

Олемской И.В.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ
ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ ПРАКТИКУМУ.
(ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ СОДУ)

1 Численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений

1 Постановка задачи

В области $D = \{a \leq x \leq b, |y^i - y_0^i| \leq b_i\} \in R^{n+1}$ определена функция

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

Необходимо найти решение

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (1)$$

удовлетворяющее начальному условию

$$y(x_0) = y_0. \quad (2)$$

Используя метод последовательных приближений Пикара, можно получить точное решение $y(x)$ задачи Коши (1),(2) как предел последовательности

$$y_0(x), y_1(x), \dots, y_k(x), \dots, \quad (3)$$

где

$$y_k(x) = y_0(x) + \int_{x_0}^x f(x, y_{k-1}(x)) dx, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Для сходимости этой последовательности необходимо выполнение условий:

- $f(x, y)$ непрерывна в D ;
- $f(x, y)$ удовлетворяет условию Липшица по аргументу y

$$\|f(x, \hat{y}) - f(x, \bar{y})\| \leq L \|\hat{y} - \bar{y}\| \quad (5)$$

для всех $x \in [a, b]$ и всех компонент векторов \hat{y} и \bar{y} .

При этих предположениях $y_k(x)$ равномерно сходится к точному решению задачи Коши, поэтому для достаточно больших k отклонение $\|y(x) - y_k(x)\|$ не превышает заданной величины. Таким образом, в качестве искомого решения можно взять $y_k(x)$. Практическая реализация этого метода затруднена по причине того, что для сложной функции $f(x, y)$ интеграл не берется в квадратурах и решение нельзя получить в аналитическом виде. Константа Липшица L играет важную роль в численных методах.

Обсуждаемые ниже численные методы известны как дискретные, т.е. такие методы, посредством которых вычисляется последовательность приближений $y_i \approx y(x_i)$ на множестве точек $x_{i+1} = x_i + h_i$, $i = 0, 1, \dots, N-1$; $x_N = b$, $h_i > 0$ — шаг сетки. В большинстве рассматриваемых методов будем считать $h_i = h$, $h = \text{const} > 0$, $i = 1, 2, \dots$.

Для облегчения изложения будем в дальнейшем рассматривать методы для скалярного случая (1) $n = 1$ и отдельно оговаривать их распространение на случай систем.

2 Одношаговые методы

Одношаговые методы - методы, которые последовательно дают приближения y_i к значениям точного решения $y(x_i)$ в каждом узле x_i сетки на основе известного приближения y_{i-1} к решению в точке x_{i-1} .

В общем виде их можно представить :

$$y_{i+1} = F(f, x_{i+1}, x_i, y_{i+1}, y_i). \quad (6)$$

Одношаговые методы вида (6) в правой части содержат искомое значение y_{i+1} . Это позволяет ввести еще одну характеристику классифицирующую численный метод. Наличие в правой части представления метода в виде (6) зависимости от искомой функции y_{i+1} делает его неявным. Отсутствие этой зависимости — явным вида:

$$y_{i+1} = F(f, x_{i+1}, x_i, y_i). \quad (7)$$

3 Методы разложения в ряд Тейлора

Предположим, что правая часть $f(x, y)$ дифференциального уравнения (1) имеет непрерывные частные производные до порядка s . Тогда исконое решение $y(x)$ имеет непрерывные производные до $s + 1$ -го порядка включительно. Точное значение решения в узле x_{i+1} , если известно точное значение решения в точке x_i , запишем по формуле Тейлора:

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \dots + \frac{h^s}{s!}y^{(s)}(x_i) + \frac{h^{s+1}}{(s+1)!}y^{(s+1)}(\xi) = \\ &= y(x_i) + h\Delta(x_i, y(x_i), h), \quad h = x_{i+1} - x_i, \quad \xi \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned} \quad (8)$$

Если теперь этот ряд оборвать, ограничиться только первыми $s + 1$ членами и заменить точное значение $y(x_i)$ его приближением y_i , то с использованием (1) можно получить следующую формулу:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y(x_i) + h\varphi(x_i, y(x_i), h) = \\ &= y_i + hy'_i + \frac{h^2}{2}y''_i + \dots + \frac{h^s}{s!}y^{(s)}_i, \end{aligned} \quad (9)$$

для нахождения приближенного решения. Производные, входящие в правую часть (9), могут быть фактически найдены:

$$\begin{aligned} y'_i &= f(x_i, y_i), \\ y''_i &= \{f'_x + f \cdot f'_y\}|_{x_i}, \\ y'''_i &= \{f''_{xx} + 2f \cdot f''_{xy} + f^2 \cdot f''_{yy} + (f'_x + f \cdot f'_y)f'_y\}|_{x_i}, \\ &\dots \end{aligned} \quad (10)$$

Так для $s = 1$ и $s = 2$ получим расчетные схемы:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) \quad (\text{явный метод Эйлера}), \quad (11)$$

$$y_{i+1} = y_i + h \left[f(x_i, y_i) + \frac{h}{2}(f'_x(x_i, y_i) + f(x_i, y_i) \cdot f'_y(x_i, y_i)) \right], \quad (12)$$

по которым можно последовательно получать приближенное решение $\{y_i\}$. Такие формулы не требуют вычисления дополнительных начальных условий и позволяют легко менять шаг интегрирования. Недостатком расчетных схем метода разложения в ряд Тейлора является то, что их практическое применение ограничено лишь задачами, для которых легко вычисляются полные производные высшего порядка.

4 Явные методы Рунге–Кутты

Рунге, Хойн и Кутта предложили подход, основанный на построении φ , которая максимально близка к Δ и не содержит производных от функции $f(x, y)$. Этот процесс "подгонки" рядов Тейлора и называется принципом или методом Рунге–Кутты. Кутта дал его общую схему.

