Numeryczne rozwiązywanie równań różniczkowych zwyczajnych cz. II
Metody wielokrokowe i metody predyktor–korektor

Ćwiczenia z Metod Numerycznych II A
rok akademicki 2001/2002
seria 7

Jakub Narębski Tomasz Pawłowski

9 maja 2002 roku

1 Równania różniczkowe

1.1 Zagadnienie początkowe Cauchy'ego

Zajmijmy się rozwiązaniem metod numerycznych rozwiązania równań różniczkowych zwyczajnych pierwszego rzędu, t.j. równań postaci

$$y' = f(x, y), \tag{1.1.1}$$

gdzie f jest dana funkcją dwu zmiennych. Funkcje $y = y(x)$ określona i różniczkowalna dla x należących do ustalonego przedziału $[a, b]$ nazywamy rozwiązaniem równania (1.1.1), jeśli $y'(x) = f(x, y(x))$ dla $x \in [a, b]$.

Równanie (1.1.1) może mieć wiele rozwiązań, np. rozwiązaniem równania $y' = y$ jest każda funkcja postaci $y(x) = Ce^x$, gdzie $C \in \mathbb{R}$. Narzucenie odpowiedniego dodatkowego warunku na szukane rozwiązanie zapewnia jego jednoznaczność. My zajmiemy się wyłącznie równaniami pierwszego rzędu z warunkiem początkowym $y(a) = y_a$

Tego typu zagadnienie początkowe

$$y'(x) = f(x, y(x)) \qquad \text{dla } x = [a, b] \tag{1.1.2a}$$
$$y(a) = y_a \tag{1.1.2b}$$

zwane jest *zagadnieniem Cauchy'ego.* Może ono mieć jedno lub wiele rozwiązań bądź być sprzeczne. Poniższe twierdzenie określa warunek wystarczający istnienia i jednoznaczności rozwiązania zagadnienia (1.1.2).

Twierdzenie 1 *Jeżeli $f(x,y)$ jest funkcja ciągłą zmiennej x dla $x \in [a, b]$ i spełnia* warunek Lipschitza *ze względu na y, tzn. istnieje taka stała L, że* *dla dowolnych rzeczywistych y_1, y_2 i dla każdego $x \in [a,b]$ jest spełniona nierówność $|f(x,y_1) - f(x,y_2)| \leq L|y_1 - y_2|$ to dla każdego skończonego y_a istnieje dokładnie jedna funkcja $y(x)$ ciągła i różniczkowalna na $[a,b]$ taka, że $y'(x) = f(x, y(x))$ oraz $y(a) = y_a$*

1.2 Metody różnicowe

Metody przybliżonego całkowania zagadnień początkowych (1.1.2) można podzielić na dwie istotnie różne klasy. Pierwsza, rzadziej używana w rachunku numerycznym, jest klasa metod zmierzających do wyznaczenia jakiejś analitycznej postaci rozwiązania, np. rozwinięcia w szereg potęgowy czy w szereg Fouriera. Metody tego rodzaju maja dwie istotne wady. Stosują się do bardzo wąskiej klasy zadań, a otrzymane szeregi bywają bardzo wolno zbieżne. Ponadto łatwo zauważyć, że rachunek numeryczny przy wyznaczaniu przybliżeń takich analitycznych postaci spełnia w gruncie rzeczy mniej istotną, drugorzędną rolę.

Druga, bardziej uniwersalną klasę metod polegającą na tablicowaniu poszukiwanej funkcji stanowi tzw. klasa *metod różnicowych.* Wyznaczają one jedynie przybliżenia wartości rozwiązania $y(x_i)$ w pewnych punktach x_i należących do przedziału całkowania $[a,b]$. Tutaj będziemy się zajmowali przypadkiem, w którym $x_i = a + ih$ dla $i = 0, 1, \ldots, N$, gdzie wielkość $h = \frac{b-a}{N}$ nazywamy *krokiem całkowania.*

Główny postulat jaki muszą spełniać metody różnicowe, to zbieżność wyznaczanych przez nie przybliżeń $y_i = y_i(h)$, tzn. $y_i(h) \to y(x)$ przy $h \to 0$ dla każdego ustalonego $x = a + ih$. Jest to oczywiście jedynie 'teoretyczna' własność metody. Realizując ja numerycznie możemy uzyskać przybliżenie rozwiązania jedynie z określona skończoną dokładnością.

