1.6. Daugiažingsniai baigtinių skirtumų metodai

Ir šiame poskyryje nagrinėsime PDL pradinio uždavinio

$$\begin{cases} \dfrac{dU}{dt} = F(t,U)\,, \quad t > 0\,, \\ U(0) = U_0 \end{cases}$$

skaitinius sprendimo metodus.

Priminsime pagrindinį Rungės ir Kuto metodo trūkumą: viename žingsnyje funkcijos $F(t,U)$ reikšmes skaičiuojame m skirtinguose taškuose, tačiau kitame žingsnyje šių reikšmių daugiau nenaudojame.

Dabar nagrinėsime tokį metodą, kai tos pačios $F(t,U)$ reikšmės naudojamos keliems algoritmo žingsniams. Pažymėkime

$$F_k = F(t_k, Y^k), \quad k = 0, 1, \ldots, n\,.$$

Daugiažingsniu baigtinių skirtumų metodu vadinsime algoritmą

$$\frac{a_0 Y^n + a_1 Y^{n-1} + \cdots + a_m Y^{n-m}}{\tau_n} = b_0 F_n + b_1 F_{n-1} + \cdots + b_m F_{n-m}\,, \quad (1.44)$$

čia m yra žingsnių skaičius. Daugiažingsnis metodas vadinamas *išreikštiniu*, jei $b_0 = 0$, ir *neišreikštiniu*, jei $b_0 \neq 0$.

Šio metodo koeficientai apibrėžti konstantos tikslumu, todėl suformuluosime normavimo sąlygą:

$$\sum_{k=0}^{m} b_k = 1\,. \quad (1.45)$$

Algoritmo (1.44) formulė gali būti taikoma tik kai $n \geqslant m$, todėl skaičiavimo pradžioje sprendinio reikšmes $Y^0, Y^1, \ldots, Y^{m-1}$ randame kokiu nors vienažingsniu metodu, pavyzdžiui Rungės ir Kuto metodu.

Neišreikštinio metodo realizavimas. Jeigu algoritmas yra neišreikštinis, tai reikia spręsti netiesinių lygčių sistemą

$$a_0 Y^n - \tau b_0 F(t_n, Y^n) = \Phi(Y^{n-1}, Y^{n-2}, \ldots, Y^{n-m})\,.$$

Vėl galime taikyti paprastųjų iteracijų arba Niutono metodus. Iteracinio metodo konvergavimas tiriamas taip pat kaip ir neišreikštinio Eulerio metodo atveju.

Pateiksime daugiažingsnio baigtinių skirtumų metodo algoritmą.

```
procedure   Daugiažingsnio metodo algoritmas
begin
      1. Pradinės sąlygos skaičiavimas
         t = 0
         for  i = 1  to  M
              Y(0, i) = U_0[i]
         end for

      2. Sprendinio reikšmių Y_1, ..., Y_{m-1} skaičiavimas
         /*  Pavyzdžiui, l-pakopiu Rungės ir Kuto metodu */

      3. F_0, F_1, ..., F_{m-1} reikšmių skaičiavimas
         for  k = 0  to  m - 1
              for  i = 1  to  M
                   F(k, i) = f_i(t, Y(k))
              end for
              t = t + τ
         end for

      4. Sprendinio skaičiavimas nauju laiku
         while (t ≤ T)
              for  i = 1  to  M
                   YP(i) = 0
              end for

              for  j = 1  to  m
                   for  i = 1  to  M
                        YP(i) += τ b_j F(m - j, i) - a_j Y(m - j, i)
                   end for
              end for

              if (b_0 == 0) /* išreikštinis metodas */
                   for  i = 1  to  M
                        Y(m, i) = YP(i)/a_0
                   end for
              else     /* neišreikštinis metodas */
                   Išsprendžiame netiesinių lygčių sistemą
                   a_0 Y(m) - τ b_0 F(t, Y(m)) = YP
```

```
        end if
        for  i = 1  to  M
            F(m,i) = f_i(t, Y(m))
        end for

        5. Perstumiami duomenys
        for  j = 0  to  m − 1
            for  i = 1  to  M
                Y(j,i) = Y(j+1,i)
                F(j,i) = F(j+1,i)
            end for
        end for

        t = t + τ
    end while
end
```

1.6.1. Adamso metodas

Šiame skirsnyje parodysime, kaip parenkami daugiažingsnio metodo koeficientai, tai yra kaip sudaromi konkretūs daugiažingsniai diferencialinių lygčių integravimo algoritmai.