Определение 1. Пусть m — целое положительное число («число стадий», или «этапов») и $a_{21}, a_{31}, \dots, a_{m1}, a_{m2}, \dots, a_{m,m-1}, b_1, \dots, b_m, c_1, \dots, c_m$ — вещественные коэффициенты. Тогда метод

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x_0, y(x_0)), \quad k_j(h) = hf(x_0 + c_j h, y(x_0) + \sum_{\nu=1}^{j-1} a_{j\nu} k_\nu(h)), \quad j = 2, \dots, m, \\ y(x_0 + h) &\approx z_1 = y(x_0) + \sum_{i=1}^m b_i k_i(h), \end{aligned} \quad (13)$$

называется m -этапным явным методом Рунге–Кутты (ЯМРК) для задачи Коши (1), (2).

Любой ЯМРК характеризуется числом этапов (дает представление о требуемых вычислительных затратах) и порядком.

Определение 2. ЯМРК (13) имеет *порядок q* (*порядок точности на шаге*), если для достаточно гладких задач (1), (2)

$$\|y(x_0 + h) - z_1\| \leq Ch^{q+1}. \quad (14)$$

Иначе говоря, если ряды Тейлора для точного решения $y(x_0 + h)$ и полученного приближения к нему z_1 совпадают до члена h^q включительно

В настоящее время для представления одношаговых методов типа Рунге-Кутты (13) используется их табличный эквивалент. Символически m -этапный ЯМРК представляется в виде

$$\begin{array}{c|cccccc} 0 & & & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & \\ c_m & a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{m,m-1} & & \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_{m-1} & b_m & \end{array},$$

где на свободных местах стоят нули.

ЯМРК идеально приспособлен для практического расчета: он не требует вычисления дополнительных начальных значений и позволяет легко менять шаг интегрирования. Причем в отличие от метода Тейлора здесь не требуется вычисления полных производных точного решения. И приращение ищется в виде линейной комбинации вычислений правой части исходного дифференциального уравнения на шаге интегрирования. Для изложения алгоритма построения m -этапного ЯМРК q -порядка введем в рассмотрение функцию

$$\Psi(h) = y(x + h) - y(x) - \sum_{i=1}^m b_i k_i(h), \quad (15)$$

которую в дальнейшем будем называть **методической (локальной) погрешностью одношагового метода**.

Предполагаем, что в рассматриваемой области $f(x, y)$ имеет непрерывные частные производные до некоторого порядка q . Тогда искомое решение будет иметь непрерывные производные до порядка $q + 1$. Выбор постоянных (параметров метода) b_i, c_i, a_{ij} производится так, чтобы разложение методической погрешности (15) по степеням h в ряд Тейлора

$$\Psi(h) = \sum_{i=0}^q \frac{\Psi^{(i)}(0)}{i!} h^i + \frac{\Psi^{(q+1)}(\theta h)}{(q+1)!} h^{q+1}, \quad \text{где } 0 < \theta < 1, \quad (16)$$

начиналось со степени $q + 1$ при произвольной функции $f(x, y)$ и произвольном шаге h , т.е.

$$\Psi(h) = \frac{\Psi^{(q+1)}(\theta h)}{(q+1)!} h^{q+1}, \quad \text{где } 0 < \theta < 1. \quad (17)$$

А это возможно тогда и только тогда, когда параметры метода b_i, c_i, a_{ij} обеспечивают выполнение равенств

$$\Psi'(0) = \Psi''(0) = \dots = \Psi^{(q)}(0) = 0. \quad (18)$$

Причем существует некоторая гладкая функция $f_0(x, y)$, для которой

$$\Psi^{(q+1)}(0) \neq 0, \quad (19)$$

Условие $\Psi(0) = 0$ выполняется всегда. Условия же $\Psi^{(i)}(0) = 0, i = 1, \dots, q$ означают выполнение равенств

$$y^{(i)} = b_1 k_1^{(i)}(0) + b_2 k_2^{(i)}(0) + \dots + b_m k_m^{(i)}(0). \quad (20)$$

Производная $y^{(i)}$ всегда может быть вычислена указанным ранее способом (10). Проблема заключается в вычислении производных $k_j^{(i)}(0)$. Для $k_j(h)$ будем иметь:

$$\begin{aligned}
k_1'(h) &= f(x, y), \quad k_1^{(i)}(h) \equiv 0, \quad i \geq 2; \quad \xi_j(h) = x + c_j h; \quad \eta_j(h) = y + \sum_{s=1}^{j-1} a_{js} k_s(h); \\
k_j'(h) &= f(\xi_j, \eta_j) + h \left[c_j \frac{\partial f(\xi_j, \eta_j)}{\partial x} + \eta_j'(h) \frac{\partial f(\xi_j, \eta_j)}{\partial y} \right] = \\
&= f(\xi_j, \eta_j) + h \left[c_j \frac{\partial f(\xi_j, \eta_j)}{\partial x} + \sum_{s=1}^{j-1} a_{js} k_s'(h) \frac{\partial f(\xi_j, \eta_j)}{\partial y} \right], \quad j = 2, \dots, m, \\
k_j''(h) &= 2 \left[c_j \frac{\partial f(\xi_j, \eta_j)}{\partial x} + \eta_j'(h) \frac{\partial f(\xi_j, \eta_j)}{\partial y} \right] + \\
&+ h \left\{ c_j^2 \frac{\partial^2 f(\xi_j, \eta_j)}{\partial x^2} + 2c_j \sum_{s=1}^{j-1} a_{js} k_s'(h) \frac{\partial^2 f(\xi_j, \eta_j)}{\partial x \partial y} + \right. \\
&+ c_j \left[\sum_{s=1}^{j-1} a_{js} k_s'(h) \right]^2 \frac{\partial^2 f(\xi_j, \eta_j)}{\partial y^2} + \sum_{s=1}^{j-1} a_{js} k_s''(h) \frac{\partial f(\xi_j, \eta_j)}{\partial y} \left. \right\}, \\
k_j'''(h) &= 3 \left\{ c_j^2 \frac{\partial^2 f(\xi_j, \eta_j)}{\partial x^2} + 2c_j \sum_{s=1}^{j-1} a_{js} k_s'(h) \frac{\partial^2 f(\xi_j, \eta_j)}{\partial x \partial y} + \right. \\
&+ c_j \left[\sum_{s=1}^{j-1} a_{js} k_s'(h) \right]^2 \frac{\partial^2 f(\xi_j, \eta_j)}{\partial y^2} + \sum_{s=1}^{j-1} a_{js} k_s''(h) \frac{\partial f(\xi_j, \eta_j)}{\partial y} \left. \right\} + h \{ \dots \}.
\end{aligned}$$

