1 skyrius

Paprastųjų diferencialinių lygčių sistemų pradinio uždavinio skaitiniai sprendimo metodai

1.1. Pagrindiniai skaitiniai sprendimo metodai

Spręskime pradinį paprastųjų diferencialinių lygčių sistemos uždavinį

$$\begin{cases} \dfrac{dU}{dt} = F(t, U)\,, \\ U(0) = U_0\,. \end{cases} \tag{1.1}$$

Čia $U(t) = \big(u_1(t), \ldots, u_M(t)\big)^T$ ir $F(t, U) = \big(f_1, \ldots, f_M\big)^T$ yra M dimensijos vektoriai-funkcijos. Visada tarsime, kad vektoriaus $F(t, U)$ reikšmės yra aprėžtos iš viršaus:

$$\big|f_i(t, U)\big| \le M_0, \quad i = 1, 2, \ldots, M\,.$$

Prisiminsime svarbiausius skaitinius metodus, plačiai naudojamus tokių uždavinių sprendimui.

1.1.1. Baigtinių skirtumų metodas

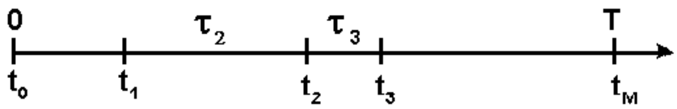
Šio metodo pagrindinis žingsnis – išvestinių aproksimavimas baigtiniais skirtumais. Tačiau tai galime atlikti įvairiais būdais, taigi galime sudaryti daugybę skaitinių algoritmų, skirtų tam pačiam uždaviniui spręsti. Taigi reikia mokėti įvertinti tokių algoritmų savybes ir išrinkti efektyviausius algoritmus.

Diferencialinės lygties (1.1) sprendinys yra ieškomas visame intervale $0 \leq t \leq T$. Įveskime *diskretųjį tinklą* pagal koordinatę t:

$$\omega_\tau = \left\{ t_n : \quad t_n = t_{n-1} + \tau_n, \ n = 1, \ldots, N, \ \ t_0 = 0, \ t_N = T \right\},$$

čia $\tau_n > 0$ yra diskrečiojo tinklo žingsnis, t_n yra vadinamas diskrečiojo tinklo mazgu. Tinklo ω_τ pavyzdys pateiktas 1.1 pav. Jei visi τ_n yra pastovūs, tai turime *tolygųjį* diskretųjį tinklą:

$$\omega_\tau = \left\{ t_n : \quad t_n = n\tau, \ n = 0, 1, \ldots, N, \ \ t_N = T \right\}.$$



1.1 pav. Diskretusis tinklas ω_τ

PDL sistemos pradinio uždavinio sprendinio artinį skaičiuosime tik diskrečiojo tinklo mazguose, šį artinį žymėsime

$$Y^n = Y(t_n) = \left(y_1^n, y_2^n, \ldots, y_M^n\right)^T, \quad n = 0, 1, \ldots, N.$$

Taigi gauname baigtinį skaičių nežinomųjų – jų iš viso yra $M \times \big(N + 1\big)$. Žinodami sprendinio artinius diskrečiojo tinklo mazguose, nesunkiai galime apskaičiuoti reikšmes ir kituose taškuose. Šį uždavinį išsprendžiame taikydami interpoliavimo metodus.

Išvestinių aproksimacija baigtiniais skirtumais

Tolydžiosios funkcijos išvestinę $v'(t)$ aproksimuosime baigtiniais skirtumais naudodami tik funkcijos reikšmes tinklo ω_τ mazguose. Aišku, kad toks pakeitimas gali būti atliktas daugeliu būdų.