Będziemy rozważali dwie klasy metod różnicowych. *Metody jednokrokowe* konstruujące ciąg przybliżeń $y_i \approx y(x_i)$ dla $i = 0, 1, \ldots, N$ zgodnie ze wzorem

$$y_{i+1} = y_i + h\Phi_f(x_i, y_i; h), \quad i = 0, 1, \ldots, N-1 \tag{1.2.1a}$$

$$y_0 = y_a \tag{1.2.1b}$$

gdzie funkcja $\Phi = \Phi_f$ może zależeć od f nieliniowo. Druga klasą będa *liniowe metody wielokrokowe.*

1.3 Metody jednokrokowe

1.3.1 Metoda Eulera i jej modyfikacje

Niech $x_i = a + ih, i = 0, 1, \ldots, N$ gdzie $h = \frac{b-a}{N}$. Pochodną $y'(x)$ przybliżamy ilorazem roznicowym opartym na węzłach x i $x + h$. Wowczas jeśli funkcja $f \in \mathcal{C}^1_{[a,b]}$, rozwiązanie y równania (1.1.1) jest klasy $\mathcal{C}^2_{[a,b]}$ i ze wzoru Taylora z resztą otrzymamy równość

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} + \frac{h}{2}y''(\zeta), \quad \zeta \in [x, x+h]$$

Ponieważ $y(x)$ spełnia równanie (1.1.2), więc w punktach $x = x_i$ zachodzi

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + g_i, \tag{1.3.1a}$$

$$y(a) = y_a, \tag{1.3.1b}$$

gdzie z rozwinięcia Taylora mamy następujące oszacowanie na g_i

$$|g_i| \leq M_2 h^2, \quad M_2 = \max_{x\in[a,b]} \frac{|y''(x)|}{2} \tag{1.3.2}$$

Odrzucając we wzorze (1.3.1) nieznane składniki g_i otrzymujemy metodę Eulera konstruującą ciąg przybliżeń y_i

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) \quad \text{dla } i = 0, 1, \ldots, N-1 \tag{1.3.3a}$$
$$y_0 = y_a \tag{1.3.3b}$$

Metoda Eulera mimo swej prostoty jest już rzadko stosowana ze względu na bardzo wolną zbieżność. Istnieją dwie proste, szybciej zbieżne jej modyfikacje takie, że $e_i = e_i(h) = \mathcal{O}(h^2)$

- 'ulepszona metoda Eulera' (metoda Heuna)
  $y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}h(f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hf(x_i, y_i)))$
- zmodyfikowana metoda Eulera
  $y_{i+1} = y_i + hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hf(x_i, y_i))$

Metoda Eulera ma prosta interpretacje geometryczną. Rozpoczynając od punktu (a, y_a) leżącego na krzywej całkowej będącej rozwiązaniem zagadnienia (1.1.2) posuwamy się tak długo po stycznych do wykresów całek równania (1.1.1) przechodzących przez kolejno otrzymywane punkty (x_i, y_i) aż osiągniemy punkt odciętej o h większej niż początkowy punkt na danej stycznej.

1.3.2 Metody Rungego–Kutty

Klasa metod Rungego–Kutty (RK) jest zdefiniowana przez rodzinę funkcji Φ postaci

$$\Phi(x, y; h) = \sum_{i=1}^{r} c_i k_i \tag{1.3.4a}$$
$$\begin{aligned} k_i &= k_i(x, y; h) \qquad (1.3.4\text{b}) \\ &= f(x + h\sum_{j=1}^{r} b_{ij}, y + h\sum_{j=1}^{r} b_{ij}k_j) \quad \text{dla } i = 1, 2, \ldots, r \end{aligned}$$

zależnych parametrycznie od wielkości $c_i, b_{ij}, i, j = 1, 1, \ldots, r$. Jeżeli wszystkie $b_{ij} = 0$ dla $j \geq i, i = 1, 2, \ldots, r$ to równania definiujące wielkości k_i (przy ustalonych x i y) redukują się do postaci

$$k_i = f(x + h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}, y + h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}k_j) \quad \text{dla } 1, 2, \ldots, r. \tag{1.3.5}$$