Фиксируя число этапов m , в рамках определенной структуры ЯМРК (13) мы фактически фиксируем количество параметров метода b_i, c_i, a_{ij} , подлежащих определению. Задавая же порядок q метода, с учетом требования выполнения равенств (18) формируем систему нелинейных алгебраических уравнений связывающую параметры m -этапного ЯМРК q -го порядка — *условия порядка*. Причем к ограничениям, вызванным требованиями выполнения равенств (18), иногда добавляются и другие, сформированные на базе некоторых иных критериев: максимальный порядок точности, минимальный объем оперативной памяти, уменьшение среднего числа вычислений правой части, фиксированные узлы и др. Любое частное решение этой системы (условий порядка) дает расчетную схему m -этапного ЯМРК q -го порядка.

Пример построения двухэтапного метода Рунге-Кутты. Количество вычислений правой части на шаге интегрирования равно двум $m = 2$. Метод интегрирования имеет вид:

$$y(x+h) \approx y(x) + b_1 k_1(h) + b_2 k_2(h), \quad (21)$$

$$\text{где } k_1(h) = hf(x, y(x)),$$

$$k_2(h) = hf(x + c_2 h, y(x) + a_{21} k_1(h)).$$

Методическая (локальная) погрешность определяется равенством

$$\Psi(h) = y(x+h) - y(x) - b_1 k_1(h) - b_2 k_2(h). \quad (22)$$

Вычисляем производные функции $\Psi(h)$, введя обозначения:

$$\hat{x} = x + c_2 h, \quad \hat{y} = y(x) + a_{21} k_1(h) = y(x) + a_{21} h f(x, y(x)).$$

Так первая и вторая производные имеют вид:

$$\Psi'(h) = y'(x+h) - b_1 f(x, y(x)) - b_2 f(\hat{x}, \hat{y}) - b_2 h \{ c_2 f_x(\hat{x}, \hat{y}) + a_{21} f_y(\hat{x}, \hat{y}) f(x, y(x)) \}.$$

$$\Psi''(h) = y''(x+h) - 2b_2 [c_2 f_{xx}(\hat{x}, \hat{y}) + a_{21} f_{xy}(\hat{x}, \hat{y}) f(x, y(x))] - \quad (23)$$

$$-b_2 h \{ c_2^2 f_{xx}(\hat{x}, \hat{y}) + 2c_2 a_{21} f_{xy}(\hat{x}, \hat{y}) f(x, y(x)) + a_{21}^2 f_{yy}(\hat{x}, \hat{y}) [f(x, y(x))]^2 \}. \quad (24)$$

А третью выпишем в компактной форме, так как нас в конечном итоге интересуют только члены разложения, не содержащие h :

$$\begin{aligned}
\Psi'''(h) &= y'''(x+h) - 3b_2 \{ c_2^2 f_{xx}(\hat{x}, \hat{y}) + \\
&+ 2c_2 a_{21} f_{xy}(\hat{x}, \hat{y}) f(x, y(x)) + a_{21}^2 f_{yy}(\hat{x}, \hat{y}) [f(x, y(x))]^2 \} + O(h).
\end{aligned} \quad (25)$$

Используя исходное дифференциальное уравнение (1), выпишем представление полных производных (10) и внесем их в выражения для производных функции погрешности метода $\Psi(h)$. Для того, чтобы производные функции $\Psi(h)$ при значении $h = 0$:

$$\Psi'(0) = (1 - b_1 - b_2)f(x, y). \quad (26)$$

$$\Psi''(0) = (1 - 2c_2b_2)f'_x(x, y(x)) + (1 - 2a_{21}b_2)f'_y(x, y(x))f(x, y(x)), \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \Psi'''(0) = & (1 - 3c_2^2b_2)f_{xx}(x, y(x)) + (2 - 6c_2a_{21}b_2)f_xy(x, y(x))f(x, y(x)) + \\ & + (1 - 3c_2^2b_2)f_{yy}(x, y(x))[f(x, y(x))]^2 + f_y(x, y(x))y''(x). \end{aligned} \quad (28)$$

обращались в нуль, необходимо и достаточно, чтобы параметры метода удовлетворяли системе уравнений:

$$b_1 + b_2 = 1, \quad (29)$$

$$c_2b_2 = \frac{1}{2}, \quad (30)$$

$$a_{21}b_2 = \frac{1}{2}. \quad (31)$$

Причем как бы ни выбрали параметры b_i, c_i, a_{ij} , третью производную обратить в нуль для произвольной правой части $f(x, y(x))$ нельзя. Действительно, последнее слагаемое в представлении $\Psi'''(0)$ ни от одного из параметров метода b_i, c_i, a_{ij} не зависит. И можно подобрать такую функцию $f(x, y(x))$, для которой $\Psi'''(0) \neq 0$. Приведем в качестве примера дифференциальное уравнение вида $y' = y$. Для него $\Psi'''(0) = y$. Этот факт и доказывает, что не существует двухэтапного метода Рунге-Кутты третьего порядка точности для произвольных правых частей дифференциального уравнения. Разложение погрешности метода имеет вид:

$$\rho_2 = \Psi(h) = \frac{\Psi^{(3)}(0)}{6}h^3 + o(h^3), \quad (32)$$

Решения системы алгебраических уравнений (29)-(31) образуют однопараметрическое семейство. Из последних двух уравнений системы (30), (31) следует, что $c_2 \neq 0$, $a_{21} \neq 0$, $b_2 \neq 0$. Принимая c_2 за свободный параметр, получим

$$a_{21} = c_2, \quad b_2 = \frac{1}{2c_2}, \quad b_1 = 1 - \frac{1}{2c_2}, \quad c_2 \neq 0. \quad (33)$$

Обычно выбирают такие коэффициенты, которые дают удобные для вычислений расчетные формулы, и такие, которые обеспечивают подавление того или иного члена в главном члене погрешности.

