§5. Классификация алгоритмов

В прошлых разделах мы познакомились с двумя методами решения ОДУ. Скажем несколько слов об общей классификации алгоритмов.

1. Точность. Самый главный показатель эффективности метода – это *точность* алгоритма $o(h^к)$. Два алгоритма Эйлера, которые мы рассмотрели, явный и неявный, имеют точность $o(h)$ и $o(h^2)$ соответственно. Здесь имеется в виду точность всего решения, т.е. суммарная погрешность, накапливаемая при интегрировании на промежутке 0...1.

2. Явные / неявные. Со второй классификацией мы тоже уже знакомы – алгоритмы решения ОДУ могут быть явными или неявными. Явными методами решения ОДУ называются такие методы, которые используют в качестве аргумента правой части ОДУ значение y(t) с предыдущего шага. Явные схемы записываются на каждом шаге интегрирования в виде рекуррентного алгебраического соотношения:

$$y_{i+1}=f(y_i). \tag{36}$$

Явные методы особенно просты, т.к. для их реализации следует просто вычислить алгебраическое выражение (36).

Неявные методы связаны с тем, что на каждом шаге интегрирования искомые значения y_{i+1} входят как в разностную форму производной, так и в правую часть уравнения, которое символически можно записать так:

$$f(y_{i+1})=0. \tag{37}$$

Поскольку изначально y_{i+1} неизвестны и подлежат определению, то для реализации неявных методов на каждом шаге интегрирования дифференциального уравнения придется решать алгебраическое уравнение, в общем случае, нелинейное.

Явные методы, как правило, очень просты и экономичны в плане компьютерных вычислений. Основной особенностью неявных методов служит их применимость к решению жестких дифференциальных уравнений.

3. Одно- / многошаговые. Еще один тип классификации алгоритмов связан с тем, что они бывают одношаговыми или многошаговыми. *Одношаговым* называется такой метод, который использует для определения неизвестного y_{i+1} только лишь одну предыдущую точку – y_i. Оба метода Эйлера (явный и неявный) – это одношаговые методы.

В отличие от одношаговых, *многошаговые* методы могут использовать для определения y_{i+1}, помимо y_i, также и предыдущие значения искомой функции y(t): y_{i-1}, y_{i-2} и т.д. В зависимости от количества используемых предыдущих значений функции y(t), многошаговые методы классифицируются на двухшаговые, трехшаговые и т.д. В более общем случае, многошаговые методы могут использовать соотношения для определения не только y_{i+1}, но также y_{i+2} и более дальних значений y.

Приведем пример многошагового метода, который является естественным усложнением неявного метода Эйлера. Напомним основную формулу неявного метода Эйлера (32):

$$\frac{y_{i+1}-y_i}{h}=f(t_{i+1},y_{i+1}) \quad . \tag{38}$$

Повторимся, что, как правило, это алгебраическое уравнение решается итерационными методами, например градиентными, типа метода Ньютона. Для реализации итерационного метода следует выбрать некоторое приближение к решению, т.е. задать некоторое приближенное начальное значение y^0_{i+1}. Основная идея итерационных алгоритмов решения алгебраических уравнений сводится к построению последовательности $y^0_{i+1} \rightarrow y^1_{i+1} \rightarrow y^2_{i+1} \ldots \rightarrow y^M_{i+1}$, которые приближают нас к искомому y_{i+1}.

В качестве начальной итерации для определения y_{i+1} можно взять значение y_i, вычисленное на предыдущем шаге (как в примере в конце предыдущего параграфа). Однако, как легко догадаться, лучше использовать более точное начальное приближение для нулевой итерации, запускающей итерационный алгоритм решения алгебраического уравнения. Для этого следует использовать предысторию решения дифференциального уравнения, т.е. вспомнить о наличии известных y_{i-1}, y_{i-2} и т.д.

