Metodycznie wielokrokowe dla RRZ

Metody przykładowe

Rozpatrujemy równanie $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ na sieci $x_i, i = 0, 1, 2, ...; \quad x_i - x_{i-1} = h$. Wiemy, że

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx \,. \tag{1}$$

Idea Adamsa polega na zastąpieniu $y'(x)$ pod całką wielomianem $p_k(x)$ stopnia $k-1$. Współczynniki wielomianu określamy znając rozwiązanie w punktach poprzednio obliczonych. Np. niech $p_k(x) = Ax + B$. A i B wyznaczymy na podstawie (x_n, y_n) oraz (x_{n-1}, y_{n-1}). Ponieważ A i B spełniają równania

$$\begin{aligned} Ax_n + B &= f_n \\ Ax_{n-1} + B &= f_{n-1} \end{aligned}$$

więc

$$A = \frac{f_n - f_{n-1}}{h}\,, \qquad B = \frac{f_{n-1}x_n - f_n x_{n-1}}{h} \tag{2}$$

Metody Adamsa-Bashfortha II

Obliczając całkę (1), otrzymamy

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \frac{A}{2}(x_{n+1}^2 - x_n^2) + B(x_{n+1} - x_n) \tag{3}$$

Po wstawieniu A i B z (2) dostaniemy

$$y_{n+1} = y_n + \frac{3}{2}hf_n - \frac{1}{2}hf_{n-1} \tag{4}$$

Jest to metoda jawna drugiego rzędu Adamsa-Bashfortha (AB).

Biorąc wielomian $p_4(x)$ oraz rozwiązania w punktach $(x_n, y_n), \ldots, (x_{n-3}, y_{n-3})$ dostaniemy metodę AB 4-go rzędu:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) \tag{5}$$

Błąd lokalny metody (5) jest proporcjonalny do h^5.

Metody Adamsa-Moultona I

Niech $p(x) = \alpha x + \beta$. Użyjemy tutaj punktów (x_n, y_n), (x_{n+1}, y_{n+1}). α i β spełniają równania

$$\alpha x_n + \beta = f_n\,, \quad \alpha x_{n+1} + \beta = f_{n+1}\,, \tag{6}$$

Mamy

$$\alpha = \frac{f_{n+1} - f_n}{h}\,, \quad \beta = \frac{f_n x_{n+1} - f_{n+1} x_n}{h} \tag{7}$$

Wstawiając do całki (1) i upraszczając, dostaniemy niejawną metodę 2-go rzędu Adamsa-Moultona (AM; prawa strona zależy od y_{n+1}):

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2} h f_n + \frac{1}{2} h f(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{8}$$

W podobny sposób dostajemy metody wyższych rzędów. Np. metoda AM 4-go rzędu jest

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f(x_{n+1}, y_{n+1}) + 19 f_n - 5 f_{n-1} + f_{n-2}) \tag{9}$$

Lokalny błąd metody $\sim h^5$.

Zamiast zastępować pochodna $y'(x)$ w całce (1) wielomianem $p_k(x)$, zastępujemy wielomianem funkcję $y(x)$. Np., biorąc wielomian $p_1(x) = ax + b$ przechodzący przez punkty $(x_n, y_n), (x_{n+1}, y_{n+1})$ otrzymamy

$$ax_n + b = y_n\,, \quad ax_{n+1} + b = y_{n+1} \tag{10}$$

Ponieważ $p_1'(x) = a$ to

$$a = f(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{11}$$

Odejmując pierwsze równanie (10) od drugiego mamy też

$$a = (y_{n+1} - y_n)/h \tag{12}$$

Porównanie obu wyrażeń dla a daje niejawną metodę wstecznego różniczkowania 1-go rzędu

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{13}$$

Metody wstecznego różniczkowania II

W podobny sposób dostajemy metody wyższych rzędów. Przykładem są metody rzędu drugiego i trzeciego:

$$k = 2: \qquad y_{n+1} = \frac{1}{3}(4y_n - y_{n-1} + 2hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

$$k = 3: \qquad y_{n+1} = \frac{1}{25}(48y_n - 36y_{n-1} + 16y_{n-2} - 3y_{n-3} + 12hf(x_{n+1}, y_{n+1}))$$

Lokalne blędy metod 2-go i 3-go rzędu są $\mathcal{O}(h^3)$ i $\mathcal{O}(h^5)$ odpowiednio.

Zadanie

Znaleźć niejawną metodę różniczkowania wstecznego 4-go rzędu.

Ogólniej . . .

