1.2. Neišreikštinis ir simetrinis Eulerio metodai

1.2.1. Neišreikštinis Eulerio metodas

Jeigu (1.8) lygtyje

$$U^{n+1} = U^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{dU}{dt} dt = u^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(t, U) dt\,.$$

integralą aproksimuosime dešiniųjų stačiakampių formule, tai gausime *neišreikštinį Eulerio metodą*

$$\frac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = F\left(t_{n+1}, Y^{n+1}\right)\,. \tag{1.10}$$

Realizuoti šį metodą jau nėra taip paprasta kaip išreikštinį Eulerio metodą. Diskretusis sprendinys nauju laiku t_{n+1} randamas sprendžiant netiesinių lygčių sistemą

$$Y^{n+1} - \tau_{n+1} F\left(t_{n+1}, Y^{n+1}\right) = Y^n\,. \tag{1.11}$$

(1.11) spręsti dažniausiai taikome paprastųjų iteracijų ir Niutono metodus.

Paprastųjų iteracijų metodas

Naują sprendinio Y^{n+1} artinį apskaičiuojame tokiu iteraciniu metodu

$$\begin{aligned} \overset{s+1}{Y} &= \tau_{n+1} F\big(t_{n+1}, \overset{s}{Y}\big) + Y^n, \quad s \geq 0, \qquad (1.12)\\ \overset{0}{Y} &= Y^n\,. \end{aligned}$$

Reikalausime, kad visada galiotų įvertis

$$\|\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\| \leq q\, \|\overset{s}{Y} - \overset{s-1}{Y}\|\,, \quad q < 1\,, \tag{1.13}$$

o iteracijas skaičiuosime tol, kol bus išpildyta konvergavimo sąlyga

$$\|\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\| \leq \frac{1-q}{q} \varepsilon\,, \tag{1.14}$$

čia $\|\cdot\|$ yra kokia nors vektoriaus norma, pavyzdžiui:

$$\|Y^n\| = \max_{1 \leq i \leq M} |y_i(t_n)|\,.$$

Pabandysime išsiaiškinti, ar visada galima taip parinkti integravimo žingsnį, kad galiotų aukščiau suformuluotos sąlygos.

(1.11) lygties sprendinys egzistuoja ir (1.12) iteraciniu metodu gautoji seka konverguoja, kai funkcija $F(t, U)$ yra aprėžtoji ir tenkina Lipšico sąlygą:

$$\begin{aligned} &\|F(t,V)\| \le M_0\,, \\ &\|F(t,U) - F(t,V)\| \le L\|U - V\|\,. \end{aligned} \tag{1.15}$$

1.1 teorema. *Jei yra teisingos* (1.15) *nelygybės, tai pakankamai mažoms diskrečiojo parametro* τ_{n+1} *reikšmėms* $\tau_{n+1} \le q/L$, (1.11) *lygčių sistema turi vienintelį sprendinį, paprastųjų iteracijų seka* (1.12) *konverguoja į šį sprendinį ir galioja* (1.13) *įvertis.*

Įrodymas. Pirmiausia įrodysime, kad iteracijų seka $\overset{s}{Y}$ yra fundamentalioji (arba Koši seka). Dviejų gretimų iteracijų skirtumas $\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}$ tenkina lygtį

$$\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y} = \tau_{n+1}\Big(F\big(t_{n+1}, \overset{s}{Y}\big) - F\big(t_{n+1}, \overset{s-1}{Y}\big)\Big).$$

Remdamiesi (1.15) sąlyga gauname, kad

$$\|\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\| \le \tau_{n+1}L\ \|\overset{s}{Y} - \overset{s-1}{Y}\|.$$

