиться. Успешное завершение работы программы при неправильно заданных входных параметрах – это завершение работы с соответствующими значениями кода завершения. Пусть, к примеру, входными параметрами являются:

N – число точек равномерного разбиения для определения первоначального шага интегрирования;

A, B – начало и конец интервала интегрирования;

C – точка, где заданы начальные условия (либо это точка A , либо точка B);

y_C – начальное значение решения в точке C ;

m – число верных знаков решения,

а значение кода завершения подпрограммы $ICOD = 3$ соответствует ошибке входных данных. Тогда если $ICOD = 3$, то допущена одна из следующих ошибок (на самом деле перечень ошибок для данного примера можно существенно расширить):

$N \leq 0; A \geq B; (C - A)(C - B) \neq 0; m < 1; m > m_max$, где значение m_max связано с размером мантиссы у вашей ЭВМ.

Составление набора условий для своего индивидуального задания, при котором входные данные будут считаться ошибочными, выполняется студентом самостоятельно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Самарский А.А. Численные методы / А.А.Самарский, А.В.Гулин. - М.: Наука, 1989. – 368 с.
2. Ляшко И.И. Методы вычислений / И.И.Ляшко, В.Л.Макаров. – Киев: Вища школа, 1977. – 408 с.
3. Бабушка И. Численные процессы решения дифференциальных уравнений. / И.Бабушка, Э.Витасек, М.Прагер.– М.: Мир, 1969. – 368 с.
4. Марчук Г.И. Повышение точности решений разностных схем. / Г.И.Марчук, В.В.Шайдуров.– М.: Наука, 1979. – 320 с.
5. Крылов В.И. Начала теории вычислительных методов. Дифференциальные уравнения. / В.И.Крылов, В.В.Бобков,– Минск: Наука и техника, 1982. – 286 с.
6. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла, Дж. Уамла. – М.: Мир, 1979. – 312 с.
7. Арушанян О.Б. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений на Фортране. / О.Б.Арушанян, С.Ф.Залеткин. – М.: Изд-во МГУ, 1990. – 336 с.

Составители: Корзунина Вера Васильевна, Шабунина Зоя Александровна.
Редактор Тихомирова О.А.