

Wstęp do metod numerycznych

15. Kilka wstępnych uwag na temat numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych

P. F. Góra

<http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/>

2016

Równania różniczkowe zwyczajne

Najogólniejszą postacią równania różniczkowego zwyczajnego (ODE, *Ordinary Differential Equation*) rzędu n jest wyrażenie postaci

$$F \left(x, y, \frac{dy}{dx}, \dots, \frac{d^n y}{dx^n} \right) = 0, \quad (1)$$

gdzie $y: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ lub, niekiedy, $y: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$.

Jeśli pochodna F po ostatnim argumentie nie znika (przynajmniej lokalnie), (1) zapisujemy jako

$$\frac{d^n y}{dx^n} = \tilde{F} \left(x, y, \frac{dy}{dx}, \dots, \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} \right). \quad (2)$$

Trzeba jednak pamiętać, iż transformacja od (1) do (2) może wymagać dookreślenia (w tym sensie równanie (1) może nie być jednoznaczne).

Przykład: Równanie

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + y^2 = 1 \quad (3a)$$

można zinterpretować na **jeden z dwu** sposobów:

$$\frac{dy}{dx} = \sqrt{1 - y^2}, \quad (3b)$$

$$\frac{dy}{dx} = -\sqrt{1 - y^2}. \quad (3c)$$

Przykład

Rozważmy równanie

$$(1 - y) \frac{d^2 y}{dx^2} - \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 + y = 0. \quad (4)$$

Poza punktem $y = 1$ nie ma problemu*. Co zrobić dla $y = 1$? Możliwe są *dwa* scenariusze:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{y=1} = \begin{cases} 1 & \text{lub} \\ -1 \end{cases} \quad (5)$$

Który wybrać?

*Pozornie!

Układy równań pierwszego rzędu

Równanie w postaci (2) na ogół przedstawia się w postaci układu n równań pierwszego rzędu. Najprostsza — co nie oznacza, iż w każdym wypadku najlepsza — transformacja od równania rzędu n do układu n równań pierwszego rzędu ma postać:

$$\begin{aligned} y_1 &\equiv y, \\ \frac{dy}{dx} &\equiv \frac{dy_1}{dx} = y_2, \quad \frac{d^2y}{dx^2} \equiv \frac{dy_2}{dx} = y_3, \quad \dots, \quad \frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}} \equiv \frac{dy_{n-1}}{dx} = y_n, \quad (6) \\ \frac{d^ny}{dx^n} &\equiv \frac{dy_n}{dx} = \tilde{F}(x, y_1, y_2, \dots, y_n). \end{aligned}$$

Dlatego od tej pory *będziemy się zajmować głównie układami równań rzędu pierwszego*. Układy te nie muszą mieć postaci sugerowanej przez transformację (6), ale widać, że takie zainteresowanie nie ogranicza ogólności rozważań.

Rozwiązania ogólne i szczególne

Rozwiązaniem ogólnym równania różniczkowego zwyczajnego rzędu n nazywam najbardziej ogólną postać funkcji $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, klasy co najmniej C^n , spełniającą równanie (2). Rozwiązanie to zależy od n parametrów.

Przykład: Rozwiązaniem ogólnym równania oscylatora harmonicznego

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = -\omega^2 y \quad (7)$$

jest funkcja

$$y(t) = A \sin(\omega t + \varphi). \quad (8)$$

Rozwiązaniem szczególnym równania różniczkowego zwyczajnego rzędu n jest pewien “przypadek szczególny” rozwiązania ogólnego — taki, w którym wartości wszystkich stałych dowolnych zostały ustalone, najczęściej poprzez podanie warunków, jakie ma spełniać rozwiązanie równania.

Przykład: Rozwiązaniem szczególnym równania oscylatora harmonicznego (7) może być funkcja

$$y(t) = \cos \omega t. \quad (9a)$$

Innym rozwiązaniem szczególnym tego równania może być funkcja

$$y(t) = -\frac{3}{4} \sin \left(\omega t + \frac{9\pi}{17} \right). \quad (9b)$$

Obserwacja: Rozwiązaniem szczególnym układu n równań różniczkowych zwyczajnych rzędu pierwszego jest krzywa $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Numerycznie można poszukiwać tylko *szczególnych* (nie ogólnych) rozwiązań równań różniczkowych. Rozwiązanie równania rzędu n lub też, co równoważne, układu n równań rzędu pierwszego, zależy od n stałych wyznaczanych z warunków, jakie spełniać ma poszukiwana funkcja. **Jeśli wszystkie te warunki zadane są w jednym punkcie**, czyli dla jednej wartości zmiennej niezależnej, mówimy, iż dany jest **problem początkowy**, zwany inaczej **problemem Cauchy'ego**.

Problem Cauchy'ego:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (10)$$

gdzie $y, y_0 \in \mathbb{R}^n$, $f: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ (czasami zamiast \mathbb{R} bierze się \mathbb{C}).

Twierdzenie Picarda

Twierdzenie 1. *Jeżeli funkcja f jest ciągła w pasie $x_0 \leq x \leq X$ oraz spełnia warunek Lipschitza ze względu na drugą zmienną:*

$$\exists L > 0 \forall x : x_0 \leq x \leq X, \forall \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 : \|\mathbf{f}(x, \mathbf{y}_1) - \mathbf{f}(x, \mathbf{y}_2)\| \leq L \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|$$

to problem Cauchy'ego (10) ma w tym pasie rozwiązanie i jest ono jednoznaczne.

Metody numeryczne w zasadzie ograniczają się do przypadków spełniających założenia twierdzenia Picarda.

Problem Cauchy'ego to przepis na to jak uzyskać rozwiązanie po nieskończenie małym kroku.

Metody numeryczne



zamiana problemu ciągłego na dyskretny

$$x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_1 + h, \dots, x_n = x_{n-1} + h, \dots$$
$$y_0 = y(x_0), y_1 = y(x_1), y_2 = y(x_2), \dots, y_n = y(x_n), \dots$$

h — krok (niekiedy może się zmieniać)

Metody jawne (*explicit*)

Metoda jawna to **przepis rachunkowy** pozwalający wyliczyć wartość poszukiwanej funkcji $y(x)$ w punkcie x_{n+1} na podstawie znajomości wartości funkcji (a także prawej strony równania) w punktach $x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, \dots$.

Przykład: Metoda

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1} \right), \quad (11)$$

gdzie $f_k \equiv f(x_k, y_k)$ (f oznacza prawą stronę równania różniczkowego w problemie (10)), jest jawna.