Przypomnienie I

Wielomian interpolacyjny Newtona ma postać

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j e_j(x)$$

gdzie

$$\begin{aligned} e_0(x) &= 1\,, \\ e_j(x) &= \prod_{i=0}^{j-1}(x - x_i)\,, \quad j = 1, 2, \ldots \quad \text{– wielomiany bazowe.} \end{aligned}$$

Z założenia $p_n(x)$przechodzi przez zadane punkty $\{(x_i, f_i = f(x_i))\}$, czyli $p_n(x_i) = f(x_i) =: [f_i]\,, \forall i = 0, \ldots, n$. Współczynniki α_i wyrażają się przez tzw. progresywne różnice dzielone.

$$p_n(x_0) = \alpha_0 = f(x_0) = [f_0]$$

$$p_n(x_1) = \alpha_0 + \alpha_1(x_1 - x_0) = [f_1] \rightarrow \alpha_1 = \frac{[f_1] - [f_0]}{x_1 - x_0} = [f_0 f_1]$$

Przypomnienie II

$$p_n(x_2) = \alpha_0 + \alpha_1(x_2 - x_0) + \alpha_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = [f_2] \rightarrow \alpha_2 = \frac{[f_0 f_2] - [f_0 f_1]}{x_2 - x_1}$$

Po reorganizacji

$$\alpha_2 = \frac{[f_1 f_2] - [f_0 f_1]}{x_2 - x_0} = [f_0 f_1 f_2]$$

Ogólnie

$$\alpha_k = \frac{[f_1 \dots f_k] - [f_0 \dots f_{k-1}]}{x_k - x_0} = [f_0 \dots f_k] \tag{14}$$

Interpolant Newtona jest więc

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} [f_0 \dots f_j] e_j(x)$$

Jeśli punkty x_i są równoodległe, $x_{i+1} - x_i = h$, to (Pokazać metodą indukcji, korzystając z (14))

$$[f_0 \dots f_n] = \frac{\Delta^n f_0}{h^n n!},$$

Przypomnienie III

gdzie Δ jest operatorem progresywnych różnic skończonych, zdefiniowanym jako

$$\Delta f_i := f_{i+1} - f_i\,, \quad \Delta^k f_i = \Delta(\Delta^{k-1} f_i)$$

Oznacza to, że

$$\Delta^2 f_0 = f_2 - 2f_1 + f_0\,, \quad \Delta^3 f_0 = f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0$$

i ogólnie

$$\Delta^n f_0 = \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} (-1)^i f_i\,.$$

Mamy więc,

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{\Delta^j f_0}{h^j j!} e_j(x)$$

Przypomnienie IV

$$\begin{aligned} p_n(t) &= p_n(x_0 + sh) \qquad (15) \\ &= \sum_{j=0}^{n} \frac{\Delta^j f_0}{h^j j!} \prod_{i=0}^{j-1} (x_0 + sh - x_i) \\ &= \sum_{j=0}^{n} \frac{\Delta^j f_0}{h^j j!} \prod_{i=0}^{j-1} h(s - i) \\ &= \sum_{j=0}^{n} \frac{\Delta^j f_0}{j!} s(s-1)\ldots(s-j+1) \\ &= \sum_{j=0}^{n} \binom{s}{j} \Delta^j f_0 \,. \qquad (16) \end{aligned}$$

Jeśli węzły są w porządku $x_k, x_{k-1}, \dots, x_0$, to wielomian Newtona jest

$$p_k(x) = [f_k] + [f_k f_{k-1}](x - x_k) + \cdots + [f_k \dots f_0](x - x_k)(x - x_{k-1}) \dots (x - x1)$$

Dla równoodległych punktów i dla $x = x_k + sh$,
$x_i = x_k + (k - i)h$, $i = 0, 1, \dots k$ dostajemy

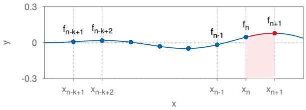
$$\begin{aligned} p_k(x) &= [f_k] + [f_k f_{k-1}]sh + \cdots + [f_k \dots f_0]s(s+1)\dots(s+k-1) \\ &= \sum_{i=0}^{k} (-1)^i \binom{-s}{i} i! h^i [f_k \dots f_{k-i}] \\ &= \sum_{i=0}^{k} (-1)^i \binom{-s}{i} \nabla^i f_k \,. \end{aligned}$$

gdzie $\nabla^j f_k$ oznacza j-tą różnicę wsteczną $\nabla^0 f_k = f_k$, $\nabla^{j+1} f_k = \nabla^j f_k - \nabla^j f_{k-1}$.