Todėl kai $\tau_{n+1} \le \dfrac{q}{L}$, yra teisingas (1.13) įvertis. Nagrinėkime dviejų artinių skirtumą $\overset{s+m}{Y} - \overset{s+1}{Y}$, kai $m \ge 2$:

$$\begin{aligned} \overset{s+m}{Y} - \overset{s+1}{Y} &= \overset{s+m}{Y} - \overset{s+m-1}{Y} + \overset{s+m-1}{Y} - \overset{s+1}{Y} \\ &= \overset{s+m}{Y} - \overset{s+m-1}{Y} + \overset{s+m-1}{Y} - \overset{s+m-2}{Y} + \dots + \overset{s+2}{Y} - \overset{s+1}{Y}\,. \end{aligned}$$

Iš šios lygybės ir (1.13) įverčio, imdami $q < 1$, gauname nelygybę

$$\begin{aligned} \|\overset{s+m}{Y} - \overset{s+1}{Y}\| &\le \big(q^{m-1} + q^{m-2} + \dots + q\big)\|\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\| \\ &\le \frac{q}{1-q}\|\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\|\,. \end{aligned} \tag{1.16}$$

Rekurentiškai naudodami (1.13) nelygybę, įrodome, kad

$$\|\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\| \le q\ \|\overset{s}{Y} - \overset{s-1}{Y}\| \le q^s\ \|\overset{1}{Y} - \overset{0}{Y}\|\,.$$

Iš pradinio artinio parinkimo $\overset{0}{Y} = Y^n$ ir (1.12) lygties gauname įvertį

$$\|\overset{1}{Y} - Y^n\| \leq \tau_{n+1} \, \|F(t_{n+1}, Y^n)\| \leq \tau_{n+1} M_0,$$

todėl

$$\|\overset{s+m}{Y} - \overset{s+1}{Y}\| \leq \frac{\tau_{n+1} M_0 q^{s+1}}{1-q}.$$

Pakankamai dideliems $s \geq s_0(\varepsilon)$ galioja nelygybė

$$\|Y^{s+m} - Y^{s+1}\| \leq \varepsilon.$$

Taigi įrodėme, kad iteracijų seka $\overset{s}{Y}$ yra fundamentalioji. Tada egzistuoja riba

$$\lim_{s\to\infty} \overset{s}{Y} = Y^{n+1},$$

kuri yra neišreikštinio Eulerio metodo sprendinys laiko momentu t_{n+1}. Nelygybėje (1.16) imdami $m \to \infty$ ir naudodamiesi iteracijų pabaigos sąlyga (1.14), gauname artinio $\overset{s+1}{Y}$ tikslumo įvertį

$$\|Y^{n+1} - \overset{s+1}{Y}\| \leq \varepsilon.$$

Teorema įrodyta. □

Niutono metodas

Naują neišreikštinio Eulerio metodo sprendinio Y^{n+1} artinį apskaičiuojame tokiu iteraciniu metodu:

$$\Big(I - \tau_{n+1} J_{n+1}\big(\overset{s}{Y}\big)\Big) \Big(\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\Big) = -\overset{s}{Y} + Y^n + \tau_{n+1} F\Big(t_{n+1}, \overset{s}{Y}\Big), \quad (1.17)$$

čia I pažymėjome vienetinę matricą

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ . & . & \cdots & . \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

o matrica J_{n+1} yra vektoriaus-funkcijos F jakobianas

$$J_{n+1}(Y) = \left(\frac{\partial f_i(t_{n+1}, Y)}{\partial y_j}\right) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial y_1} & \frac{\partial f_1}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial y_M} \\ \frac{\partial f_2}{\partial y_1} & \frac{\partial f_2}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial y_M} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \frac{\partial f_M}{\partial y_1} & \frac{\partial f_M}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f_M}{\partial y_M} \end{pmatrix}.$$

Modeliuojant daugelį technikos ir gamtos procesų tenka spręsti dideles PDL sistemas, tada analiziškai skaičiuoti ir programuoti matricos $J_{n+1}(Y)$ koeficientus yra neekonomiška ir sunku. Todėl dažniausiai $J_{n+1}(Y)$ koeficientai yra apskaičiuojami pagal skaitinio diferencijavimo formules:

$$\frac{\partial f_i(t_{n+1}, Y)}{\partial y_j} \approx \frac{f_i(t_{n+1}, Y + hE_j) - f_i(t_{n+1}, Y)}{h},$$