Uwaga! Jeżeli w jakiejś metodzie, jawnej lub niejawnej (patrz niżej), zachodzi konieczność użycia prawej strony równania obliczanej we wcześniejszych punktach (f_{n-1}, f_{n-2}, \dots), na ogół nie należy ich za każdym razem *obliczać* na nowo — numerycznie szybciej jest je *zapamiętać*.

Metody niejawne (*implicit*)

Metoda niejawna to **równanie algebraiczne** (w ogólności wielowymiarowe równanie algebraiczne), jakie musi spełniać poszukiwana wartość y_{n+1} . “Wyliczenie” tej wartości polega na numerycznym rozwiązaniu odpowiedniego równania algebraicznego.

Przykład: Metoda

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{1}{2}f_{n+1} + \frac{1}{2}f_n \right), \quad (12)$$

jest niejawna, gdyż poszukiwana wielkość y_{n+1} jest potrzebna do obliczenia f_{n+1} .

Przykładu ciąg dalszy

Dane jest (skalarne) równanie różniczkowe

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y - x}{y^2 + x}. \quad (13)$$

Zastosowanie metody niejawnej (12) do równania (13) prowadzi do następującego równania *algebraicznego* na nieznaną wielkość y_{n+1} :

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2} \cdot h \cdot \left(\frac{y_{n+1} - x_{n+1}}{y_{n+1}^2 + x_{n+1}} + \frac{y_n - x_n}{y_n^2 + x_n} \right). \quad (14)$$

Zgodność

Od każdej metody numerycznego całkowania równań różniczkowych wymaga się, aby była *zgodna* z wyjściowym równaniem, to jest aby odtwarzała je w granicy nieskończenie małych kroków.

Przykład: Przekształcając wyrażenie (11) otrzymujemy

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1} \right) \quad (15a)$$

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = \frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1} \quad (15b)$$

$$\frac{y(x_n + h) - y(x_n)}{h} = \frac{3}{2}f(x_n + h, y(x_n + h)) - \frac{1}{2}f(x_n, y(x_n)) \quad (15c)$$

W granicy $h \rightarrow 0$ lewa strona (15c) dąży do pochodnej $\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_n}$, natomiast oba argumenty po prawej stronie dążą do $(x_n, y(x_n))$. Ostatecznie

otrzymujemy

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_n} = f(x_n, y(x_n)), \quad (15d)$$

co jest *zgodne* z równaniem (10).

Analogicznie można wykazać zgodność metody (12). Natomiast “metoda”

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{3}f_{n-1} \right),$$

nie jest zgodna z równaniem (10).

Rząd metody

Podczas numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych popełnia się dwa rodzaje nieuniknionych błędów numerycznych:

- błąd metody, wynikający z zastąpienia ścisłego problemu ciągłego problemem dyskretnym oraz
- błąd zaokrąglenia, wynikający z faktu, iż obliczenia prowadzone są ze skończoną dokładnością.

Uzyskane rozwiązanie numeryczne jest tylko *przybliżeniem* rozwiązania dokładnego. Niech $y_n \equiv y(x_n)$ będzie uzyskanym rozwiązaniem przybliżonym, natomiast $\tilde{y}(x_n)$ niech będzie (nieznanym, ale istniejącym) rozwiązaniem dokładnym. Zgodność metody oznacza, że w granicy $\lim_{h \rightarrow 0} y_n = \tilde{y}(x_n)$, a wobec tego spodziewamy się, że dla małych h zachodzi

$$\|y_n - \tilde{y}(x_n)\| \sim O(h^{p+1}) \quad (16)$$

Liczbę p nazywamy *rzędem metody*. Ogólną postać metody rzędu p zapisuje się najczęściej jako

$$y_{n+1} = \mathcal{G}(h; y_{n+1}, y_n, y_{n-1}, \dots) + O(h^{p+1}) \quad (17)$$

Stabilność

Na skutek popełnianych błędów, warunek początkowy w problemie Cauchy'ego ulega w każdym kroku „rozmyciu”:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{array} \right. \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_1) = y_1 + \varepsilon_1 \end{array} \right. \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_2) = y_2 + \varepsilon_2 \end{array} \right. \quad (18)$$

Gdyby ten „błąd rozmycia” mógł propagować się z kroku na krok, rozwiązanie numeryczne szybko mogłoby przestać mieć cokolwiek wspólnego z rozwiązaniem wyjściowego problemu Cauchy'ego: **aby metoda była stabilna, błędy popełniane w kolejnych krokach nie mogą narastać z kroku na krok.**

Zakładamy, że błędy są niewielkie, $\|\varepsilon_n\| \ll 1$, możemy się więc ograniczyć do przybliżenia liniowego. W tym przybliżeniu

$$\varepsilon_{n+1} = \mathbf{G}\varepsilon_n . \quad (19)$$

Błędy nie będą narastać z kroku na krok, jeśli **wszystkie** wartości własne macierzy \mathbf{G} będą spełniać $|\gamma| < 1$. Macierz \mathbf{G} nazywamy **macierzą wzmocnienia**.

Przykład: Dla jednokrokowej metody jawnej

$$y_{n+1} + \varepsilon_{n+1} = \mathcal{F}(h; x_n, y_n + \varepsilon_n) \simeq \mathcal{F}(h; x_n, y_n) + \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}=y_n} \varepsilon_n. \quad (20)$$

W powyższym wyrażeniu $\partial \mathcal{F} / \partial \mathbf{y}$ oznacza różniczkowanie wszystkich składowych \mathcal{F} po wszystkich składowych \mathbf{y} , czyli obliczanie jacobianu: Dla jednokrokowej metody jawnej

$$\mathbf{G} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{y}}(h; x_n, y_n). \quad (21)$$

Jeżeli jakaś metoda w ogóle może być stabilna dla danego równania, wymóg stabilności oznacza na ogół wzięcie odpowiednio małego kroku h . Zgodnie z wyrażeniem (21), krok czasowy, który w pewnym punkcie zapewnia stabilność, może go nie zapewniać w innym.