Theorem

$[f_{\sigma(0)} \dots f_{\sigma(n)}] = [f_0 \dots f_n]$ *gdzie* σ *oznacza dowolną permutację zbioru wskaźników* $\{0, 1, \dots, n\}$

Metody jawne



Rozwiązanie równania

$$y' = f(x, y)\,, \quad y(x_0) = y_0 \tag{17}$$

w punkcie x_{n+1} zapiszemy w postaci

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y)\, dt\,. \tag{18}$$

Jeśli znane są wartości y_i dla $i = n - k + 1$ to znane są też wartości $f_i = f(x_i, y_i)$. Poprowadzimy przez punkty x_i wielomian interpolacyjny Newtona

$$p(t) = p(x_n + sh) = \sum_{j=0}^{k-1} (-1)^j \binom{-s}{j} \nabla^j f_n\,, \tag{19}$$

Stąd

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)\,dt == y_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j \nabla^j f_n\,, \tag{20}$$

gdzie

$$\gamma_j = (-1)^j \int_0^1 \binom{-s}{j}\,ds$$

Zadanie

Obliczyć γ_j dla $j = 1, 2, 3$.

Jawne metody Adamsa III

Tablica 1: Współczynniki γ jawnych metod Adamsa: $j = 0, \dots 6$

j	0	1	2	3	4	5	6
γ_j	1	1/2	5/12	3/8	251/720	95/288	19087/60480

Jawne metody Adamsa dla $k = 1, 2, 3, 4$.

$$k = 1 \quad : \quad y_{n+1} = y_n + hf_n \tag{21}$$

$$k = 2 \quad : \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1}) \tag{22}$$

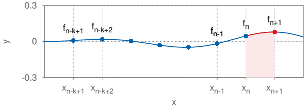
$$k = 3 \quad : \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}) \tag{23}$$

$$k = 4 \quad : \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) \tag{24}$$

Zadanie

Podać jawną metodę Adamsa dla k=5.

Metody niejawne



Włączenie do wielomianu interpolującego punktu (x_{n+1}, f_{n+1}) prowadzi do metod niejawnych (implicit).

Wielomian Newtona ma teraz postać

$$p^*(t) = p^*(x+sh) = \sum_{j=0}^{k} (-1)^j \binom{-s+1}{j} \nabla^j f_{n+1} \, .$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^{k} \gamma_j^* \nabla^j f_{n+1}$$

współczynniki

$$\gamma_j^* = (-1)^j \int_0^1 \binom{-s+1}{j} ds$$

są pokazane w Tablicy (2)

Niejawne metody Adamsa II

Tablica 2: Współczynniki γ niejawnych metod Adamsa: $j = 0, \ldots 6$

j	0	1	2	3	4	5	6
γ_j^*	1	-1/2	-1/12	-1/24	-19/720	-3/160	-863/60480

Pierwsze niejawne metody Adamsa dla $k = 1, 2, 3, 4$:

$$k = 1 \quad : \quad y_{n+1} = y_n + hf_{n+1} \tag{25}$$

$$k = 2 \quad : \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} - f_n) \tag{26}$$

$$k = 3 \quad : \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}) \tag{27}$$

$$k = 4 \quad : \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \tag{28}$$

Zadanie

Sprawdzić tablicę współczynników γ_j, $j = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ niejawnych metod Adamsa.

Metody typu *predictor-corrector*

Jak korzystać z metod niejawnych?

P: Obliczyć tzw. prognostyk (*predictor*) $\hat{y}_{n+1}$ metodą jawną

E: Obliczyć (*evaluate*) przybliżenie $\hat{f}_{n+1} = f(x_{n+1}, \hat{y}_{n+1})$

C: Zastosować poprawkę (*corrector*)
$y_{n+1} = y_n + h(\beta_k \hat{f}_{n+1} + \beta_{k-1} f_n + \cdots + \beta_0 f_{n-k+1})$

E: Wyliczyć nową funkcję $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$.

Powyższa procedura nosi nazwę PECE. Inne możliwe PECECE lub PEC.

Metod używali: F.R. Moulton (1926), W.E. Milne (1926))

Równania wyższych rzędów

Dla specjalnych równań drugiego rzędu

$$y'' = f(x, y) \tag{29}$$

gdzie prawa strona nie zależy od y', istnieją również metody wielokrokowe. Dwukrotne całkowanie równania (29) daje

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + h^2 \int_0^1 (1-s) f(x+sh, y(x+sh))\, ds\,.$$

Dodając ten wynik do podobnego rozwininięcia z krokiem $-h$ i wstawiając interpolant Newtona (jak w metodach Adamsa), otrzymamy

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = h^2 \sum_{j=0}^{k-1} \sigma_j \nabla^j f_n$$

gdzie

$$\sigma_j = (-1)^j \int_0^1 (1-s) \left[\binom{-s}{j} + \binom{s}{j} \right] ds.$$

Zadanie

Wyznaczyć kilka pierwszych ($j = 0, \ldots, 6$) współczynników σ i wypisać metody $k = 2, 3, 4$ całkowania $y'' = f(x, y)$

Thank you!