Stanowią więc układ zależności rekurencyjnych, liniowych ze względu na kolejne k_i. Ten typ metod RK nosi nazwę *otwartych*. Przy ustalonym r koszt jednego kroku metody (tzn. obliczenia kolejnego y_i) jest równy kosztowi obliczenia r wartości funkcji f i nie zależy od wyboru parametrów c_i, b_{ij}. Wielkości te dobiera się tak, aby przy ustalonym r rząd metody był możliwie najwyższy, wtedy bowiem metoda jest najbardziej efektywna. Można pokazać, że maksymalny rząd ($p(r)$) metody RK korzystającej z r wartości funkcji jest równy r dla $r = 1, 2, 3, 4$ oraz, że dla dowolnych r jest $p(r) \leq r$.

Najczęściej stosowana jest tzw. klasyczna metoda RK, czyli metoda czwartego rzędu określona wzorami

$$\Phi(x, y; h) = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \tag{1.3.6a}$$

$$k_1 = f(x, y) \tag{1.3.6b}$$

$$k_2 = f\left(x + \frac{1}{2}h, y + \frac{1}{2}hk_1\right) \tag{1.3.6c}$$

$$k_3 = f\left(x + \frac{1}{2}h, y + \frac{1}{2}hk_2\right) \tag{1.3.6d}$$

$$k_4 = f(x + h, y + hk_3) \tag{1.3.6e}$$

1.4 Liniowe metody wielokrokowe

1.4.1 Jawne i niejawne metody wielokrokowe

Omawiane wcześniej metody jednokrokowe maja jedna wspólną cechę. Dla wyznaczenia kolejnego przybliżenia y_{i+1} używa się jedynie wartości x_i, y_i, f_i z ostatniego punktu. Nie stosuje się natomiast wartości $x_{i-j}, y_{i-j}, f_{i-j}$. Podwyższenie rzędu metody, a zatem i szybkości jej zbieżności odbywa się jedynie poprzez zwiększenie informacji (np. użycie więcej wartości funkcji lub pochodnych). Jednocześnie procedura przetworzenia tej informacji dla otrzymania nowego przybliżenia jest bardzo prosta i mało kosztowna. Płynie stąd wniosek, że jeśli koszt policzenia informacji o funkcji jest mały (np. tanio obliczamy wartość funkcji), to może opłacać się stosowanie metody jednokrokowej korzystającej w każdym kroku z tej właśnie informacji. Jeśli natomiast ten koszt jest duży, to chcielibyśmy możliwie jak najrzadziej obliczać wartości funkcji w nowych punktach. Wtedy zastosujemy metodę wielokrokową.

Niech tak jak w poprzednio przedział $[a, b]$ będzie podzielony na N równych co do długości podprzedziałów punktami $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, \ldots, N$, $h = \frac{b-a}{N}$. Liniową metoda k-krokowa (k-stopniowa) (gdzie k jest dana liczba naturalną) konstruuje ciąg przybliżeń wartości $y(x_i)$ rozwiązania zagadnienia (1.1.2) spełniający zależności

$$\alpha_k y_{i+k} + \cdots + \alpha_1 y_{i+1} + \alpha_0 y_i = h(\beta_k f_{i+k} + \cdots + \beta_1 f_{i+1} + \beta_0 f_i), \tag{1.4.1}$$

gdzie

$$f_j = f(x_j, y_j) \qquad \alpha_k \neq 0 \qquad |\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0 \tag{1.4.2}$$

A zatem korzysta w każdym kroku z k starych, poprzednio obliczonych wartości f_{i+j} dla $j = 0, 1, \ldots, k-1$ oraz jednej nowej wartości funkcji f_i. Liniowość metody oznacza jej liniową zależność od wartości funkcji f.

Wyróżnia się dwa typy liniowych metod wielokrokowych:

a) Niejawne (zamknięte) : $y_{i+1} = \text{coś} + f_{i+1}$ — po prawej stronie występuje zależność od y_{i+1}.

b) Jawne (otwarte) : po prawej stronie nigdzie nie pojawia się y_{i+1}.