Jawna metoda Eulera

Problem Cauchy'ego (10) to przepis na to jak uzyskać rozwiązanie po infinitezymalnie małym kroku. Spróbujmy zastosować ten przepis dla kroków małych, ale o skończonej długości. W tym celu dokonajmy rozwinięcia Taylora:

$$y_{n+1} = y(x_{n+1}) = y(x_n + h) \simeq y(x_n) + \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_n, y=y_n} h + O(h^2), \quad (22)$$

a zatem

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) + O(h^2). \quad (23)$$

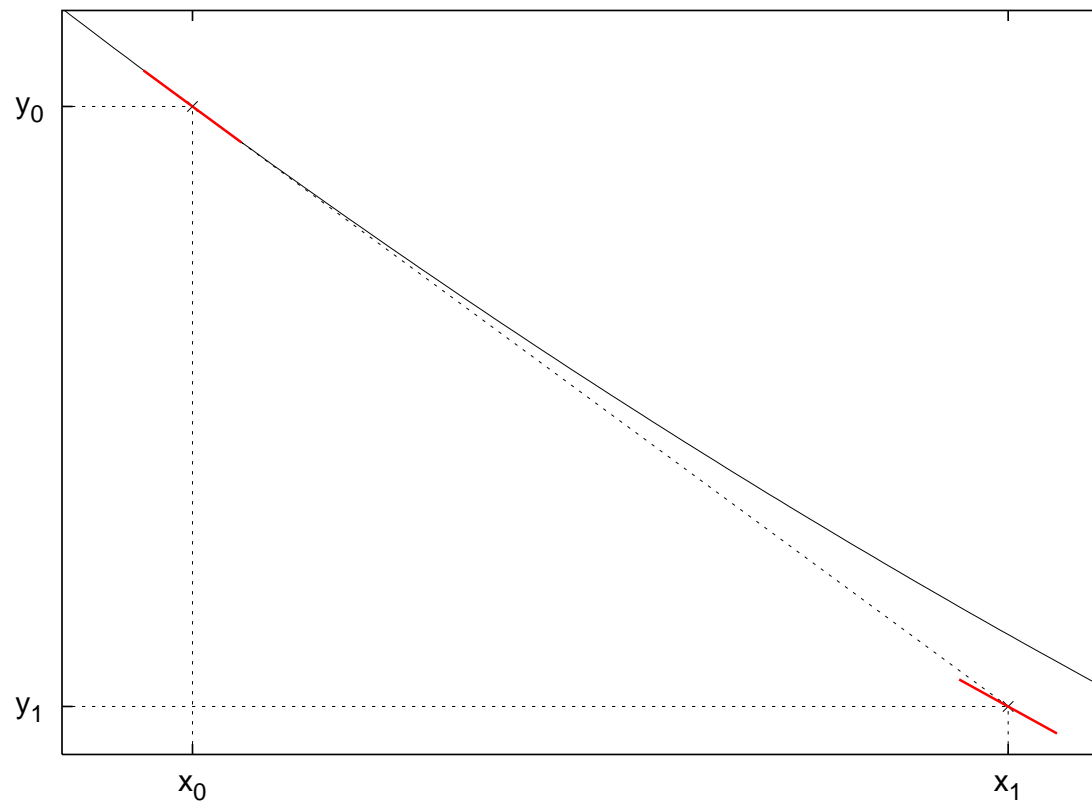
Metoda ta, zwana *jawną metodą Eulera*, jest najpopularniejszą (i jedną z najgorszych) metodą używanych do numerycznego całkowania równań różniczkowych zwyczajnych.

Inne wyprowadzenie metody Eulera:

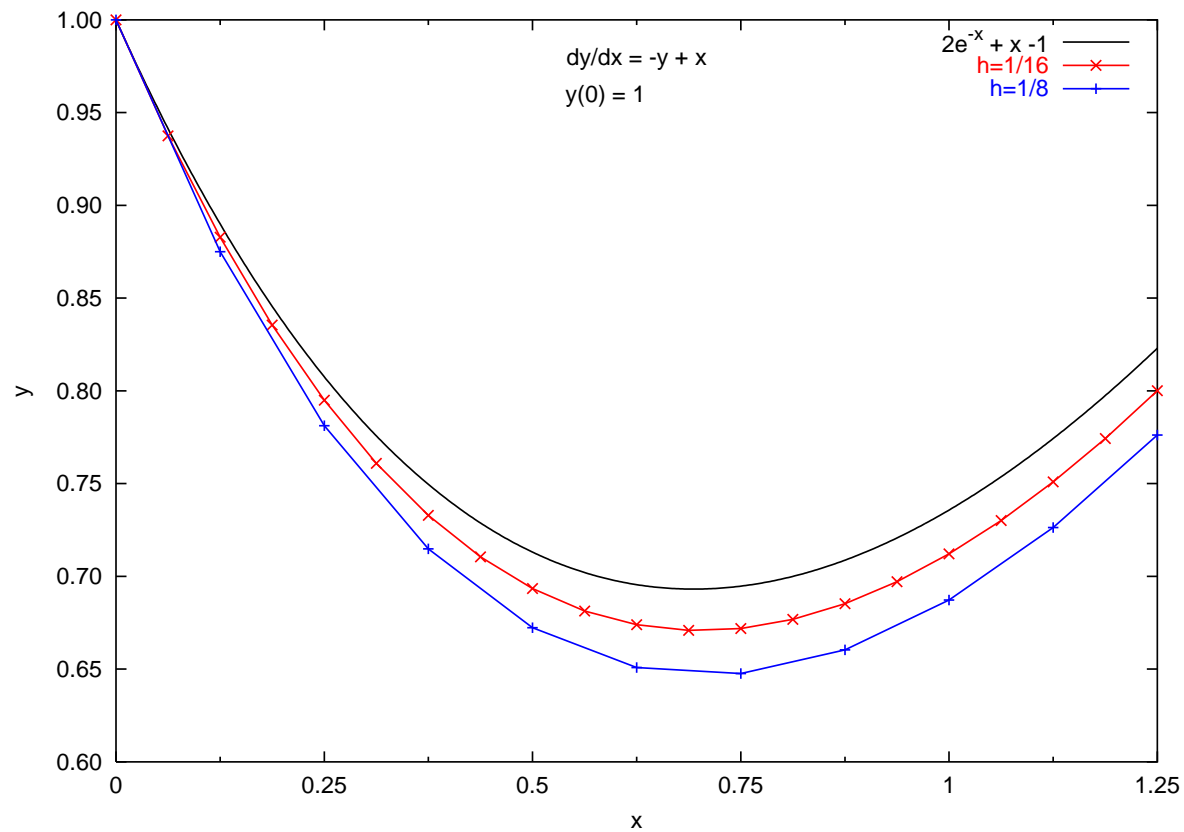
(pozornie inne)

$$\begin{aligned} y(x_n + h) &= y_n + \int_{x_n}^{x_n+h} \frac{dy}{dx} dx = y_n + \int_{x_n}^{x_n+h} \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)) dx \\ &\simeq y_n + \int_{x_n}^{x_n+h} (\mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n) + O(h)) dx = y_n + h \mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n) + O(h^2). \end{aligned} \tag{24}$$