Так, например, полагая $c_2 = 1$, получим двухэтапную расчетную схему ЯМРК второго порядка (Метод Хойна):

$$y(x+h) \approx y(x) + \frac{1}{2}[k_1(h) + k_2(h)]. \quad (34)$$

где

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x, y(x)), \\ k_2(h) &= hf(x+h, y(x) + k_1(h)). \end{aligned}$$

Методическая погрешность расчетной схемы (34) имеет вид

$$\begin{aligned} \rho_2 = \frac{h^3}{6} \left[-\frac{1}{2} (f_{xx}(x, y(x)) + 2f_{xy}(x, y(x))f(x, y(x)) + f_{yy}(x, y(x))[f(x, y(x))]^2) + \right. \\ \left. + f_y(x, y(x))(f_x(x, y(x)) + f(x, y(x))f_y(x, y(x))) \right] + o(h^3). \end{aligned} \quad (35)$$

Если правая часть исходного дифференциального уравнения не зависит от y , то расчетная формула (34) переходит в квадратурную формулу трапеций.

Ниже приведем несколько наиболее употребительных расчетных схем интегрирования третьего и четвертого порядка точности.

Расчетные схемы третьего порядка трехэтапного ЯМРК:

Первая имеет вид:

$$y(x+h) \approx y(x) + \frac{1}{6}[k_1(h) + 4k_2(h) + k_3(h)], \quad (36)$$

где

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x, y(x)), \\ k_2(k) &= hf\left(x + \frac{1}{2}h, y(x) + \frac{1}{2}k_1(h)\right), \\ k_3(k) &= hf\left(x + h, y(x) - k_1(h) + 2k_2(h)\right). \end{aligned}$$

Вторая :

$$y(x+h) \approx y(x) + \frac{1}{4}[k_1(h) + 3k_3(h)], \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x, y(x)), \\ k_2(k) &= hf\left(x + \frac{1}{3}h, y(x) + \frac{1}{3}k_1(h)\right), \\ k_3(k) &= hf\left(x + \frac{2}{3}h, y(x) + \frac{2}{3}k_2(h)\right). \end{aligned}$$

Погрешность формулы (36), (37) , как и для всех формул Рунге-Кутты третьего порядка точности, представляется в следующей форме:

$$\rho_3 = \frac{\Psi^{(4)}(0)}{24}h^4 + o(h^4). \quad (38)$$

Четырехэтапные методы Рунге-Кутты четвертого порядка.

Правило одной шестой(Классический метод Рунге-Кутты)

$$y(x+h) \approx y(x) + \frac{1}{6}[k_1(h) + 2k_2(h) + 2k_3(h) + k_4(h)], \quad (39)$$

где

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x, y(x)), \\ k_2(k) &= hf\left(x + \frac{1}{2}h, y(x) + \frac{1}{2}k_1(h)\right), \\ k_3(k) &= hf\left(x + \frac{1}{2}h, y(x) + \frac{1}{2}k_2(h)\right), \\ k_4(k) &= hf\left(x + h, y(x) + k_3(h)\right). \end{aligned}$$

Расчетная формула Гилла

$$y(x+h) \approx y(x) + \frac{1}{6}k_1(h) + \frac{1}{3}\left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)k_2(h) + \frac{1}{3}\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)k_3(h) + \frac{1}{6}k_4(h), \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x, y(x)), \\ k_2(k) &= hf\left(x + \frac{1}{2}h, y(x) + \frac{1}{2}k_1(h)\right), \\ k_3(k) &= hf\left(x + \frac{1}{2}h, y(x) + \frac{1}{2}(\sqrt{2}-1)k_1(h) + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)k_2(h)\right), \\ k_4(k) &= hf\left(x + h, y(x) - \frac{1}{\sqrt{2}}k_2(h) + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)k_3(h)\right). \end{aligned}$$

Погрешность формулы (39), (40) , как и для всех формул Рунге-Кутты четвертого порядка точности, представляется в следующей форме:

$$\rho_4 = \frac{\Psi^{(5)}(0)}{120}h^5 + o(h^5). \quad (41)$$

Сходимость явных одношаговых методов.

Классификация погрешностей.:

Требуется найти функцию $y(x)$, которая является решением дифференциального уравнения (1) и принимает в точке $x_0 = a$ некоторое определенное значение $y(x_0) = y_0$.

- В случае, если начальное условие $y(x_0)$ вычислено(задано) с погрешностью, то вместо задачи (1),(2), решается задача:

$$\frac{dy_0}{dx} = f(x, y_0(x)), \quad x \in [a, b], \quad (42)$$

$$y_0(x_0) = \bar{y}_0. \quad (43)$$

с измененными начальными условиями

$$y_0 - \bar{y}_0 = R_0 \neq 0. \quad (44)$$

Решение задачи (42),(43) зависит от \bar{y}_0 и не совпадает с решением $y(x)$ исходной задачи (1),(2).

Разность

$$\xi_i = y(x_i) - y_0(x_i) \quad (45)$$

называется неустранимой погрешностью решения $y_0(x)$.

- Разность между значением решения $y_0(x_i)$ задачи (42),(43) и его приближенным значением y_i , полученным по формуле

$$y_i = F(f; h; x_{i-1}; y_{i-1}) \quad (46)$$

одношагового метода,

$$\varepsilon_i = y_0(x_i) - y_i \quad (47)$$

называется погрешностью метода, или глобальной погрешностью метода.

Но вследствие ошибок округления и приближенного вычисления правой части $f(x, y)$ дифференциального уравнения вычисления значений y_i по формуле (46) выполняются неточно. Фактически найденные значения \hat{y}_i удовлетворяют не соотношению (46), а условию

$$F(f; h; x_{i-1}; \hat{y}_{i-1}) - \hat{y}_i = \delta_i \quad (48)$$

Невязка δ_i называется погрешностью округления на i -м шаге.