Nagrinėsime atskirą (1.44) metodo klasę, vadinamą *Adamso metodu*:

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = \sum_{k=0}^{m} b_k F(t_{n-k}, Y^{n-k})\,. \tag{1.46}$$

Jei $b_0 = 0$, tai gauname *išreikštinį* Adamso metodą (*Adamso ir Bashfortho* metodą), jei $b_0 \neq 0$ – *neišreikštinį* Adamso metodą (*Adamso ir Moultono* metodą).

Norint rasti koeficientus b_k, užtenka nagrinėti vieną diferencialinę lygtį, tai yra imsime $M = 1$. Integruokime sprendžiamą diferencialinę lygtį intervale $[t_{n-1}, t_n]$, tada gausime integralinę lygtį

$$u(t_n) = u(t_{n-1}) + \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t,u)\,dt\,. \tag{1.47}$$

Adamso metodo formules gauname aproksimuodami integralą skaitinio integravimo formulėmis. Kadangi šios formulės dažniausiai išvedamos naudojant interpoliacinį Niutono daugianarį arba neapibrėžtinių koeficientų metodu, tai abu šiuos metodus galime taikyti Adamso metodo koeficientams apibrėžti.

Interpoliacinis Niutono daugianaris. Skaičiuosime Adamso ir Bashfortho formulės koeficientus. Imkime tokius interpoliavimo mazgus ir funkcijos $f(t,U)$ reikšmes:

t_{n-1}	t_{n-2}	$\cdots$	t_{n-m}
$f(t_{n-1},Y_{n-1})$	$f(t_{n-2},Y_{n-2})$	$\cdots$	$f(t_{n-m},Y_{n-m})$

ir sudarykime interpoliacinį Niutono daugianarį $P_{m-1}(t_{n-1},t)$:

$$\begin{aligned}P_{m-1}(t_{n-1},t) &= f_{n-1} + s\nabla f_{n-1} + \frac{(s+1)s}{2!}\nabla^2 f_{n-1} \\ &\quad + \cdots + \frac{\big(s+(m-2)\big)\dots(s+1)s}{(m-1)!}\nabla^{m-1} f_{n-1}\,,\end{aligned}$$

čia $s = \dfrac{t-t_{n-1}}{\tau}$, o $\nabla^l f_n$ yra l-osios eilės baigtiniai skirtumai, kurie apibrėžiami rekurenčiosiomis lygybėmis

$$\begin{aligned}&\nabla^1 f_n = f_n - f_{n-1}\,,\\ &\nabla^l f_n = \nabla^{l-1} f_n - \nabla^{l-1} f_{n-1}, \quad l \geqslant 2\,.\end{aligned}$$

Baigtinių skirtumų $\nabla^l f_n$ išreikštinės skaičiavimo formulės pateiktos 1.8 lentelėje.

1.8 lentelė. Baigtinių skirtumų išreikštinės formulės

t	f	∇f	$\nabla^2 f$	$\nabla^3 f$
t_n	f_n			
		$f_n - f_{n-1}$		
t_{n-1}	f_{n-1}		$f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}$	
		$f_{n-1} - f_{n-2}$		$f_n - 3f_{n-1} + 3f_{n-2} - f_{n-3}$
t_{n-2}	f_{n-2}		$f_{n-1} - 2f_{n-2} + f_{n-3}$	
		$f_{n-2} - f_{n-3}$		
t_{n-3}	f_{n-3}			

Tada m-žingsnis Adamso ir Bashfortho metodas apibrėžiamas lygybe

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = \frac{1}{\tau} \int_{t_{n-1}}^{t_n} P_{m-1}(t_{n-1}, t)\, dt\,.$$

Suintegravę interpoliacinį daugianarį gauname tokią lygtį (ją užrašome PDL sistemai):

$$\begin{aligned} \frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} &= F_{n-1} + \frac{1}{2}\nabla F_{n-1} + \frac{5}{12}\nabla^2 F_{n-1} \\ &+ \dots + \int\limits_0^1 \frac{\big((s+(m-2)\big)\cdots(s+1)s}{(m-1)!}\, ds\; \nabla^{m-1} F_{n-1}\,. \end{aligned} \tag{1.48}$$

Pakeitę baigtinius skirtumus $\nabla^k F_{n-1}$ funkcijos F reikšmėmis, gausime (1.46) formulę.