Interpretacja geometryczna jawnej metody Eulera (przypadek jednowymiarowy)



Przykład zastosowania jawnej metody Eulera



Stabilność jawnej metody Eulera

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{n+1} + \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \boldsymbol{\varepsilon}_n + h \mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n + \boldsymbol{\varepsilon}_n) \\ &\simeq \mathbf{y}_n + \boldsymbol{\varepsilon}_n + h \mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n) + h \mathbf{J}(x_n, \mathbf{y}_n) \boldsymbol{\varepsilon}_n \end{aligned} \quad (25)$$

a zatem macierz wzmocnienia ma postać

$$\mathbf{G} = \mathbb{I} + h \mathbf{J}(x_n, \mathbf{y}_n), \quad (26)$$

gdzie $\mathbf{J}(x_n, \mathbf{y}_n) = \partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y} |_{x=x_n, \mathbf{y}=\mathbf{y}_n}$ jest jacobianem prawej strony równania po drugiej zmiennej. \mathbb{I} jest macierzą jednostkową.

Obserwacja:

Dla równania liniowego

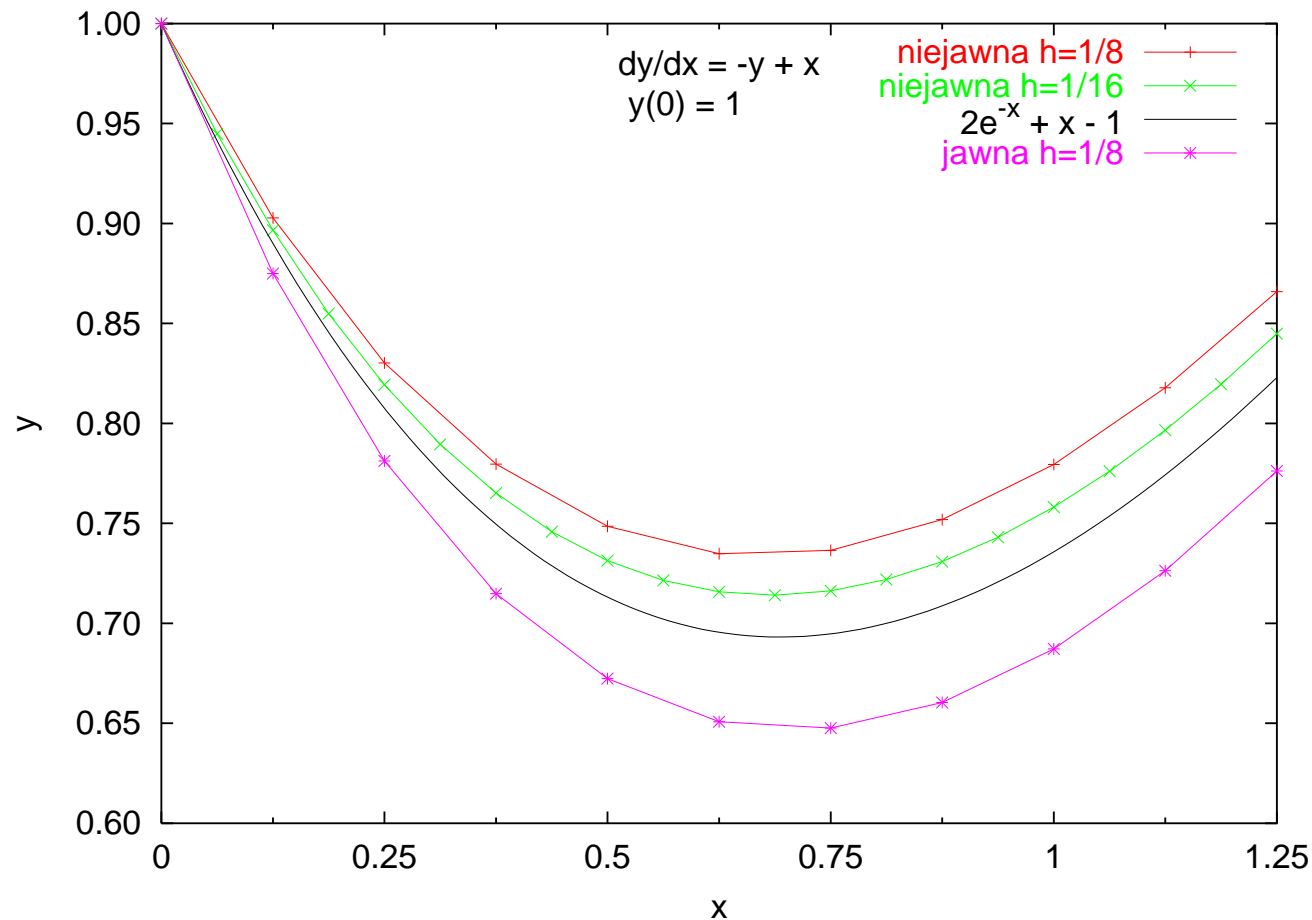
$$\frac{dy}{dx} = \mathbf{A}y, \quad (27)$$

gdzie $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, macierzą wzmocnienia w jawnej metodzie Eulera jest

$$\mathbf{G} = \mathbb{I} + h\mathbf{A}. \quad (28)$$

Macierz \mathbf{A} może, w ogólności, zależeć od zmiennej niezależnej, $\mathbf{A} = \mathbf{A}(x)$.

Przykład zastosowania niejawnej metody Eulera



Przykład:

Rozpatrzmy następujący problem Cauchy'ego:

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1015 & 2015 \\ -1016 & -2016 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \\ u(0) = 1, \\ v(0) = 0. \end{cases} \quad (29)$$