- Разность между точным решением $y(x_i)$ задачи (1),(2) и приближенным фактически найденным значением \hat{y}_i

$$R_i = y(x_i) - \hat{y}_i \quad (49)$$

называется полной погрешностью приближенного решения

- Величина

$$\eta_i = y_i - \hat{y}_i \quad (50)$$

называется вычислительной погрешностью.

- Из соотношений (45),(46), (49),(50) следует, что

$$R_i = \xi_i + \varepsilon_i + \eta_i \quad (51)$$

полная погрешность приближенного решения равна сумме неустранимой погрешности, погрешности метода и вычислительной погрешности.

Мажорантная оценка полной погрешности

Мажорантная оценка полной погрешности приближенного решения задачи (1) , (2) :

$$|R_i| \leq e^{LX} \left(|R_0| + \sum_{j=1}^i (|\rho_j| + |\delta_j|) \right), \quad (52)$$

где $L = \sup \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right|$.

Учитывая оценку для локальной погрешности метода s -го порядка

$$|\rho_j| = O(h^{s+1}) \leq C|x_j - x_{j-1}|^{s+1}, \quad (53)$$

и полагая

$$\delta = \max_{1 \leq j \leq i} |\delta_j|, \quad h = \max_{1 \leq j \leq i} |x_j - x_{j-1}|, \quad (54)$$

имеем

$$|R_i| \leq e^{LX} (|R_0| + CXh^s + i\delta). \quad (55)$$

Для систем обыкновенных дифференциальных уравнений мажорантная оценка полной погрешности одношагового метода будет иметь вид:

$$\|R_i\| \leq e^{nLX} (\|R_0\| + CXh^s + i\delta), \quad (56)$$

Из (55) и (56) следует, что приближенное решение задачи Коши, полученное с использованием одношагового метода порядка точности s , сходится к точному решению задачи при $h \rightarrow 0$, если

$$|R_0| \rightarrow 0 \quad (\|R_0\| \rightarrow 0); \quad i\delta \rightarrow 0. \quad (57)$$

Рассмотрим смысл каждого из трех слагаемых в (55), (56). Первое слагаемое - погрешность неустранимая. Она распространяется на все узлы. Ее вклад в полную погрешность метода не превосходит $|R_0| e^{LX}$.

Второй член получается за счет того, что находится не точное решение задачи, а приближенное к нему по формуле одношагового метода. Методическая погрешность имеет порядок h^s .

Третий член получается за счет ошибок округления. Скорость возрастания вычислительной погрешности не превосходит $e^{LX}\delta/h$. Если величина δ ограничена снизу; $0 < \delta_0 \leq \delta$, а в вычислительной практике так и бывает, и при этом длина шага h слишком мала, а значит число шагов очень велико, то вычислительная погрешность может достигать больших значений.

Погрешность метода может быть сделана сколь угодно малой за счет уменьшения шага. Вычислительная погрешность может быть снижена за счет увеличения разрядной сетки машины (эти возможности ограничены.) Неустранимую погрешность можно уменьшить только за счет более точного определения начальных условий. Правильная организация вычислительного процесса - баланс между всеми видами погрешности: требуемая точность решения задачи, точность задания начальных условий, порядок численного метода, величина шага интегрирования, используемая длина разрядной сетки.

Отдельные составляющие, входящие в полную погрешность R_i , могут давать отклонения от точного решения в разные стороны. Поэтому оценки (55), (56) являются завышенными. На практике эти оценки не используются для определения точности окончательного результата.

Асимптотическая оценка погрешности метода.

Пусть правая часть $f(x, y)$ исходного дифференциального уравнения имеет непрерывные частные производные до порядка $s+2$. Для получения приближения на шаге интегрирования используем одношаговый метод порядка точности s . Тогда для локальной методической погрешности справедливо представление:

$$y(x_{i+1}) - y_{i+1} = \Phi(x_i, y_i)h^{s+1} + O(h^{s+2}), \quad (58)$$

где

$$\Phi(x_i, y_i) = \frac{1}{(s+1)!} \Psi^{(s+1)}(0) \Big|_{(x_i, y_i)}.$$

Будем считать, что погрешности: начальных условий $R_0 = 0$ и округлений $\delta_i = 0$. Тогда для глобальной погрешности метода справедливо асимптотическое представление

$$\varepsilon_i = z(x_i)h^s + O(h^{s+1}), \quad (59)$$

где

$$z(x_i) = \int_{x_0}^{x_i} \Phi(\xi, y(\xi)) e^{\int_{\xi}^{x_i} \frac{\partial f}{\partial y}(\tau, y(\tau)) d\tau} d\xi.$$

Первое слагаемое в (59)

$$z(x_i)h^s, \quad (60)$$

называется главным членом погрешности метода. При достаточно малых h для погрешности метода справедливо представление

$$\varepsilon_i \approx z(x_i)h^s. \quad (61)$$

Главный член (60) погрешности метода хорошо отражает полную погрешность R_i приближенного решения в том случае, если члены порядка $O(h^{s+1})$, входящие в (59), наряду с вычислительной погрешностью η_i и неустранимой ξ_i , были малы по сравнению с главным членом. Формально эти требования можно записать в виде:

$$R_0 = O(h^{s+1}), \quad \delta = O(h^{s+2}). \quad (62)$$

В предположении выполнения условий (62) при $h \rightarrow 0$ для полной погрешности приближенного решения справедливо асимптотическое разложение :

$$R_i = z(x_i)h^s + O(h^{s+1}). \quad (63)$$

При достаточно малых h можно пренебречь членом $O(h^{s+1})$. Тогда для полной погрешности справедливо представление:

$$R_i \approx z(x_i)h^s. \quad (64)$$

Практическая реализация явных одношаговых методов типа Рунге-Кутты решения задачи Коши

Полагаем, что в нашем вычислительном процессе погрешностью округления и неустранимой погрешностью можно пренебречь.

Оценки погрешностей необходимы, с одной стороны, чтобы обеспечить длину шага h , достаточно малую для достижения требуемой точности вычисляемых результатов, а с другой – чтобы гарантировать достаточно большую длину шага во избежание бесполезной вычислительной работы.