Uzupełnienie

Uzupełnienie I

Niech $G(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \gamma_j t^j$. Wstawimy tu definicję γ_j:

$$
\begin{aligned}
G(t) &= \sum_j (-t)^j \int_0^1 \binom{-s}{j} ds \\
&= \int_0^1 \sum_j (-t)^j \binom{-s}{j} ds \\
&= \int_0^1 (1-t)^{-s} ds = -t/[(1-t)\log(1-t)]
\end{aligned}
$$

Czyli

$$
-\frac{\log(1-t)}{t} G(t) = \frac{1}{1-t}
$$

lub

$$
(1 + 1/2t + 1/3t^2 + \dots)(\gamma_0 + \gamma_1 t + \gamma_2 t^2 + \dots) = (1 + t + t^2 + \dots)
$$

Uzupełnienie II

Stąd:

$$\gamma_m + 1/2\gamma_{m-1} + 1/3\gamma_{m-2} + \cdots + 1/(m-1)\gamma_0 = 1\,.$$

$m = 0$: $\gamma_0 = 1$

$m = 1$: $\gamma_1 + 1/2\gamma_0 = 1\,, \quad \gamma_1 = 1 - 1/2 = 1/2$

$m = 2$: $\gamma_2 = -1/4 - 1/3 + 1 = 5/12$

$m = 3$: $\gamma_3 = 3/8$

... ...

Dla metod niejawnych

$$\gamma^*_m + 1/2\gamma^*_{m-1} + \cdots + 1/(m+1)\gamma^*_0 = 0\,, \gamma^*_0 = 1$$

gdzie $\gamma^*_j = (-1)^j \int_0^1 \binom{-s+1}{j}\, ds$.

Obliczanie różnic skończonych

Budujemy następującą tablicę

x	$f(x)$				
-	Δ^0	Δ^1	Δ^2	Δ^3	Δ^4
0	f_0				
		$\Delta^1 f_0$			
1	f_1		$\Delta^2 f_0$		
		$\Delta^1 f_1$		$\Delta^3 f_0$	
2	f_2		$\Delta^2 f_1$		$\Delta^4 f_0$
		$\Delta^1 f_2$		$\Delta^3 f_1$	
3	f_3		$\Delta^2 f_2$		
		$\Delta^1 f_3$			
4	f_4				

Kolumny, poczynając od drugiej, tworzymy, odejmując od wartości w wierszu następnym wartość z wiersza bieżącego. Np. $\Delta^1 f_2 == f_3 - f_2$, $\Delta^2 f_2 = \Delta^1 f_3 - \Delta^1 f_2$.

Przykład interpolacji Newtona.

Przykład: $f(x) = x^2$.

x	x^2			
-	Δ^0	Δ^1	Δ^2	Δ^3
0	0			
		1		
1	1		2	
		3		0
2	4		2	
		5		0
3	9		2	
		7		
4	16			

$h = 1.$

$3.4^2 = 11.56$

$3.4^2 = 9 - 7\frac{-0.4}{1} + 2\frac{-0.4 \cdot 0.6}{2}$

$3.1^2 = 9 - 7\frac{-0.1}{1} + 2\frac{-0.1 \cdot 0.9}{2} = 9.61$

Operatory Δ, ∇, E

Definicje

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$$

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$$

$$Ef(x) = f(x+h)$$

- $Ef(x) = f(x+h) = [f(x+h) - f(x)] + f(x) = \Delta f(x) + f(x) = (\Delta + 1)f(x)$
  Stąd $\boxed{E = 1 + \Delta}$, $\boxed{\Delta = E - 1}$
- $\nabla(Ef(x)) = \nabla(f(x+h)) = f(x+h) - f(x) = ... = f(x)$
- Ponieważ $E = 1 + \Delta$, więc $(1-\nabla)(1+\Delta)f(x) = f(x)$,
  $(1+\Delta)^{-1} = 1 - \nabla$, $\boxed{\nabla = 1 - (1+\Delta)^{-1}}$, $(1-\nabla)^{-1} = 1 + \Delta = E \rightarrow$
  $\boxed{1 - \nabla = E^{-1}}$
- $\Delta = (1-\nabla)^{-1} - 1$, $\boxed{\nabla = 1 - E^{-1}}$.