1.5 pavyzdys. Keturžingsnis Adamso ir Bashfortho metodas. Metodo (1.48) formulėje imkime $m = 4$, tada gauname lygtį

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = F_{n-1} + \frac{1}{2}\nabla F_{n-1} + \frac{5}{12}\nabla^2 F_{n-1} + \frac{3}{8}\nabla^3 F_{n-1}\,.$$

Naudodamiesi 1.8 lentele, pakeičiame baigtinius skirtumus išreikštinėmis formulėmis

$$\begin{aligned} \frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} &= F_{n-1} + \frac{1}{2}\big(F_{n-1} - F_{n-2}\big) + \frac{5}{12}\big(F_{n-1} - 2F_{n-2} + F_{n-3}\big) \\ &+ \frac{3}{8}\big(F_{n-1} - 3F_{n-2} + 3F_{n-3} - F_{n-4}\big)\,. \end{aligned}$$

Atlikę elementarius skaičiavimus, užrašome keturžingsnio Adamso ir Bashfortho metodo lygtį

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = \frac{1}{24}\big(55F_{n-1} - 59F_{n-2} + 37F_{n-3} - 9F_{n-4}\big)\,.$$

Gautasis algoritmas (kaip ir visi Adamso ir Bashfortho metodo algoritmai) yra **išreikštinis**.

Neišreikštinis m-žingsnis Adamso ir Moultono metodas apibrėžiamas lygybe

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = \frac{1}{\tau}\int_{t_{n-1}}^{t_n} P_m(t_n, t)\, dt \equiv F_n - \frac{1}{2}\nabla F_n \tag{1.49}$$
$$+ \dots + \int\limits_{-1}^{0} \frac{\big(s + (m-1)\big)\cdots(s+1)s}{m!}\, ds\; \nabla^m F_n\,,$$

čia $s = \frac{t-t_n}{\tau}$. Pakeitę baigtinius skirtumus $\nabla^k F_n$ funkcijos F reikšmėmis, gauname Adamso ir Moultono algoritmo formulę.

Patikrinkite, kad imdami $m = 1$ vėl sukonstruojame neišreikštinį Eulerio metodą, o imdami $m = 2$ gauname simetrinį Eulerio metodą.

1.6 pavyzdys. Trižingsnis Adamso ir Moultono metodas. (1.49) formulėje imkime $m = 3$, tada gauname lygtį

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = F_n - \frac{1}{2}\nabla F_n - \frac{1}{12}\nabla^2 F_n - \frac{1}{24}\nabla^3 F_n\,.$$

Naudodamiesi 1.8 lentele, pakeičiame baigtinius skirtumus išreikštinėmis formulėmis ir gauname tokią trižingsnio Adamso ir Moultono metodo lygtį:

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = \frac{1}{24}\big(9F_n + 19F_{n-1} - 5F_{n-2} + F_{n-3}\big)\,.$$

1.6.2. Daugiažingsnio metodo koeficientų skaičiavimas

Daugiažingsnio metodo (1.44) koeficientus parinksime taip, kad gautojo metodo aproksimacijos tikslumo eilė būtų didžiausia. Pagal apibrėžimą aproksimavimo paklaida yra lygi

$$\Psi^n = \sum_{k=0}^{m}\left(\frac{a_k}{\tau}u^{n-k} - b_k f\big(t_{n-k}, u^{n-k}\big)\right)\,.$$

Naudodamiesi sprendžiama diferencialine lygtimi, pertvarkykime aproksimavimo paklaidos išraišką

$$\Psi^n = \sum_{k=0}^{m}\left(\frac{a_k}{\tau}u^{n-k} - b_k u'(t_{n-k})\right)\,. \tag{1.50}$$