Analityczne rozwiązanie tego problemu ma postać

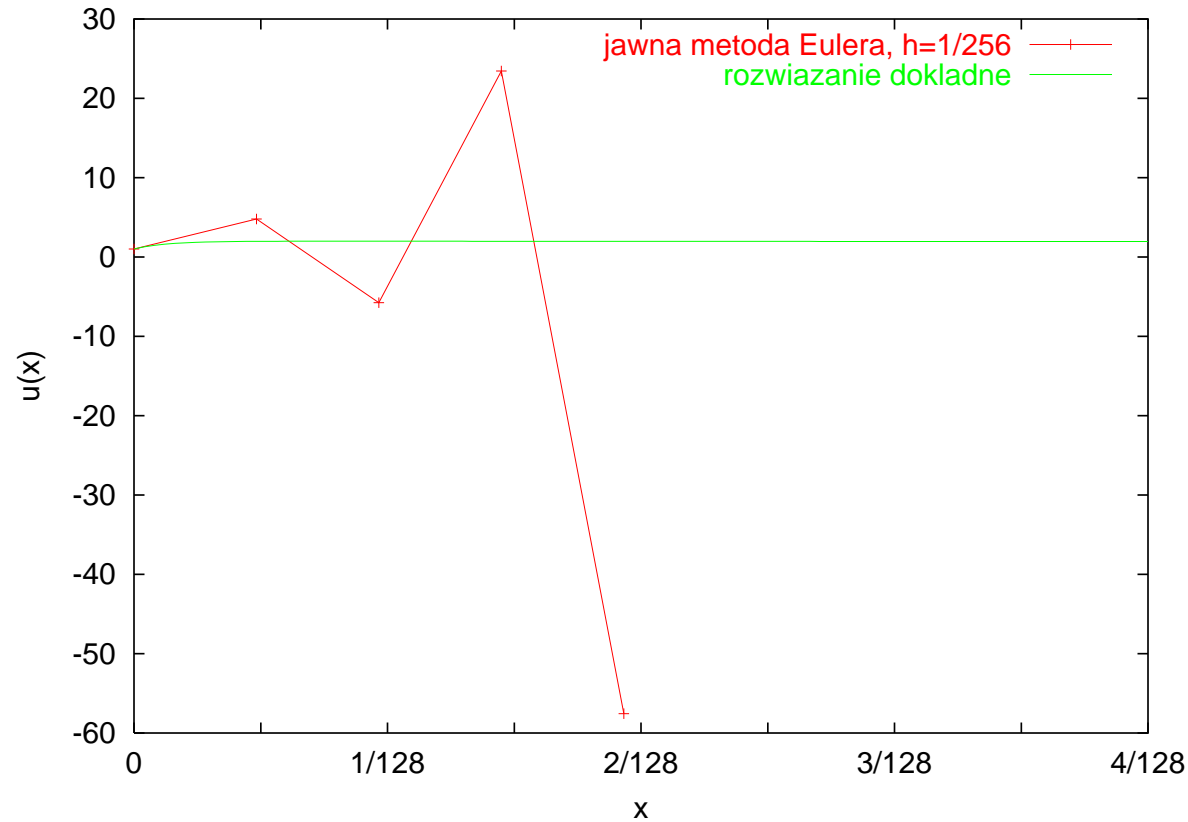
$$u(x) = \frac{2015}{999}e^{-x} - \frac{1016}{999}e^{-1000x}, \quad (30a)$$

$$v(x) = \frac{1015}{999}e^{-x} - \frac{1015}{999}e^{-1000x}. \quad (30b)$$

Rozwiązanie (30) ma dwie charakterystyczne skale czasowe: $T_1 = 1$ i $T_2 = 1/1000 \ll T_1$. Ta druga skala czasowa nie gra, poza początkowym okresem, żadnej istotnej roli w rozwiązaniu, spodziewamy się więc, że można na nią nie zwracać uwagi w rozwiązaniu numerycznym. **Nic bardziej błędnego!** Spróbujmy rozwiązać problem (29) przy pomocy jawnej metody Eulera z krokiem $h = 1/256$. Wyniki przedstawia tabela

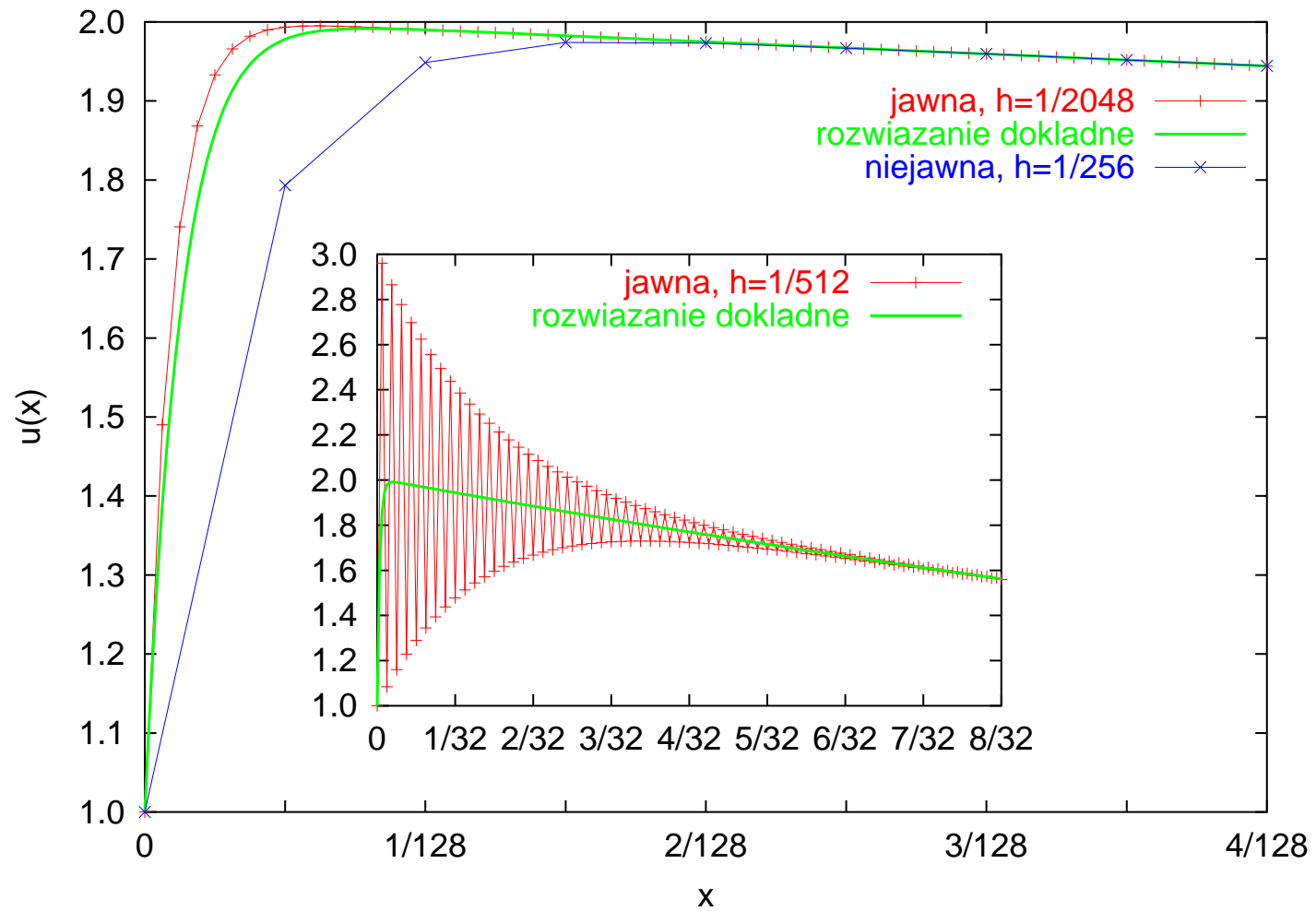
x	$u(x)$ jawna met. Eulera, $h = \frac{1}{256}$
0	1.00000000
1/128	4.78867912
2/128	-5.74808168
3/128	23.44808960
4/128	-57.55829240
5/128	167.09159900
6/128	-456.02206400
7/128	1272.20862000
8/128	-3521.21387000

oraz wykres...