Метод Рунге оценки полной погрешности.

Полагаем, что в точке x_i по m -этапному методу (13)) s -ого порядка точности с постоянным шагом h вычислено приближенное решение \bar{y}_i исходной задачи Коши. С учетом (64) справедливо равенство:

$$y(x_i) - \bar{y}_i \approx z(x_i)h^s. \quad (65)$$

Используя ту же расчетную формулу с шагом $\frac{h}{2}$, вычислим в той же точке x_i другое значение решения \tilde{y}_i . Для этого потребуется в два раза больше шагов и погрешность приближенного решения в этом случае может быть представлена

$$y(x_i) - \tilde{y}_i \approx z(x_i) \left(\frac{h}{2} \right)^s. \quad (66)$$

Исключим из (65), (66) точное значение решения $y(x_i)$. Правило Рунге, оценки глобальной погрешности может быть записано следующим образом:

$$\bar{R}_i = y(x_i) - \bar{y}_i \approx \frac{(\tilde{y}_i - \bar{y}_i)}{(1 - 2^{-s})}. \quad (67)$$

$$\tilde{R}_i = y(x_i) - \tilde{y}_i \approx \frac{(\tilde{y}_i - \bar{y}_i)}{(2^s - 1)} \quad (68)$$

В качестве решения в точке x_i примем значение \tilde{y}_i как более точное по сравнению с \bar{y}_i . Для него имеем оценку погрешности (68). Эта величина может быть как больше, так и меньше некоторого значения ε , являющегося **наперед заданной допустимой погрешностью**.

Если $|\tilde{R}_N| \leq \varepsilon$, то заданная точность приближенного решения достигается. Полученное приближенное решение можно уточнить, прибавив к нему величину главного члена погрешности, т.е. положив

$$y(x_i) \approx y_i = \bar{y}_i + \bar{R}_i \quad (69)$$

или

$$y(x_i) \approx y_i = \tilde{y}_i + \tilde{R}_i. \quad (70)$$

При этом

$$y(x_i) - y_i = O(h^{s+1}). \quad (71)$$

Если $|\tilde{R}_i| > \varepsilon$, то заданная точность приближенного решения не достигается.

Если же точность достигается, естественно поставить такой вопрос: можно ли увеличить длину шага интегрирования для того, чтобы уменьшить объем вычислительной работы и одновременно с этим сохранить заданную точность ?

В обоих случаях такую величину шага h_ε можно определить :

$$h_\varepsilon \approx \frac{h}{2} \sqrt[s]{\frac{(2^s - 1)\varepsilon}{|\tilde{y}_i - \bar{y}_i|}}. \quad (72)$$

Методы оценки локальной погрешности. Метод Рунге.

Полагаем, что в точке x_j известно решение $y(x_j)$. Из точки x_j выполним один шаг h с использованием m - этапного одношагового метода s - ого порядка точности и вычислим приближенное решение $\tilde{y}_{j+1,h}$ исходной задачи Коши. Согласно (58) для локальной погрешности справедливо представление:

$$y(x_j + h) - \tilde{y}_{j+1,h} \approx \Phi(x_j, y_j) h^{s+1}. \quad (73)$$

Из точки x_j , используя ту же расчетную формулу, сделаем подряд два шага, каждый величиной $\frac{h}{2}$. Сделав такой шаг первый раз, получим приближение $\tilde{y}_{j+\frac{1}{2}, \frac{h}{2}}$ к решению в точке $x_j + \frac{h}{2}$. Для локальной погрешности справедливо представление:

$$y(x_j + \frac{h}{2}) - \tilde{y}_{j+\frac{1}{2}, \frac{h}{2}} \approx \Phi(x_j, y_j) \left(\frac{h}{2}\right)^{s+1}. \quad (74)$$

Сделав шаг $\frac{h}{2}$ второй раз по этой же схеме, но уже из точки $x_j + \frac{h}{2}$, получим приближение $\tilde{y}_{j+1, \frac{h}{2}}$ к решению в точке $x_{j+1} = x_j + h$. На этом шаге погрешность метода в силу ограниченности частных производных Φ_x и Φ_y и малого шага h в первом приближении равна

$$\hat{y}(x_j + h) - \tilde{y}_{j+1, \frac{h}{2}} \approx \Phi(x_j, y_j) \left(\frac{h}{2}\right)^{s+1}. \quad (75)$$

Здесь \hat{y} - точное решение исходного дифференциального уравнения, удовлетворяющее начальному условию $\hat{y}(x_j + \frac{h}{2}) = \tilde{y}_{j+\frac{1}{2}, \frac{h}{2}}$. Методическая погрешность одношагового метода за два шага вычислений может быть представлена в виде:

$$y(x_j + h) - \tilde{y}_{j+1, \frac{h}{2}} \approx 2\Phi(x_j, y_j) \left(\frac{h}{2}\right)^{s+1} \quad (76)$$

Используя (73), (76) получим представление для главного члена погрешности на шаге h :

$$\Phi(x_j, y_j) h^{s+1} \approx \frac{\tilde{y}_{j+1, \frac{h}{2}} - \bar{y}_{j+1, h}}{1 - 2^{-s}} \quad (77)$$

Тогда правило Рунге оценки локальной погрешности приближенного решения $\bar{y}_{j+1,h}$, вычисленного с шагом h , может быть записано следующим образом:

$$y(x_j + h) - \bar{y}_{j+1,h} \approx \frac{(\tilde{y}_{j+1,\frac{h}{2}} - \bar{y}_{j+1,h})}{(1 - 2^{-s})}. \quad (78)$$

Оценка локальной погрешности приближенного решения $\tilde{y}_{j+1,\frac{h}{2}}$, вычисленного с двойным просчетом с шагом $h/2$ равна:

$$y(x_j + h) - \tilde{y}_{j+1,\frac{h}{2}} \approx \frac{(\tilde{y}_{j+1,\frac{h}{2}} - \bar{y}_{j+1,h})}{(2^s - 1)}. \quad (79)$$