čia pažymėjome vektorių $E_j = (\delta_{1j}, \delta_{2j}, \dots, \delta_{Mj})^T$, pavyzdžiui,

$$E_1 = (1, 0, \dots, 0)^T, \quad E_2 = (0, 1, 0, \dots, 0)^T.$$

Taigi realizuodami Niutono metodą kiekvienoje iteracijoje turime apskaičiuoti matricą $J_{n+1}(\overset{s}{Y})$ ir išspręsti tiesinių lygčių sistemą (1.17). Matome, jog vienai Niutono metodo iteracijai realizuoti reikia daugiau aritmetinių veiksmų nei paprastųjų iteracijų metodui. Tačiau Niutono metodas konverguoja greičiau ir dažnai skaičiuoti galime su didesniu diskrečiuoju parametru τ_{n+1}.

1.2 teorema. *Tegul funkcijai F galioja tokie įverčiai*

$$\|F(t_{n+1}, Y)\| \le M_0, \quad \|H_k(t_{n+1}, Y)\| \le M_2, \tag{1.18}$$
$$\left\| (I - \tau_{n+1} J_{n+1}(Y))^{-1} \right\| \le \frac{1}{M_1}, \quad k = 1, \dots, M,$$

čia H_k pažymėjome antrųjų išvestinių matricą:

$$H_k(t_{n+1}, Y) = \left(\frac{\partial^2 f_k(t_{n+1}, Y)}{\partial y_i \partial y_j}\right), \quad 1 \le i, j \le M.$$

Tada pakankamai mažoms diskrečiojo parametro reikšmėms $\tau \le \tau_0$ Niutono metodu gauta iteracijų seka (1.17) *konverguoja į* (1.11) *lygčių sistemos sprendinį ir galioja iteracijų paklaidos įvertis*

$$\left\|Y^{n+1} - \overset{s+1}{Y}\right\| \le \frac{\tau_{n+1} M_2}{2M_1} \left\|Y^{n+1} - \overset{s}{Y}\right\|^2. \tag{1.19}$$

Iš (1.2) teoremos matome, kad Niutono iteracinis metodas konverguoja kvadratiniu greičiu.

Aptarsime praktines iteracijų konvergavimo ir algoritmo pabaigos sąlygas. Iteracijas skaičiuosime tol, kol bus išpildytos abi nelygybės:

$$\big\| \overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y} \big\| \le \varepsilon, \quad \Big\| \frac{\overset{s+1}{Y} - Y^{n+1}}{\tau_{n+1}} - F(t_{n+1}, \overset{s+1}{Y}) \Big\| \le \varepsilon\,,$$

tai yra dviejų gretimų artinių skirtumas bei (1.10) lygties netiktis taps pakankamai maži. Vietoj absoliučiosios paklaidos galima naudoti ir santykinę paklaidą, pavyzdžiui:

$$\big\| \overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y} \big\| / \big(1 + \big\| \overset{s+1}{Y} \big\|\big) \le \varepsilon\,.$$

Pateiksime neišreikštinio Eulerio metodo algoritmą, kai (1.10) lygtis yra sprendžiama paprastųjų ireacijų metodu.

procedure Neišreikštinis Eulerio metodas
begin
1. Pradinės sąlygos skaičiavimas
   $t = 0, \quad n = 0$
   for $i = 1$ **to** M
   $\quad YN[i] = u_0[i]$
   end for

2. Sprendinio skaičiavimas nauju laiku
   while $\big((t + \tau_{n+1}) \le T\big)$
   $\quad$ **for** $i = 1$ **to** M
   $\quad\quad YS[i] = YN[i]$
   $\quad$ **end for**

   3. Pradinio iteracinio artinio skaičiavimas
   for $i = 1$ **to** M
   $\quad YP[i] = YS[i]$
   end for
   $pakl_N = 10^6$