Nagrinėkime baigtinių skirtumų formulę

$$v_t = \frac{v(t_n + \tau) - v(t_n)}{\tau}, \quad \tau > 0. \tag{1.2}$$

Naudodami Teiloro skleidinį

$$v^{n+1} = v^n + \tau v'(t_n) + \frac{\tau^2}{2} v''(t_n + \Theta\tau), \quad 0 < \Theta < 1,$$

gausime, kad

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\tau} = v'(t_n) + \frac{\tau}{2} v''(t_n + \Theta\tau) \,. \tag{1.3}$$

Išvestinės $v'(t_n)$ reikšmę galime aproksimuoti ir tokia baigtinių skirtumų formule

$$v_{\bar{t}} \equiv \frac{v^n - v^{n-1}}{\tau} = v'(t_n) - \frac{\tau}{2} v''(t_n - \Theta\tau) \,, \quad 0 < \Theta < 1 \,. \tag{1.4}$$

Iš (1.3) ir (1.4) lygybių matyti, kad baigtinių skirtumų formulės v_t ir $v_{\bar{t}}$ aproksimuoja išvestinės $v'(t_n)$ reikšmę $\mathcal{O}(\tau)$ tikslumu.

Galima sudaryti ir tikslesnes baigtinių skirtumų formules. Nagrinėkime *centrinių skirtumų* formulę

$$v_{\overset{\circ}{t}} = \frac{v^{n+1} - v^{n-1}}{2\tau} \,.$$

Vėl naudodami Teiloro skleidinį gausime

$$v_{\overset{\circ}{t}} = v'(t_n) + \frac{\tau^2}{6} v'''(t_n + \Theta\tau) \,, \quad |\Theta| < 1 \,. \tag{1.5}$$

Ta pati baigtinių skirtumų formulė gali skirtingu tikslumu aproksimuoti funkcijos išvestinės reikšmę skirtinguose taškuose. Pavyzdžiui, v_t yra tikslesnis išvestinės $v'(t)$ artinys taške $\bar{t} = t_n + \frac{1}{2}\tau$ (žr. (1.5) lygybę):

$$v_t = v'(\bar{t}) + \frac{\tau^2}{24} v'''(\bar{t} + \Theta\tau) \,, \quad |\Theta| < \frac{1}{2} \,.$$

Išreikštinis Eulerio metodas

Diferencialinėje lygtyje (1.1) pakeiskime išvestinę baigtinių skirtumų formule (1.2), tada taške $t = t_n$ gausime baigtinių skirtumų lygtį

$$\frac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = F(t_n, Y^n) \,. \tag{1.6}$$

Prie (1.6) lygčių sistemos prijungiame pradinę sąlygą

$$Y^0 = U_0 \,. \tag{1.7}$$

Baigtinių skirtumų lygtys (1.6), $n = 0, 1, \ldots, N-1$ ir pradinė sąlyga (1.7) sudaro *baigtinių skirtumų pradinį uždavinį.*

Tokį metodą realizuoti labai paprasta, nes sprendinio reikšmės apskaičiuojamos pagal išreikštinę formulę

$$Y^{n+1} = Y^n + \tau_{n+1} F(t_n, Y^n)\,. \tag{1.8}$$

Pateiksime kitą išreikštinio Eulerio metodo interpretaciją. Suintegravę intervale $[t_n, t_{n+1}]$ (1.1) lygtį, gausime lygybę

$$u^{n+1} = u^n + \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{dU}{dt}\, dt = u^n + \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} F(t, U)\, dt\,. \tag{1.9}$$

Integralą aproksimuokime kairiųjų stačiakampių formule. Gauname lygtį

$$Y^{n+1} = Y^n + \tau_{n+1} F(t_n, Y^n)\,,$$

sutampančią su (1.8) lygtimi.

Neišreikštinis Eulerio metodas

Jeigu (1.9) lygtyje 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. Sprendinio Y^{n+1} artinį apskaičiuojame tokiu iteraciniu metodu

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

Iteracijas skaičiuosime tol, kol bus išpildyta konvergavimo sąlyga

$$\|\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\| \le \frac{1-q}{q}\,\varepsilon\,, \quad 0 < q < 1. \tag{1.13}$$

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

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

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

$$\|F(t, V)\| \le M_0, \quad \|F(t, U) - F(t, V)\| \le L\|U - V\|\,. \tag{1.14}$$

1.1 teorema. *Jei yra teisingos* (1.14) *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.*

Teoremos įrodyme užtenka įsitikinti, kad iteracijų seka yra fundamentalioji (arba Košy seka).