Skąd bierze się taki wynik? Zauważmy, że $\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=0} = 1015$, a zatem

dla małych wartości argumentu szukana funkcja narasta bardzo szybko, jednak, jak się okazuje, wybrany krok czasowy jest większy niż charakterystyczna skala tego narastania — przybliżenie numeryczne „przestrzeliwuje”, w następnym kroku stara się ten błąd „skompensować” i w rezultacie rozwiązanie rozbiega się oscylacyjnie. Rozwiązanie jawną metodą Eulera z krokiem dwa razy mniejszym, $h = 1/512$, także wykazuje silne oscylacje dla małych wartości argumentu, ale oscylacje te są tłumione. Jednocześnie jawna metoda Eulera z krokiem $h = 1/2048$ oraz niejawną metodą Eulera z krokiem $h = 1/256$ nie oscylują i mimo początkowych odchyłeń od rozwiązania dokładnego, zbiegają się do niego bardzo szybko.



Zjawiska te można wyjaśnić w oparciu o teorię stabilności. Wartości własne macierzy z problemu (29) wynoszą $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = -1000$. Wobec tego wartości własne macierzy wzmocnienia (28) wynoszą $\gamma_1 = 1 - h$, $\gamma_2 = 1 - 1000h$.

Z warunku $|\gamma_{1,2}| < 1$ wynika, iż dla zapewnienia stabilności rozwiązania problemu (29) w **jawnej** metodzie Eulera musi zachodzić $0 < h < \frac{1}{500}$. Układ typu (29), w którym występuje kilka wyraźnie różnych skal czasowych i jawna metoda numeryczna w celu zapewnienia stabilności musi się dostosować do najszybszej z nich, mimo iż jest ona *praktycznie* nieobecna w rozwiązaniu, nazywa się **problemem sztywnym**.

Problem: Zmiana pochodnej na przestrzeni kroku całkowania

Wróćmy do wyjściowego problemu Cauchyego (10). Metody Eulera, jawna i niejawna, ignorują fakt, iż prawa strona (pochodna poszukiwanej funkcji) zmienia się w trakcie wykonywania kroku całkowania. Spodziewamy się, że pewna „średnia” pochodna będzie lepiej opisywać zmiany funkcji na całym przedziale o długości równej długości kroku całkowania.

Wobec tego jako “średnią” pochodną przyjmijmy pochodną w środkowym punkcie przedziału. Ale jak znaleźć wartość szukanej funkcji w tym środkowym punkcie? Najprościej jest znaleźć ją korzystając z jawnej metody Eulera z krokiem połówkowym, następnie zaś obliczoną w punkcie środkowym pochodną „przenosimy” do lewego krańca przedziału i wykonujemy cały krok o długości h . Zatem

Jawna metoda punktu środkowego

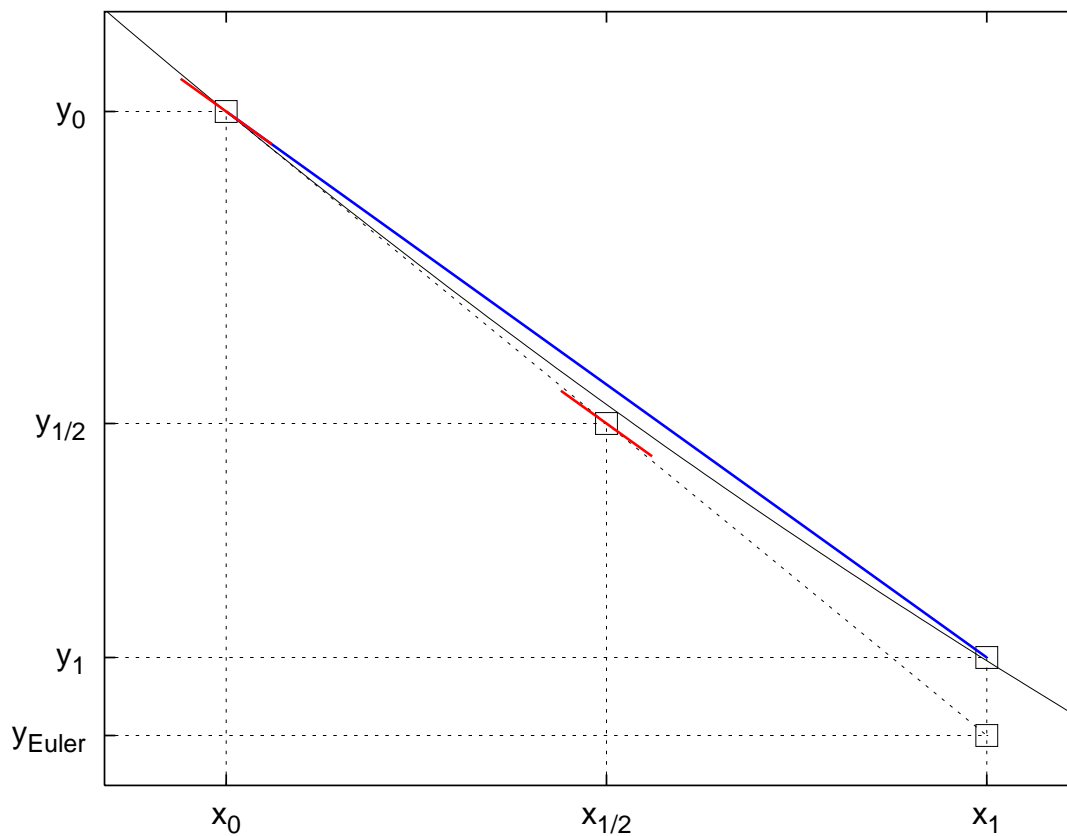
$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(x_n, y_n), \quad (31a)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1\right), \quad (31b)$$