Išskleidę funkcijas $u(t)$ ir $u'(t)$ Teiloro eilute ir tarę, kad $|u^{(p+1)}(t)| \leqslant C$, gausime lygybes

$$u^{n-k} = \sum_{l=0}^{p} \frac{(-k\tau)^l u^{(l)}(t_n)}{l!} + \mathcal{O}(\tau^{p+1}), \quad k = 1, 2, \ldots, m\,,$$

$$u'(t_{n-k}) = \sum_{l=0}^{p-1} \frac{(-k\tau)^l u^{(l+1)}(t_n)}{l!} + \mathcal{O}(\tau^p)\,.$$

Įrašę šiuos skleidinius į (1.50) lygybę ir kai ką pertvarkę gausime tokią aproksimavimo paklaidos išraišką:

$$\Psi^n = \sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} u(t_n) - \sum_{l=1}^{p} \sum_{k=0}^{m} (-k\tau)^{l-1} \big(a_k \frac{k}{l} + b_k\big) \frac{u^{(l)}(t_n)}{(l-1)!} + \mathcal{O}(\tau^p)\,.$$

Taigi daugiažingsnio metodo aproksimacija yra p-osios tikslumo eilės, jei galioja šios sąlygos:

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=0}^{m} a_k = 0\,, \\ \sum\limits_{k=0}^{m} k^{l-1}(k a_k + l b_k) = 0\,, \quad l = 1, 2, \ldots, p\,. \end{cases} \tag{1.51}$$

Taikydami ir normavimo sąlygą

$$\sum_{k=0}^{m} b_k = 1\,,$$

gausime $p+2$ tiesinių lygčių sistemą, kurioje yra $2(m+1)$ nežinomieji – daugiažingsnio baigtinių skirtumų metodo koeficientai.

Šią sistemą supaprastinsime. Pirmiausia iš pirmosios ir paskutiniosios lygčių išreiškiame koeficientus a_0, b_0:

$$a_0 = -\sum_{k=1}^{m} a_k, \quad b_0 = 1 - \sum_{k=1}^{m} b_k\,. \tag{1.52}$$

Tada nagrinėkime aproksimavimo lygtį, kai $l = 1$:

$$\sum_{k=0}^{m} k a_k + \sum_{k=0}^{m} b_k = 0.$$

Pasinaudoję normavimo sąlyga ir pakeitę apatinį sumavimo indeksą pirmoje sumoje, gauname lygtį:

$$\sum_{k=1}^{m} k a_k = -1.$$

Taigi koeficientus $a_j, b_j,\ j = 1, \dots, m$ rasime išsprendę tiesinių lygčių sistemą

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=1}^{m} k a_k = -1\,, \\ \sum\limits_{k=1}^{m} k^{l-1}(k a_k + l b_k) = 0\,, \quad l = 2, 3, \dots, p\,. \end{cases} \tag{1.53}$$

Matome, kad (1.44) daugiažingsnio metodo aproksimacijos tikslumo eilė negali būti didesnė už $2m$. Išreikštinės schemos atveju, kai $b_0 = 0$, didžiausia aproksimacijos eilė yra $2m - 1$.

1.7 pavyzdys. Dvižingsnis neišreikštinis metodas. Sudarykime (1.53) tiesinių lygčių sistemą, kai $m = 2$

$$\begin{cases} a_1 + 2a_2 = -1\,, \\ a_1 + 2b_1 + 4a_2 + 4b_2 = 0\,, \\ a_1 + 3b_1 + 8a_2 + 12b_2 = 0\,, \\ a_1 + 4b_1 + 16a_2 + 32b_2 = 0\,. \end{cases}$$

Išsprendę šią lygčių sistemą, randame sprendinį

$$a_1 = 0, \quad a_2 = -0,5, \quad b_1 = \frac{2}{3}, \quad b_2 = \frac{1}{6}\,.$$

Tada iš (1.52) lygčių apskaičiuojame koeficientus a_0, b_0. Sudarėme dvižingsnį neišreikštinį metodą

$$\frac{Y^n - Y^{n-2}}{2\tau} = \frac{1}{6}\big(F_n + 4F_{n-1} + F_{n-2}\big)\,, \tag{1.54}$$

kurio aproksimacijos tikslumo eilė yra ketvirtoji.

Nesunku pastebėti, kad šioje formulėje aproksimavome integralą $\int_{t_{n-2}}^{t_n} F(t)\,dt$ Simpsono skaitinio integravimo formule, kurios tikslumas irgi yra ketvirtosios eilės.