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

$$\Big(I - \tau_{n+1} J_{n+1}\big(\overset{s}{Y}\big)\Big)\Big(\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\Big) = -\overset{s}{Y} + Y^n + \tau_{n+1} F\Big(t_{n+1}, \overset{s}{Y}\Big), \tag{1.15}$$

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

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

Dažniausiai $J_{n+1}(Y)$ koeficientus apskaičiuojame naudodami 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 $E_j = (\delta_{1j}, \delta_{2j}, \ldots, \delta_{Mj})^T$, pavyzdžiui,

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

Realizuodami Niutono metodą kiekvienoje iteracijoje turime apskaičiuoti matricą $J_{n+1}\big(\overset{s}{Y}\big)$ ir išspręsti tiesinių lygčių sistemą (1.15). 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*

$$\begin{aligned} &\|F(t_{n+1}, Y)\| \le M_0, \quad \|H_k(t_{n+1}, Y)\| \le M_2, \\ &\big\| \left(I - \tau_{n+1} J_{n+1}(Y)\right)^{-1} \big\| \le \frac{1}{M_1}, \;\; k = 1, \ldots, M, \end{aligned} \tag{1.16}$$

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 (1.15) *konverguoja į* (1.11) *lygčių sistemos sprendinį ir galioja iteracijų paklaidos įvertis*

$$\big\|Y^{n+1} - \overset{s+1}{Y}\big\| \le \frac{\tau_{n+1} M_2}{2M_1} \, \big\|Y^{n+1} - \overset{s}{Y}\big\|^2. \tag{1.17}$$

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

Simetrinis Eulerio metodas

Išvesdami išreikštinio ir neišreikštinio Eulerio metodo formules (1.9) 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:

$$\frac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = \frac{F(t_{n+1}, Y^{n+1}) + F(t_n, Y^n)}{2}. \tag{1.18}$$

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

$$Y^{n+1} - \frac{\tau_{n+1}}{2} F(t_{n+1}, Y^{n+1}) = Y^n + \frac{\tau_{n+1}}{2} F(t_n, Y^n). \tag{1.19}$$

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

Rungės ir Kuto metodas

Prediktoriaus-korektoriaus metode pavyksta apjungti svarbiausius išreikštinio ir simetrinio Eulerio algoritmų privalumus (deja, neišnyksta algoritmo sąlyginio stabilumo problema). Rungės ir Kuto (*Runge - Kutta*) metode ši įdėja apibendrinima, kai viename žingsnyje funkcijos $F(t, U)$ reikšmės skaičiuojamos keliuose taškuose. Juos parenkame taip, kad gautojo artinio tikslumas būtų kuo didesnis.

Nagrinėsime m- pakopį išreikštinį Rungės ir Kuto metodą. Sakykime, kad turime koeficientų lentelę, kuri dar vadinama Rungės ir Kuto metodo matrica:

$$\begin{array}{c|ccccc}
a_2 & b_{21} & & & & \\
a_3 & b_{31} & b_{32} & & & \\
\vdots & \dots & \dots & \dots & & \\
a_m & b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{m,m-1} & \\
\hline
 & \sigma_1 & \sigma_2 & \cdots & \sigma_{m-1} & \sigma_m
\end{array}$$

Tada nuosekliai apskaičiuojame išraiškas

$$\begin{cases}
K_1 = F(t_n, Y^n), \\
K_2 = F(t_n + a_2\tau_{n+1}, Y^n + \tau_{n+1} b_{21} K_1), \\
K_3 = F\big(t_n + a_3\tau_{n+1}, Y^n + \tau_{n+1}(b_{31}K_1 + b_{32}K_2)\big), \\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\
K_m = F\big(t_n + a_m\tau_{n+1}, Y^n + \tau_{n+1} \sum\limits_{j=1}^{m-1} b_{mj}K_j\big).
\end{cases} \tag{1.20}$$

Y^{n+1} reikšmė apskaičiuojama išreikštine formule

$$Y^{n+1} = Y^n + \tau_{n+1} \sum_{j=1}^{m} \sigma_j K_j \, . \tag{1.21}$$

Taigi realizuodami m-pakopio Rungės ir Kuto metodo algoritmą funkcijos $F(t, U)$ reikšmes skaičiuojame m skirtinguose intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ taškuose.