Полученное приближенное решение можно уточнить, прибавив к нему величину главного члена погрешности, т.е. положив

$$y(x_{j+1}) \approx y_{j+1} = \bar{y}_{j+1,h} + \frac{(\tilde{y}_{j+1,\frac{h}{2}} - \bar{y}_{j+1,h})}{(1 - 2^{-s})} \quad (80)$$

или

$$y(x_{j+1}) \approx y_{j+1} = \tilde{y}_{j+1,\frac{h}{2}} + \frac{(\tilde{y}_{j+1,\frac{h}{2}} - \bar{y}_{j+1,h})}{(2^s - 1)}. \quad (81)$$

При этом

$$y(x_{j+1}) - y_{j+1} = O(h^{s+2}). \quad (82)$$

Оценка локальной погрешности одношаговых m - этапных методов Рунге-Кутты требует $3m - 1$ вычислений правой части $f(x, y)$ дифференциального уравнения.

Методы Рунге-Кутты численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений

Необходимо найти решение

$$\frac{dy^i}{dx} = f_i(x, y^1, \dots, y^n), \quad i = \overline{1, n} \quad (83)$$

удовлетворяющее начальному условию

$$y^i(x_0) = y_0^i, \quad i = \overline{1, n}. \quad (84)$$

Общая схема метода Рунге-Кутты численного решения задачи Коши (83),(84) имеет вид:

$$y^i(x + h) \approx y^i(x) + \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij} k_{ij}(h), \quad i = \overline{1, n} \quad (85)$$

где корректирующие функции $k_{ij}(h)$ вычисляются по правилу:

$$k_{i1}(h) = f_i(x, y^1, \dots, y^n), \quad i = \overline{1, n}, \quad (86)$$

а для $j = 2, \dots, m_i$;

$$k_{ij}(h) = f_i(x + c_{ij}h, y^1 + \sum_{\xi=1}^{j-1} a_{ij1\xi} k_{1\xi}(h), \dots, y^n + \sum_{\xi=1}^{j-1} a_{ijn\xi} k_{n\xi}(h)), \quad (87)$$

Методическая погрешность (85)-(87) $\Psi(h)$ — вектор-функция, каждая компонента которой

$$\Psi^i(h) = y^i(x + h) - y^i(x) - \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij} k_{ij}(h), \quad i = \overline{1, n}. \quad (88)$$

По сравнению со случаем одного уравнения $n = 1$ при построении одношаговых правил типа Рунге-Кутты в случае системы ($n > 1$) обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка представляются еще большие возможности в получении различных расчетных схем одного и того же порядка точности, так как число свободных параметров при этом сильно возрастает. Эти возможности реализуют крайне редко. Объяснение простое - для правых частей самого общего вида соотношение между числом этапов и наивысшим достижимым порядком точности остается прежним- $m_i = s, \quad m_i \leq 4$.

Поэтому, все уравнения системы можно считать равноправными, параметры метода $b_{ij} = b_i, \quad c_{ij} = c_i, \quad a_{ij\eta\xi} = a_{ij}$ и число этапов $m_i = m$ выбирают одинаковыми для всех компонент искомой вектор-функции. Это сокращает число параметров, а значит сужает возможности в построении расчетных схем одного порядка точности. Но зато значительно упрощается как вывод самих расчетных схем, так и их практическая реализация.

Использование различных характеристик точности.

Часто в алгоритмах выбора шага целесообразно использовать не абсолютную погрешность - ρ , а относительную - $\rho/|y|$. Например, для компонент искомой вектор-функции, которые растут и становятся очень большими. Нельзя же использовать относительную погрешность в тех случаях, когда компонента может обратиться в нуль. Эти обстоятельства и вынуждают нас для контроля вычислительного процесса использовать меру погрешности.

Определение: Мерой погрешности приближенного значения y_{j+1} решения СОДУ (83) в точке x_{j+1} называется величина $\mu = (\mu^1, \mu^2, \dots, \mu^n)$, определяемая соотношением

$$\mu^i = \begin{cases} \frac{\rho_{j+1}^i}{|y_{j+1}^i|}, & |y_{j+1}^i| > P^i \\ \rho_{j+1}^i, & |y_{j+1}^i| \leq P^i \end{cases} \quad (89)$$

где $P^i, j = 1, \dots, n$ -некоторые фиксированные положительные числа.

Контроль точности по мере погрешности состоит в том, что на тех участках интервала интегрирования, где абсолютная величина решения y_{j+1}^i не превосходит некоторого значения P^i , контроль точности ведется по абсолютной погрешности, а там, где абсолютная величина решения превосходит это значение, контроль точности ведется по относительной погрешности.

Для СОДУ (83) с проверкой на точность могут вычисляться либо все компоненты решения, либо некоторые из них.

Контроль точности может вестись покомпонентно или по норме. Для различных компонент могут использоваться как различные характеристики точности (абсолютная, относительная погрешность, мера погрешности), так и различные допустимые значения погрешности, т.е. $\varepsilon = (\varepsilon^1, \varepsilon^2, \dots, \varepsilon^r)$, где $r \leq n, r$ - количество проверяемых на точность компонент решения.

Те компоненты решения, которые проверяются на точность по мере погрешности (89), могут иметь каждая своё значение P^i для перехода от абсолютной погрешности к относительной. В этом случае $P = (P^1, \dots, P^r)$.

Контроль точности по норме означает, что контролируется некоторая норма оценки погрешности $\|\rho_{j+1}\|$.

Часто используются нормы: $\|\rho\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |\rho^i|, \quad \|\rho\|_1 = \sum_{i=1}^n |\rho^i|, \quad \|\rho\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |\rho^i|^2 \right)^{1/2}$.

Качество алгоритма.

Бросая в воду камешки, смотри на круги, ими образуемые; иначе такое бросание будет пустою забавою.

Козьма Прутков.

Здесь будем рассматривать, только три критерия качества алгоритма: надежность, точность, объём вычислений.