Przykładami liniowych metod wielokrokowych są:

Jawne:

1. $y_{i+1} = y_i + hf_i$
2. $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(3f_i - f_{i-1})$
3. $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12}(23f_i - 16f_{i-1} + 5f_{i-2})$
4. $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(55f_i - 59f_{i-1}) + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}$
5. $y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf_i$
6. $y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4}{3}h(2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2})$

Niejawne:

7. $y_{i+1} = y_i + hf_{i+1}$
8. $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f_{i+1} + f_i)$
9. $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12}(5f_{i+1} + 8f_i - f_{i-1})$
10. $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(9f_{i+1} + 19f_i) - 5f_{i-1} + f_{i-2}$
11. $y_{i+1} = \frac{1}{8}(9y_i - y_{i-2}) + \frac{3}{8}h(f_{i+1} + 2f_i - f_{i-1})$

Metody 1–4 są to metody Adamsa–Bashfortha (rzędu 1–4), 7–10 Adamsa–Moultona (rzędu 1–4), 5. to tzw. schemat punktu pośredniego (metoda midpoint) o bardzo dobrych właściwościach, 6. to wzór Milne'a albo Nyströma (rzędu 4.), a 11. wzór Hamminga (rzędu 4.).

Pojawia się problem: skąd wziąć startowe wartości y_i potrzebne przy obliczaniu f_i dla $i = 0, 1, \ldots, k-1$? (inaczej — jest to pytanie o procedurę startową). Okazuje się, że wystarczy obliczać te y_i dowolną zbieżną metoda jednokrokowa, przyjmujac $y_0 = y_a$. Najczęściej stosuje się jakiś wariant metody RK.

Wiekszy problem stanowia metody niejawne (zamknięte) - po prawej stronie występuje przeciez obliczane y_{i+1}. Mają one za to lepsze własności numeryczne. Łączy się je z metodami jawnymi w jedna metodę typu predyktor–korektor.

1.4.2 Wyznaczanie wzorów na metody wielokrokowe

Wzór różnicowy (1.4.1) zależy od $2k + 1$ współczynników (zawsze można unormować współczynniki tak aby $\alpha_k = 1$). Jeśli współczynniki te określimy tak, by rząd metody osiągnął zadaną wartość (dla k parzystego maksymalny rząd metody to $(k+2)$, a dla k nieparzystego $(k+1)$) oraz metoda była zbieżna, to pozostanie pewna liczba wolnych parametrów które można wykorzystać do zwiększenia obszaru stabilności metody, zmniejszenia wzpółczynnika w oszacowaniu błędu oraz ułatwienia wykonywania obliczeń (zerowe współczynniki).

Większość najczęsciej stosowanych metod wielokrokowych można wyprowadzić za pomocą metody Newtona–Cotesa całkowania numerycznego (interpolacji całki kwadraturami o równoodległych węzłach). Całkując równanie $y'(x) =$

$f(x, y(x))$ (patrz (1.1.1)) na przedziale $[x_{i-l}, x_{i+r}]$ dostajemy następujące równanie całkowe (równoważne (1.1.1))

$$y(x_{i+r}) = y(x_{i-l}) + \int_{x_{i-l}}^{x_{i+r}} f(x, y(x))\, dx \tag{1.4.3}$$

Całkowaną niewiadoną funkcję $f(x, y(x))$ (nieznaną ze względu na nieznane $y(x)$) zastępujemy jej wielomianem interpolacyjnym Lagrange'a $P_q(x)$ opartym na węzłach x_j dla $j = i - q, \ldots, i$

$$P_q(x) = \sum_{j=0}^{q} f(x_{i-j}, y(x_{i-j}))l_j(x) \quad \text{gdzie } l_j(x) = \prod_{\substack{m=0\\ m\neq j}}^{q} \frac{x - x_{i-m}}{x_{i-j} - x_{i-m}}. \tag{1.4.4}$$

Wartości $y(x_{i-j})$ przybliża się przez f_{i-j}. Podstawiając (1.4.4) do (1.4.3) dostajemy po zamianie zmiennych całkowania

$$y_{i+r} = y_{i-l} + h \sum_{j=0}^{q} \beta_{qj} f_{i-j}, \quad \text{gdzie } \beta_{qj} = \int_{-l}^{r} \prod_{\substack{m=0\\ m\neq j}}^{q} \frac{s+m}{m-j}\, ds. \tag{1.4.5}$$