1.1 pavyzdys. Dvipakopis Rungės ir Kuto metodo algoritmas. Prediktoriaus-korektoriaus metodo algoritmai yra atskiri dvipakopio Rungės ir Kuto metodo atvejai. Jų koeficientų lentelės ir realizavimo formulės tokios:

1 algoritmas

$$\begin{array}{c|cc} 1 & 1 & \\ \hline & 0,5 & 0,5 \end{array}$$

$$\begin{cases} K_1 = F(t_n, Y^n) \, , \\ K_2 = F(t_n + \tau_{n+1}, Y^n + \tau_{n+1} K_1) \, , \\ \dfrac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = \dfrac{K_1 + K_2}{2} \, . \end{cases}$$

2 algoritmas

$$\begin{array}{c|cc} 0,5 & 0,5 & \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

$$\begin{cases} K_1 = F(t_n, Y^n), \\ K_2 = F\big(t_n + \frac{1}{2}\tau_{n+1}, Y^n + \frac{1}{2}\tau_{n+1} K_1\big), \\ \dfrac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} = K_2 \, . \end{cases}$$

Rungės ir Kuto metodo koeficientų radimas. Algoritmo koeficientai a_i, b_{ij}, σ_i parenkami taip, kad metodo aproksimacijos tikslumas būtų didžiausias. Išnagrinėsime dvipakopį Rungės ir Kuto metodą. Iš šio pavyzdžio bus aišku, kaip koeficientai randami ir bendruoju atveju.

Imsime vienos diferencialinės lygties atvejį (t.y. $M = 1$). Lygčių sistemų analizė atliekama visiškai taip pat, be to, tik Rungės ir Kuto metodams, kurių tikslumo eilė didesnė už ketvirtąją, atsiranda papildomų lygčių, kurias turi tenkinti metodo koeficientai. Kadangi paprastai randame ne konkretų vienintelį nurodyto tikslumo Rungės ir Kuto metodą, o metodų šeimą, priklausančią nuo kelių laisvų parametrų, tai dažniausiai pavyksta patenkinti ir šias papildomas lygtis.

Dvipakopio Rungės ir Kuto metodo formulėse yra keturi laisvi parametrai a_2, b_{21}, σ_1, σ_2:

$$\begin{aligned} &K_1 = f(t_n, y^n), \quad K_2 = f(t_n + a_2\tau, y^n + b_{21}\tau K_1), \\ &y^{n+1} = y^n + \tau(\sigma_1 K_1 + \sigma_2 K_2)\,. \end{aligned}$$

Perrašykime paskutiniąją lygybę standartine forma:

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = \sigma_1 f(t_n, y^n) + \sigma_2 f\big(t_n + a_2\tau, y^n + b_{21}\tau f(t_n, y^n)\big)\,.$$

Priminsime, kad aproksimavimo paklaida vadinamas dydis, gaunamas įrašius į baigtinių skirtumų lygtį PDL pradinio uždavinio sprendinį, taigi Rungės ir Kuto algoritmo aproksimavimo paklaida yra

$$\psi^n = \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} - \sigma_1 f(t_n, u^n) - \sigma_2 f\big(t_n + a_2\tau, u^n + \tau b_{21} f(t_n, u^n)\big)\,.$$

Tarkime, kad diferencialinio uždavinio (1.1) sprendinys ir funkcija $F(t, U)$ tenkina tokias glodumo sąlygas

$$\begin{aligned} &|u_i'''(t)| \le C_3, \quad i = 1, 2, \cdots, M, \quad t \in [0, T]\,, \\ &\Big|\frac{\partial^2 f_i(t, U)}{\partial t^\alpha\, \partial u_j^\beta\, \partial u_k^\gamma}\Big| \le M_2, \quad \alpha + \beta + \gamma = 2\,. \end{aligned}$$

Tada teisingi tokie Teiloro skleidiniai:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = u'(t_n) + \frac{\tau}{2} u''(t_n) + \mathcal{O}(\tau^2)\,,$$

$$\begin{aligned} f\big(t_n + a_2\tau, u^n + \tau b_{21} f(t_n, u^n)\big) &= f(t_n, u^n) + \tau a_2 \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial t} \\ &\quad + \tau b_{21} f(t_n, u^n) \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial u} + \mathcal{O}(\tau^2)\,. \end{aligned}$$

Diferencijuodami (1.1) lygtį t atžvilgiu, išreiškiame sprendinio išvestinę:

$$u'' = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u} u' = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u} f \,.$$