Изобразим график y(t), представляющий решение на предыдущих шагах (рис. 20). Отложим на графике найденные ранее y_i, y_{i-1}, y_{i-2} и условно отметим значение y_{i+1} в искомой точке (i+1). Поскольку по умолчанию мы предполагаем, что искомая функция y(t) будет гладкой, а также (на протяжении малого шага) медленно меняющейся функцией t, то, зная значение y в предыдущих точках, можно довольно точно предсказать, каким будет значение в точке t_{i+1}. Для этого мы построим соответствующую аппроксимацию. Например, проще всего экстраполировать функцию y(t) в точку t_{i+1} с помощью прямой линии по точкам y_i, y_{i-1}. Зная еще вдобавок и значение y_{i-2}, можно использовать более точную экстраполяцию в виде параболы.

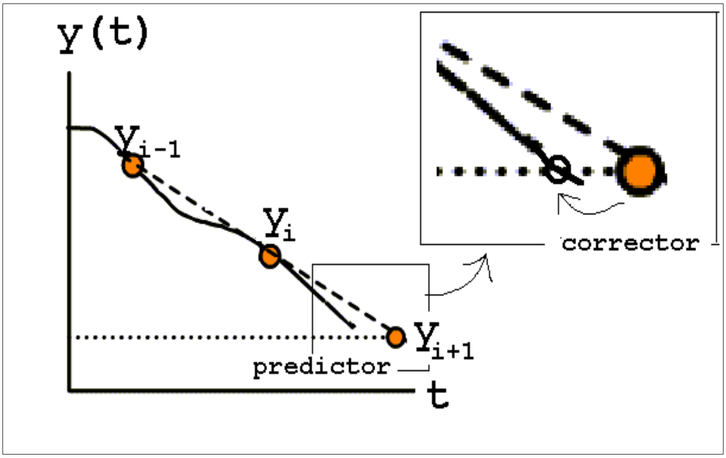

Рис. 20. *Схема «предиктор-корректор»*

Не углубляясь в математические аспекты экстраполяции, рассмотрим лишь один из многошаговых методов – схему *«предиктор-корректор»* (рис. 20). В первой фазе реализации этого алгоритма при пересчете шага строится некоторая экстраполяция. Например, используем простейшую, линейную экстраполяцию, как это показано на рис. 20. В результате получается некоторое приближение y^0_{i+1}, называемое *предиктором*.

Затем, во второй фазе, полученное оценочное значение y^0_{i+1} уточняется путем решения нелинейного уравнения, к которому приводит схема неявного метода. В случае неявного метода Эйлера нам придется решать алгебраическое уравнение

$$\frac{y_{i+1}-y_i}{h}=f(y_{i+1}) \quad . \tag{39}$$

Это уравнение также можно решить методом Ньютона, причем для его запуска использовать в качестве нулевой итерации предсказанное на первой фазе значение y^0_{i+1}. Вторая фаза решения называется *корректором*, а весь алгоритм – алгоритмом «предиктор-корректор». Как правило, в большинстве практических случаев бывает достаточно одного-двух шагов итерационного метода (например, Ньютона) для довольно точного определения y_{i+1}.

Покажем, как можно упростить метод предиктор-корректор с вычислительной точки зрения. Фактически для определения y_{i+1} мы используем поиск корня некоторой алгоритмически заданной функции $g(y_{i+1})=0$. Алгоритм ее задания подразумевает последовательное применение метода Ньютона. Поэтому строить схему предиктор-корректор можно для этой функции g_{i+1}, а не для y_{i+1}. Имея решенное уравнение на предыдущих шагах, т.е. зная y_{i-1}, y_{i-2} и т.д., мы знаем g_{i-1}, g_{i-2} и т.д. Поэтому можно организовывать схему предиктор-корректор, аппроксимируя не значения y_{i+1}, а значение функции g_{i+1}.

Резюмируя, скажем, что основная идея метода предиктор-корректор состоит в том, что значение y_{i+1} аппроксимируется явным методом, а затем уточняется неявным.