   4. Paprastųjų iteracijų metodas
   $pakl_S = pakl_N; \;\; pakl_N = 0$
   for $i = 1$ **to** M

$YN[i] = YS[i] + \tau_{n+1}\ f_i(t, YP)$
$skirt = |\ YN[i] - YP[i]\ |$
if ($skirt > pakl_N$)
$pakl_N = skirt$
end if
end for

if ($pakl_N > q\ pakl_S$) ! *neišpildyta sąlyga* (1.13)
$\tau_{n+1} := \dfrac{\tau_{n+1}}{2}$
go to 3
end if

if $\left(pakl_N > \dfrac{(1-q)\ \varepsilon}{q}\right)$! *neišpildyta sąlyga* (1.15)
for $i = 1$ **to** M
$YP[i] = YN[i]$
end for
go to 4
end if

$t = t + \tau_{n+1}; \quad n = n + 1;$
end while
end

Neišreikštinio Eulerio metodo tiklsumą irgi iliustruosime šilumos spinduliavimo uždavinio sprendimo rezultatais (žr. vadovėlį). Uždavinio (1.11) sprendinį skaičiuosime paprastųjų iteracijų metodu su tokiais iteraciniais parametrais:

$$q = \frac{1}{2}, \quad \varepsilon = 10^{-6}\tau\,.$$

1.3 lentelėje pateiktos neišreikštinio Eulerio metodo sprendinio paklaidos reikšmės taške $t = 6$ su įvairiomis parametro τ reikšmėmis.

1.3 lentelė. Neišreikštinio Eulerio metodo tikslumo analizė

τ	$E(\tau)$	$E(2\tau)/E(\tau)$
1,000	0,556E-3	1,9598
0,500	0,281E-3	1,9804
0,250	0,141E-3	1,9890
0,125	0,708E-4	1,9946

1.2.2. Simetrinis Eulerio metodas

Išvesdami išreikštinio ir neišreikštinio Eulerio metodo formules (1.8) lygtyje integralą aproksimavome atitinkamai kairiųjų ir dešiniųjų stačiakampių integravimo formulėmis. Šių formulių tikslumo eilė yra pirmoji. Dabar šį integralą apskaičiuosime pagal trapecijų formulę, kurios tikslumo eilė yra antroji. Tada gausime *simetrinio Eulerio metodo* lygtį:

$$\frac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = \frac{F(t_{n+1}, Y^{n+1}) + F(t_n, Y^n)}{2}. \tag{1.20}$$

Ir šis metodas yra neišreikštinis. Diskretųjį sprendinį nauju laiku randame išsprendę netiesinių lygčių sistemą:

$$Y^{n+1} - \frac{\tau_{n+1}}{2}\, F(t_{n+1}, Y^{n+1}) = Y^n + \frac{\tau_{n+1}}{2}\, F(t_n, Y^n). \tag{1.21}$$

Vėl galime taikyti paprastųjų iteracijų arba Niutono metodus. Iteracinio metodo konvergavimo sąlygos gaunamos iš analogiškų sąlygų, įrodytų neišreikštiniam Eulerio metodui.

Spręsime šilumos spinduliavimo uždavinį ir įvertinsime simetrinio Eulerio metodo tikslumą. Skaičiavimo rezultatai pateikti 1.4 lentelėje.

1.4 lentelė. Simetrinio Eulerio metodo tikslumo analizė

τ	$E(\tau)$	$E(2\tau)/E(\tau)$
1,000	4,855E-6	4,0000
0,500	1,239E-6	3,9999
0,250	3,050E-7	4,0000
0,125	7,589E-8	3,9999

Iš pateiktų rezultatų matyti, kad simetrinio Eulerio metodo sprendinio globalioji paklaida $E(\tau)$ mažėja kaip $\mathcal{O}(\tau^2)$ eilės dydis.

Iki šiol įvairiais Eulerio metodo variantais sprendėme vieną diferencialinę lygtį su tam tikra pradine sąlyga. Panašūs rezultatai gaunami ir sprendžiant PDL sistemas (žr. pvz. vadovėlyje).