Įrašę šiuos skleidinius į aproksimavimo paklaidos išraišką, gausime lygybę

$$\begin{aligned} \psi^n = (1 - \sigma_1 - \sigma_2) f(t_n, u^n) + \tau\big(0,5 - \sigma_2 a_2\big) \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial t} \\ + \tau(0,5 - \sigma_2 b_{21}) f(t_n, u^n) \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial u} + \mathcal{O}(\tau^2) \,. \end{aligned}$$

Norėdami gauti antrosios tikslumo eilės aproksimaciją, sudarome lygčių sistemą

$$\begin{cases} \sigma_1 + \sigma_2 = 1 \,, \\ \sigma_2 a_2 = 0,5 \,, \\ \sigma_2 b_{21} = 0,5 \,. \end{cases}$$

Taigi keturiems dvipakopio Rungės ir Kuto metodo koeficientams nustatyti gavome tris lygtis. Todėl vienas parametras lieka laisvas, tai yra sukonstravome Rungės ir Kuto metodų šeimą, priklausančią nuo parametro σ:

$$\begin{array}{c|cc} \dfrac{1}{2\sigma} & \dfrac{1}{2\sigma} & \\ \hline & 1 - \sigma & \sigma \end{array}$$

Jos skaičiavimo formulės diferencialinių lygčių sistemoms yra tokios:

$$\begin{cases} K_1 = K(t_n, Y^n) \,, \\ K_2 = F\big(t_n + \dfrac{\tau}{2\sigma}, Y^n + \dfrac{\tau}{2\sigma} K_1\big) \,, \\ Y^{n+1} = Y^n + \tau\big((1 - \sigma) K_1 + \sigma K_2\big). \end{cases}$$

Imdami $\sigma = 1$ ir $\sigma = 0,5$ gauname du atskirus šios Rungės ir Kuto metodo šeimos algoritmus, išnagrinėtus 1.1 pavyzdyje.

Jeigu Teiloro skleidiniuose būtume išrašę ir $\mathcal{O}(\tau^2)$ eilės narius, tai būtume galėję įsitinkinti, kad vieno papildomo parametro neužteks visus juos prilyginti nuliui.

Daugiapakopiai Rungės ir Kuto algoritmai. Panaši analizė rodo, kad ir kitoms m reikšmėms gauname ne vieną konkretų Rungės ir Kuto metodą, o metodų šeimą, priklausančią nuo vieno ar kelių parametrų.

Šiuos parametrus parenkame remdamiesi papildomais kriterijais: algoritmo realizavimo ekonomiškumu, stabilumo reikalavimu ir kitais. Pažymėsime, kad Rungės ir Kuto metodo pakopų skaičius (o kartu ir funkcijos $F(t, U)$ reikšmių skaičiavimo skaičius) didėja greičiau nei metodo aproksimacijos tikslumo eilė. Šie duomenys pateikti 1.1 lentelėje.

1.1 lentelė. Rungės ir Kuto metodo aproksimacijos tikslumo eilės priklausomybė nuo etapų skaičiaus

Etapų skaičius	m	1	2	3	4	5	6	7	8
Tikslumo eilė	p	1	2	3	4	4	5	6	6

Pateiksime skaičiavimo praktikoje dažniausiai naudojamų Rungės ir Kuto algoritmų koeficientus:

$$m = 3,\ p = 3\ :$$

$$\begin{array}{c|ccc} 0{,}5 & 0{,}5 & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{4}{6} & \frac{1}{6} \end{array} \qquad \begin{array}{c|ccc} 0{,}5 & 0{,}5 & & \\ 0{,}75 & 0 & 0{,}75 & \\ \hline & \frac{2}{9} & \frac{1}{3} & \frac{4}{9} \end{array} \tag{1.22}$$

$$m = 4,\ p = 4\ :$$

$$\begin{array}{c|cccc} 0,5 & 0,5 & & & \\ 0{,}5 & 0 & 0{,}5 & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \qquad \begin{array}{c|cccc} 0{,}5 & 0{,}5 & & & \\ 0,5 & \frac{\sqrt{2}-1}{2} & \frac{2-\sqrt{2}}{2} & & \\ 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{2+\sqrt{2}}{2} & & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2-\sqrt{2}}{6} & \frac{2+\sqrt{2}}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Daugiažingsniai baigtinių skirtumų metodai

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

$$\frac{a_0 Y^n + a_1 Y^{n-1} + \cdots + a_m Y^{n-m}}{\tau_n} = b_0 F_n + b_1 F_{n-1} + \cdots + b_m F_{n-m}\,, \quad (1.23)$$

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:

$$\sum_{k=0}^{m} b_k = 1\,. \quad (1.24)$$

Algoritmo (1.23) 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.