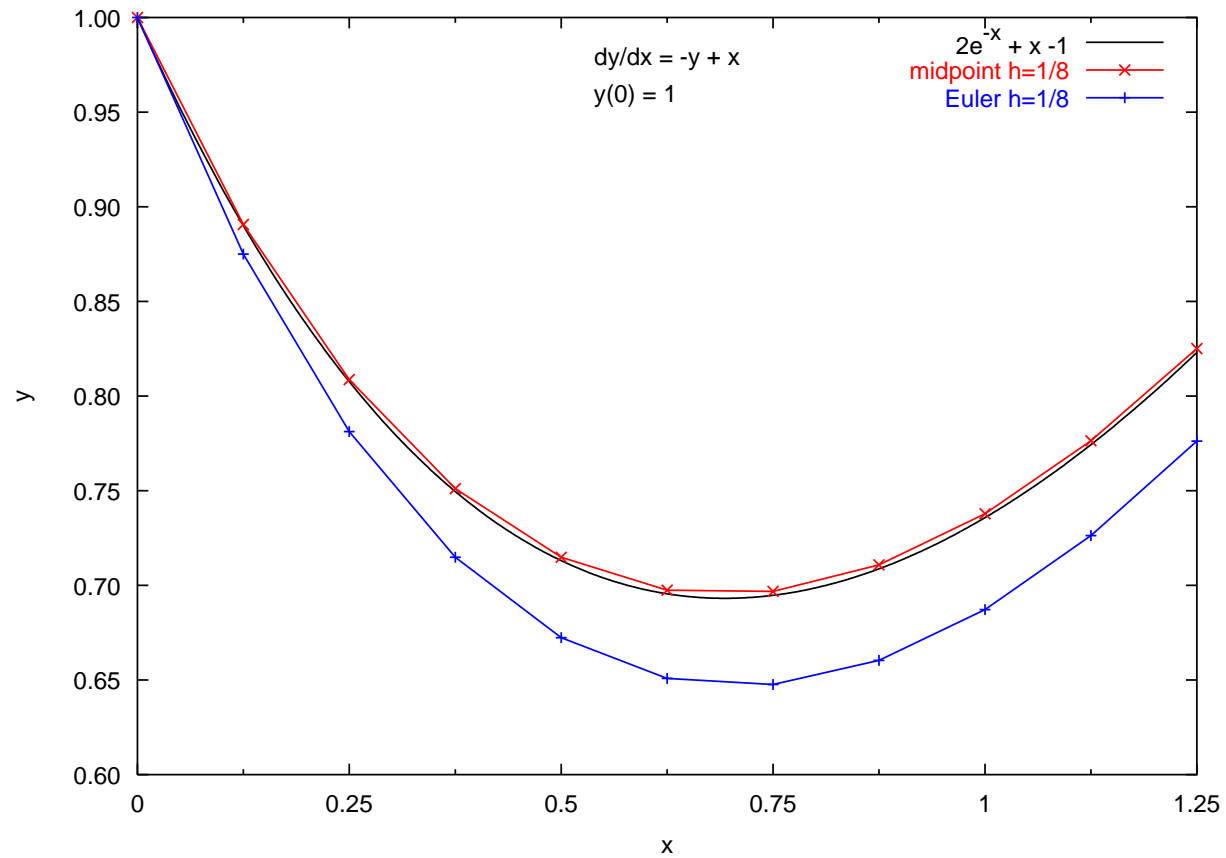
$$y_{n+1} = y_n + h\mathbf{k}_2 + O(h^3). \quad (31c)$$

Dlaczego rząd tej metody równa się 2 (odrzucone wyrazy są rzędu $O(h^2+1)$), dowiemy się później. Podobnie później, w szerszym kontekście, przeanalizujemy stabilność tej metody.

Interpretacja geometryczna jawnej metody punktu środkowego



Przykład zastosowania jawnej metody punktu środkowego



Metody Rungego-Kutty

Jawna metoda punktu środkowego należy do bardzo szerokiej klasy metod, w których dla poprawienia rzędu wartość prawej strony równania oblicza się w pewnych punktach pośrednich. Metody te nazywane są metodami Rungego-Kutty. Z pewnych względów najpopularniejszą z nich jest **jawna, czteroetapowa (klasyczna) metoda Rungego-Kutty**:

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(x_n, y_n) \quad (32a)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_1\right) \quad (32b)$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_2\right) \quad (32c)$$

$$\mathbf{k}_4 = \mathbf{f}(x_n + h, y_n + h\mathbf{k}_3) \quad (32d)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{1}{6}\mathbf{k}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_3 + \frac{1}{6}\mathbf{k}_4 \right) + O(h^5) \quad (32e)$$

Liniowe metody wielokrokowe

Często przywoływaną wadą metod Rungego-Kutty jest konieczność obliczania prawej strony równania w punktach pośrednich, w których rozwiązania “nie potrzebujemy”. Zamiast tego, do uwzględnienia zmienności prawej strony na przestrzeni kroku całkowania, można wykorzystać informację zgromadzoną w *poprzednich* punktach. Metody takie noszą nazwę *liniowych metod wielokrokowych*.

Ogólna metoda wielokrokowa ma postać

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \mathbf{y}_{n-j} - h \sum_{j=0}^k \beta_j \mathbf{f}_{n-j} = 0, \quad (33)$$

gdzie $\mathbf{f}_s \equiv \mathbf{f}(x_s, \mathbf{y}_s)$. h jest krokiem całkowania, o którym w tym momencie zakładamy, że jest stały. (33) zawiera *kombinacje liniowe* poprzednio wyliczonych wartości funkcji i prawych stron równania, co uzasadnia człon “liniowe” w nazwie. Jeżeli $\beta_0 \neq 0$, metoda jest niejawna.