Najczęściej stosowanymi metodami tej klasy są metody typu

a) Adamsa–Bashforta: $r = 1$, $l = 0$; $(q + 1)$-krokowa, jawna (otwarta)

b) Adamsa–Moultona: $r = 0$, $l = 1$; q-krokowa, niejawna (zamknięta)

c) Nyströma: $r = 1$, $l = 1$; $(q + 1)$-krokowa, jawna (otwarta)

d) Milne'a: $r = 0$, $l = 2$; q-krokowa, niejawna (zamknięta)

1.4.3 Metody typu predyktor–korektor

Z każdą k-krokową metodą wiąża się dwa wielomiany

$$\rho(z) = \alpha_k z^k + \cdots + \alpha_1 z + \alpha_0 \tag{1.4.6a}$$

$$\sigma(z) = \beta_k z^k + \cdots + \beta_1 z + \beta_0 \tag{1.4.6b}$$

Często daną metodę nazywa się wobec tego metoda (ρ, σ). Aby dowiedzieć się więcej o zwiazkach wielomianów ρ i σ z właściwościami metod wielokrokowych radzimy sięgnąć do literatury dotyczącej metod numerycznych.

Przypomnijmy, że metoda wielokrokowa (ρ, σ) jest metoda otwartą gdy $\beta_k = 0$, a zamknieta jeśli $\beta_k \neq 0$. Niewatpliwą zaletą metod otwartych jest niewielki koszt wyznaczenia nowego przybliżenia y_{i+k}, równy w przyblizeniu kosztowi obliczenia wartości funkcji f. Natomiast w metodach zamknietych do kosztu tego musimy doliczyć koszt rozwiązania równania nieliniowego ze względu na y_{i+k}. Najczęściej stosowana jest metoda *iteracji prostej* lub *metoda Newtona.*

Na czym polegaja metody *predyktor–korektor*? Załóżmy, że znamy $y_j (j = 0, 1, \ldots, i + k - 1)$; wtedy kolejne y_{i+k} jest w metodzie niejawnej rozwiązaniem równania nieliniowego

$$y = F_i(y) \tag{1.4.7}$$

gdzie funkcja F_i ma postać

$$F_i(y) = h\frac{\alpha_k}{\beta_k}f(x_{i+k}, y) + c_i \tag{1.4.8}$$

a c_i nie zależy od y. Przy $h \to 0$ równanie (1.4.7) można rozwiązywać np. metodą iteracji prostej. Metoda ta dla danego $y^{(0)}$ konstruuje ciąg $\{y^{(l)}\}_{l=0}^{\inf}$ zdefiniowany równością

$$y^{(l+1)} = F_i(y^{(l)}) \tag{1.4.9}$$

Na ogół za $y^{(0)}$ przyjmuje się rozwiązanie równania

$$\alpha_k y^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{i+j} = h\sum_{j=0}^{k-1} \tilde{\beta}_j f(x_{i+j}, y_{i+j}) \tag{1.4.10}$$

w którym $(\rho, \tilde{\sigma})$ jest otwartą metodą k-krokową rzedu $q \leq p$.

Najczęściej polecaną metodą predyktor–korektor jest użycie metody otwartej (jawnej) Adamsa–Bashforta jako *predyktora* czyli *wzory wstępnego* (do wyznaczenia przybliżenia początkowego) i metody zamkniętej (niejwanej) Adamsa–Moultona jako korektora. Innymi metodą jest zastosowanie metody Milne'a jako predyktora, a metody Hamminga jako korektora. Zazwyczaj wystarczy jeden krok metody iteracji prostej (jedno zastosowanie wzoru korygującego); kolejne kroki iteracji prostej nie zmieniają rzędu metody. Ponadto często można użyć różnicy między wynikiem wstępnym a poprawionym oraz oszacowania błedu metody do poprawienia dokładności. Do rozwiązania równania (1.4.7) można (czasami trzeba) oprócz metody *iteracji prostej* zastosować inne, szybciej zbieżne metody iteracyjne, np. *metodę siecznych* albo *metodę Newtona*.

Przygotował: Paweł Jankowski, Jakub Narębski