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.

Adamso metodas. Parodysime, kaip parenkami daugiažingsnio metodo koeficientai, tai yra kaip sudaromi konkretūs daugiažingsniai diferencialinių lygčių integravimo algoritmai.

Nagrinėsime atskirą (1.23) metodo klasę, vadinamą *Adamso metodu*:

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = \sum_{k=0}^{m} b_k F(t_{n-k}, Y^{n-k})\,. \quad (1.25)$$

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

$$u(t_n) = u(t_{n-1}) + \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t, u)\, dt\,. \tag{1.26}$$

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 $P_{m-1}(t_{n-1}, t)$:

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

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 1.2 lentelėje.

1.2 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):

$$\begin{aligned}\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} &= F_{n-1} + \frac{1}{2}\nabla F_{n-1} + \frac{5}{12}\nabla^2 F_{n-1} \\ &+ \cdots + \int_0^1 \frac{\big((s+(m-2)\big)\cdots(s+1)s}{(m-1)!}\ ds\ \nabla^{m-1} F_{n-1}\,.\end{aligned} \tag{1.27}$$

Pakeitę $\nabla^k F_{n-1}$ funkcijos F reikšmėmis, gausime (1.25) formulę.

1.2 pavyzdys. Keturžingsnis Adamso ir Bashfortho metodas. Metodo (1.27) 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 1.2 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

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

Visi Adamso ir Bashfortho metodo algoritmai yra išreikštiniai.

Neišreikštinis m-žingsnis Adamso ir Moultono metodas apibrėžiamas lygybe

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = \frac{1}{\tau}\int_{t_{n-1}}^{t_n} P_m(t_n, t)\ dt \equiv F_n - \frac{1}{2}\nabla F_n \tag{1.28}$$

$$- \cdots - \int\limits_0^1 \frac{\big(s + (m-1)\big)\cdots(s+1)s}{m!}\ ds\ \nabla^m F_n\,.$$

Pakeitę $\nabla^k F_n$ funkcijos F reikšmėmis, gauname Adamso ir Moultono algoritmo formulę.

1.3 pavyzdys. Trižingsnis Adamso ir Moultono metodas. 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 1.2 lentele, pakeičiame baigtinius skirtumus išreikštinėmis formulėmis ir gauname tokią trižingsnio Adamso ir Moultono metodo lygtį:

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

Neapibrėžtinių koeficientų metodas. Nagrinėkime m-žingsnį Adamso ir Bashfortho metodą. (1.26) lygtyje aproksimuokime integralą baigtine suma

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t, u)\ dt \approx \tau(b_1 f_{n-1} + b_2 f_{n-2} + \cdots + b_m f_{n-m}).$$

Koeficientus $b_1, b_2, \ldots, b_m$ parinksime taip, kad ši formulė tiksliai integruotų visus daugianarius, kurių laipsnis yra ne didesnis už $(m-1)$. Formulėje

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} g(t)\ dt = \tau(b_1 g_{n-1} + b_2 g_{n-2} + \cdots + b_m g_{n-m})$$

pakeitę nepriklausomą kintamąjį $t = t_{n-1} + x\tau$ ir pažymėję

$$G(x) = g(t_{n-1} + x\tau)\,,$$

gausime lygybę

$$\int\limits_0^1 G(x)\; dx = b_1 G(0) + b_2 G(-1) + \cdots + b_m G\big(-(m-1)\big). \tag{1.29}$$

Todėl apibrėžiant koeficientus b_j užtenka nagrinėti šią formulę.