Metody Adamsa — ogólne sformułowanie

Rozważamy problem Cauchy'ego

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), \\ y(x) = y_0. \end{cases} \quad (34)$$

Rozwiązanie ma postać

$$y(x_{n+1}) = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx. \quad (35)$$

Klasyczne metody Adamsa polegają na zastąpieniu $f(x, y(x))$ w (35) przez *wzór ekstrapolacyjny* (Bashforth) lub *interpolacyjny* (Moulton) z węzłami

interpolacji odległymi o krok całkowania, h , i scałkowaniu tego wzoru. Celem takiego postępowania, podobnie jak w metodach Rungego-Kutty, jest uwzględnienie zmienności pochodnej w obrębie kroku całkowania. Zauważmy, że **wynik całkowania wielomianu interpolacyjnego nie zależy od wartości funkcji** — wartości $f(x_l, y_l)$ wchodzą jako „ustalone” wartości interpolowanej funkcji w węzłach.

k-krokowe metody Adamsa:

$$\text{Adams-Bashforth: } y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^k \beta_j \mathbf{f}_{n+1-j} + O(h^{k+1}), \quad (36)$$

$$\text{Adams-Moulton: } y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{\beta}_j \mathbf{f}_{n+1-j} + O(h^{k+1}). \quad (37)$$

Przykład - wyprowadzenie trzykrokowej metody Adamsa-Bashfortha

Funkcję podcałkową w (35) przybliżam poprzez ekstrapolację wielomianową z trzech ostatnio obliczonych punktów, odległych od siebie o h :

$$\begin{aligned} f(x, y(x)) &\simeq f_{\text{extr}}(x) = \frac{(x - x_{n-1})(x - x_n)}{(x_{n-2} - x_{n-1})(x_{n-2} - x_n)} f_{n-2} \\ &+ \frac{(x - x_{n-2})(x - x_n)}{(x_{n-1} - x_{n-2})(x_{n-1} - x_n)} f_{n-1} + \frac{(x - x_{n-2})(x - x_{n-1})}{(x_n - x_{n-2})(x_n - x_{n-1})} f_n \\ &= \frac{1}{2h^2}(x - x_n + h)(x - x_n) f_{n-2} - \frac{1}{h^2}(x - x_n + 2h)(x - x_n) f_{n-1} \\ &\quad + \frac{1}{2h^2}(x - x_n + 2h)(x - x_n + h) f_n. \end{aligned} \tag{38}$$

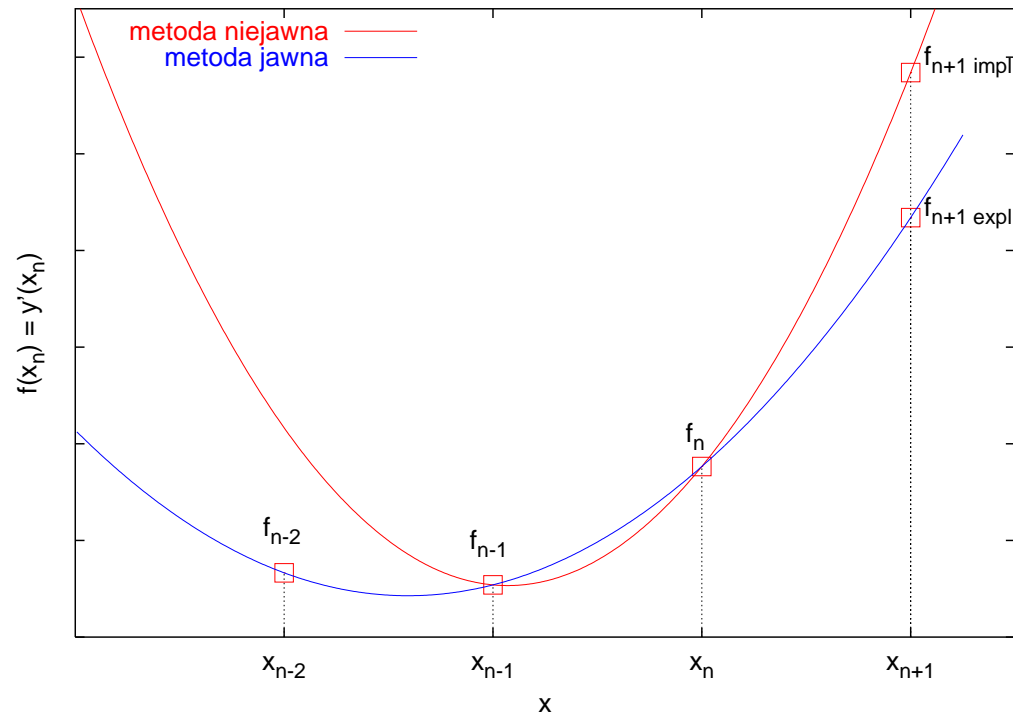
Następnie

$$\begin{aligned} \int_{x_n}^{x_{n+1}} \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)) dx &\simeq \int_{x_n}^{x_{n+1}} \mathbf{f}_{\text{extr}}(x) dx = \frac{1}{2h^2} \mathbf{f}_{n-2} \int_0^h (z+h)z dz \\ &- \frac{1}{h^2} \mathbf{f}_{n-1} \int_0^h (z+2h)z dz + \frac{1}{2h^2} \mathbf{f}_n \int_0^h (z+2h)(z+h) dz \\ &= \frac{1}{2h^2} \cdot \frac{5}{6} h^3 \mathbf{f}_{n-2} - \frac{1}{h^2} \cdot \frac{4}{3} h^3 \mathbf{f}_{n-1} + \frac{1}{2h^2} \cdot \frac{23}{6} h^3 \mathbf{f}_n \\ &= \frac{h}{12} (23\mathbf{f}_n - 16\mathbf{f}_{n-1} + 5\mathbf{f}_{n-2}). \end{aligned} \quad (39)$$

Proszę to porównać z wyrażeniem (40c) poniżej.

Idea konstrukcji metod Adamsa:

rysunek nie jest wierny, jako że pochodnej w punkcie x_{n+1} *nie* oblicza się za pomocą prostej interpolacji/ekstrapolacji



Metody Adamsa-Bashfortha (jawne)

$$y_{n+1} = y_n + hf_n + O(h^2) \quad (40a)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (3f_n - f_{n-1}) + O(h^3) \quad (40b)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} (23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}) + O(h^4) \quad (40c)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) + O(h^5) \quad (40d)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720} (1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} - 1274f_{n-3} + 251f_{n-4}) + O(h^6) \quad (40e)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{1440} (4277f_n - 7923f_{n-1} + 2616f_{n-2} - 7298f_{n-3} + 2877f_{n-4} - 475f_{n-5}) + O(h^7) \quad (40f)$$

Metody Adamsa-Moultona (niejawne)

$$y_{n+1} = y_n + hf_{n+1} + O(h^2) \quad (41a)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f_{n+1} + f_n) + O(h^3) \quad (41b)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} (5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}) + O(h^4) \quad (41c)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) + O(h^5) \quad (41d)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720} (251f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} + 106f_{n-2} - 19f_{n-3}) + O(h^6) \quad (41e)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{1440} (475f_{n+1} + 1427f_n - 798f_{n-1} + 482f_{n-2} - 173f_{n-3} + 27f_{n-4}) + O(h^7) \quad (41f)$$

Podane wyżej metody są *wszystkimi sensownymi* metodami wielokrokowymi o stałym kroku, opartymi o interpolację/ekstrapolację wielomianową.

Zgodność metod Adamsa jest oczywista.