Надежность. Так как при практической реализации методов пытаются регулировать величину локальной погрешности, то метод можно считать надежным, если он удачно с этим справляется. Это значит, что необходимо вычислять на каждом шаге

$$\delta_{j+1}^\varepsilon = \frac{|l_{j+1}|}{h_j \varepsilon}, \quad (90)$$

l_{j+1} — истинная локальная погрешность на шаге h_j , или

$$\xi_{j+1}^\varepsilon = \frac{|l_{j+1}|}{|\rho_{j+1}|}. \quad (91)$$

Вычисленные значения (90), (91) можно использовать как для проверки качества используемого алгоритма, так и для его усовершенствования.

Точность. Численному анализу подвергается погрешность решения в каждом узле (абсолютная, относительная), обеспечивая ответы на следующие вопросы:

- - непрерывно ли уменьшается полная погрешность $R_{x_{j+1}}$ при уменьшении задаваемой допустимой погрешности ε ?
- - правильно ли работает алгоритм, когда требуется высокая точность?;

Объем вычислений.

Для одношаговых методов такой характеристикой служит количество вычислений правой части $\Theta(\varepsilon)$ СОДУ (83) на интервале интегрирования $[a, b]$ для каждой заданной точности ε .

Автоматический выбор шага интегрирования.

Применение переменного шага интегрирования позволяет учитывать характер поведения решения и уменьшать общее число шагов, сохранив при этом требуемую точность приближенного решения. Имея в распоряжении способы оценки локальной погрешности (78), (79), приближенного метода, величину шага интегрирования можно выбирать автоматически в процессе счета.

Алгоритмы, использующие удвоение и деление шага пополам. Алгоритм, использующий оценки (78), (79). Эти оценки локальной погрешности одношагового m -этапного метода типа Рунге-Кутты требуют $(3m - 1)$ -го вычисления правой части исходного уравнения. Такие огромные вычислительные затраты вынуждают нас строить алгоритм, использующий все полученные приближения к решению $\bar{y}_{i+1,h}$, $\tilde{y}_{i+\frac{1}{2},\frac{h}{2}}$, $\tilde{y}_{i+1,\frac{h}{2}}$.

Пусть ρ_{i+1} — оценка локальной погрешности метода на шаге h_i , допущенная при вычислении приближенного значения решения $\bar{y}_{i+1,h}$ в точке $x_i + h_i$, $h_i = h = \text{const} > 0$

Рассматриваемый ниже алгоритм предусматривает четыре варианта принятия решения:

- Если оценка локальной погрешности превосходит некоторую **наперед заданную** границу $\varepsilon \cdot 2^s$:

$$\|\rho_{i+1}\| > \varepsilon \cdot 2^s,$$

то считается, что приближенное значение решения \bar{y}_{i+1,h_i} не удовлетворяет предписанной точности. Уменьшая шаг в два раза $h_i := \frac{1}{2}h_i$, необходимо по той же приближенной формуле вычислять новое значение \bar{y}_{i+1,h_i} в точке $x_i + h_i$;

- Оценка локальной погрешности ρ_{i+1}

$$\varepsilon < \|\rho_{i+1}\| \leq \varepsilon \cdot 2^s,$$

приближенного значения решения \bar{y}_{i+1,h_i} не удовлетворяет предписанной точности. Но в качестве искомого решению может быть использовано приближение $\tilde{y}_{i+1,\frac{h_i}{2}}$, т.е. $y_{i+1} \equiv \tilde{y}_{i+1,\frac{h_i}{2}}$. Шаг интегрирования для продолжения $h_{i+1} := \frac{h_i}{2}$;

- Оценка локальной погрешности ρ_{i+1}

$$\frac{\varepsilon}{2^{s+1}} \leq \|\rho_{i+1}\| \leq \varepsilon$$

приближенного значения решения \bar{y}_{i+1,h_i} удовлетворяет предписанной точности. Увеличение шага интегрирования в два раза $h_{i+1} := 2h_i$, выведет погрешность приближения за рамки допустимого. В качестве приближения к решению в точке $x_i + h_i$ выбирается \bar{y}_{i+1,h_i} . Шаг остается неизменным $h_{i+1} := h_i$;

- Оценка локальной погрешности ρ_{i+1}

$$\|\rho_{i+1}\| < \frac{\varepsilon}{2^{s+1}},$$

приближенного значения решения \bar{y}_{i+1, h_i} существенно меньше заданной. Рекомендуется увеличение шага интегрирования в два раза $h_{i+1} := 2h_i$. В качестве приближения к решению в точке $x_i + h_i$ выбирается \bar{y}_{i+1, h_i} .

Алгоритм выбора начального шага.

- Вычислим $f(x_0, y(x_0))$ в начальной точке x_0 ;
- найдем

$$\Delta = \left(\frac{1}{\max(|x_0|, |x_k|)} \right)^{s+1} + \|f(x_0, y(x_0))\|^{s+1},$$

- тогда начальный шаг равен

$$h = \left(\frac{\varepsilon}{\Delta} \right)^{\frac{1}{s+1}}$$

Часто начальные условия находятся в особом положении, где большинство компонент $f^i(x_0, y(x_0))$, $i = 1, \dots, n$ может оказаться нулями.

В этом случае к а) – с) необходимо добавить ещё два шага.

- Сделать один шаг методом Эйлера с длиной шага h , полученной в с);
- повторить шаги алгоритма а) – с) с новым значением и выбрать меньший из двух полученных длин шагов.

Недостатки явного метода Рунге-Кутты.

- Зависимость порядка точности метода от количества вычислений правой части;
- Оценка локальной погрешности требует дополнительных вычислительных затрат, сравнимых по объему с вычислительными затратами на получение приближенного решения.

Цель задания: - Практическое освоение алгоритма конструирования явных одношаговых методов численного интегрирования типа Рунге-Кутты.

- На базе построенной расчетной схемы с использованием метода Рунге оценки глобальной и локальной погрешностей построить алгоритмы численного интегрирования с автоматическим выбором шага.
- Проведение тестирования и сравнительного анализа Вашего алгоритма решения задачи Коши по всем предложенным критериям. В качестве оппонента использовать предложенную классическую расчетную схему.