Daugianarių, kurių laipsnis yra ne didesnis už $(m-1)$, aibėje imkime tokią bazę

$$\begin{cases} p_0(x) = 1, \\ p_1(x) = x, \\ p_2(x) = x(x+1), \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ p_{m-1}(x) = x(x+1)\cdots(x+m-2). \end{cases}$$

Šiems daugianariams (1.29) formulė turi būti tiksli, taigi gauname tiesinių lygčių sistemą

$$\begin{cases} b_1 + b_2 + b_3 + \cdots \qquad + b_m = 1 \\ \quad -b_2 - 2b_3 - \cdots \qquad - (m-1)b_m = \dfrac{1}{2} \\ \qquad 2b_3 + \cdots \quad +(m-1)(m-2)b_m = \dfrac{5}{6} \\ \qquad\quad \cdots \qquad \cdots\cdots\cdots \qquad \cdots \\ \qquad\qquad (-1)^{m-1}(m-1)!\; b_m = \int\limits_0^1 p_{m-1}(x)\; dx\,. \end{cases} \tag{1.30}$$

Kadangi lygčių sistemos matrica yra viršutinė trikampė, tai nesunkiai apskaičiuojame koeficientus $b_m,\ b_{m-1}, \ldots,\ b_1$.

1.4 pavyzdys. Penkiažingsnis Adamso ir Bashfortho metodas. Sudarykime (1.30) tiesinių lygčių sistemą, kai $m = 5$

$$\begin{cases} b_1 + b_2 + b_3 + b_4 + b_5 = 1 \\ \quad - b_2 - 2b_3 - 3b_4 - 4b_5 = \dfrac{1}{2} \\ \quad 2b_3 + 6b_4 + 12b_5 = \dfrac{5}{6} \\ \quad -6b_4 - 24b_5 = \dfrac{9}{4} \\ \quad 24b_5 = \dfrac{251}{30}\,. \end{cases}$$

Išsprendę šią sistemą, gauname penkiažingsnio Adamso ir Bashfortho metodo formulę

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau} = \frac{1}{720}\big(1901F_{n-1} - 2774F_{n-2} + 2616F_{n-3} - 1274F_{n-4} + 251F_{n-5}\big)\,.$$

Daugiažingsnio metodo koeficientų skaičiavimas

Daugiažingsnio metodo (1.23) koeficientus parinksime taip, kad gautojo metodo aproksimacijos tikslumo eilė būtų didžiausia. Pagal apibrėžimą aproksimavimo paklaida yra lygi

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

Naudodamiesi sprendžiama diferencialine lygtimi, pertvarkykime aproksimavimo paklaidos išraišką

$$\Psi^n = \sum_{k=0}^{m} \Big(\frac{a_k}{\tau} u^{n-k} - b_k u'(t_{n-k})\Big)\,. \tag{1.31}$$

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 (1.31) 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:

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=0}^{m} a_k = 0\,, \\ \sum\limits_{k=0}^{m} k^{l-1}(ka_k + lb_k) = 0\,, \quad l = 1, 2, \ldots, p\,. \end{cases} \tag{1.32}$$

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:

$$a_0 = -\sum_{k=1}^{m} a_k, \quad b_0 = 1 - \sum_{k=1}^{m} b_k\,. \tag{1.33}$$

Kitus koeficientus rasime išsprendę tiesinių lygčių sistemą

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=0}^{m} ka_k = -1\,, \\ \sum\limits_{k=0}^{m} k^{l-1}(ka_k + lb_k) = 0\,, \quad l = 2, 3, \ldots, p\,. \end{cases} \tag{1.34}$$

Matome, kad (1.23) daugiažingsnio metodo aproksimacijos tikslumo eilė negali būti didesnė už $2m$. Išreikštinės schemos atveju, kai $b_0 = 0$, didžiausia aproksimacijos eilė yra $2m-1$.

1.5 pavyzdys. Dvižingsnis neišreikštinis metodas. Sudarykime (1.34) 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 (1.33) lygčių apskaičiuojame koeficientus a_0, b_0. Sudarėme dvižingsnį neišreikštinį metodą

$$\frac{Y^n - Y^{n-2}}{2\tau} = \frac{1}{6}\big(F_n + 4F_{n-1} + F_{n-2}\big)\,, \tag{1.35}$$

kurio aproksimacijos tikslumo eilė yra ketvirtoji.