

ASC Report No. 26/2014

Методи корекції дефекту, класичні та нові

W. Auzinger, R. Stolyarchuk, and M. Tutz

Institute for Analysis and Scientific Computing Vi-
enna University of Technology — TU Wien
www.asc.tuwien.ac.at ISBN 978-3-902627-05-6

Most recent ASC Reports

- 25/2014 *J.M. Melenk and T.P. Wihler*
A posteriori error analysis of hp -FEM for singularly perturbed problems
- 24/2014 *J.M. Melenk and C. Xenophontos*
Robust exponential convergence of hp -FEM in balanced norms for singularly perturbed reaction-diffusion equations
- 23/2014 *M. Feischl, G. Gantner, and D. Praetorius*
Reliable and efficient a posteriori error estimation for adaptive IGA boundary element methods for weakly-singular integral equations
- 22/2014 *W. Auzinger, O. Koch, M. Thalhammer*
Defect-based local error estimators for high-order splitting methods involving three linear operators
- 21/2014 *A. Jüngel and N. Zamponi*
Boundedness of weak solutions to cross-diffusion systems from population dynamics
- 20/2014 *A. Jüngel*
The boundedness-by-entropy principle for cross-diffusion systems
- 19/2014 *D. Boffi, L. Gastaldi, M. Ruggeri*
Mixed formulation for interface problems with distributed Lagrange multiplier
- 18/2014 *M. Halla, T. Hohage, L. Nannen, J. Schöberl*
Hardy Space Infinite Elements for Time-Harmonic Wave Equations with Phase Velocities of Different Signs
- 17/2014 *M. Feischl, G. Gantner, and D. Praetorius*
A posteriori error estimation for adaptive IGA boundary element methods
- 16/2014 *M. Feischl, T. Führer, G. Mitscha-Eibl, D. Praetorius, and E.P. Stephan*
Convergence of adaptive BEM and adaptive FEM-BEM coupling for estimators without h -weighting factor

Institute for Analysis and Scientific Computing
Vienna University of Technology
Wiedner Hauptstraße 8–10
1040 Wien, Austria

E-Mail: admin@asc.tuwien.ac.at
WWW: <http://www.asc.tuwien.ac.at>
FAX: +43-1-58801-10196

ISBN 978-3-902627-05-6

© Alle Rechte vorbehalten. Nachdruck nur mit Genehmigung des Autors.



МЕТОДИ КОРЕКЦІЇ ДЕФЕКТУ, КЛАСИЧНІ ТА НОВІ

В. Ауцінгер^a, Р. Р. Столярчук^b, М. Тутц^a

^aІнститут Аналізу і Наукових Обчислень, Технічний Університет

Віднер Хауптштрассе, 8-10/E101, A-1040 Відень, Австрія

^bНаціональний університет "Львівська Політехніка"

вул. С. Бандери 12, 79013, Львів, Україна

Методи корекції дефекту базуються на ідеї виміру якості наближеного розв'язку за допомогою формування дефекту, або залишку, по відношенню до даної задачі. За допомогою процедури розв'язку назад отримується оцінка похибки. Цей процес може бути продовжений ітеративним чином. Метою цього огляду є подальше поширення концепції що розглядається. Більш того, вперше дано загальний і узгоджений огляд різноманітних типів методів корекції дефекту і їх застосувань в контексті дискретизаційних схем для диференціальних рівнянь. Після опису загального алгоритмічного шаблону ми обговоримо деякі спеціальні технології, що використовуються при в розв'язку звичайних диференціальних рівнянь. Також представлені нові результати стосовно застосування до неявних задач.

Ключові слова: Корекція дефекту, дискретизація, звичайні диференціальні рівняння

2000 MSC: 65-02, 65L99

УДК: 519.6

I. Вступ

Методи корекції дефекту (DeC) базуються на особливому способі оцінки локальної або глобальної похибок, зокрема для диференціальних та інтегральних рівнянь. Використання простих і стійких інтегральних схем в поєднанні з дефектною (залишковою) оцінкою, призводить до обчислюваної оцінки похибки, що дозволяє покращення відповідного чисельного розв'язку.

У першій частині цієї статті, в загальній постановці описується зазначений принцип з акцентом на основні ідеї та алгоритмічні шаблони. Надалі, ми більш детально розглянемо його застосування до розв'язання звичайних диференціальних рівнянь. Правильний вибір алгоритмічної компоненти не завжди є простим, тому будуть розглянуті деякі питання з цим пов'язані.

Ми не зазначаємо детально всіх алгоритмічних компонентів, наприклад, про необхідність інтерполяції і квадратурних процесів. Але ці стандартні чисельні процедури, є легкими для розуміння та реалізації. Крім того, в даній роботі не передбачений вичерпний огляд наявної тематичної літератури.

Вступна частина цього тексту є розширеним перекладом огляду запропонованого в [1]. Ми обґрунтовуємо принцип DeC дещо інакше ніж це зроблено в класичній роботі [19], з чіткою орієнтацією на принципи, що лежать в основі оцінки похибки.

Також приведено деякі останні розробки, зокрема про роль структури похибки для поведінки збіжності. Крім того, в даній роботі представлена алгоритмічна версія для диференціальних рівнянь у неявній формі, запропонованих в [20]. Ми використовуємо

верхні індекси для лічильників циклу і нижні індекси для нумерації по дискретній сітці розбиття.

II. Основні поняття і загальні алгоритмічні шаблони

Багато ітераційних чисельних алгоритмів базуються на наступному принципі. Нехай задана початкова величина y_0 . Для $i = 0, 1, 2, \dots$ потрібно:

- Обчислити залишок, або 'дефект', d^i для поточної ітерації y^i стосовно даної задачі,
- Розв'язати задачу ще раз для корекції ε^i за допомогою відповідного методу,
- Застосувати корекцію для одержання наступної ітерації $y^{i+1} := y^i - \varepsilon^i$.

Класичними прикладами є стаціонарні ітераційні методи для лінійних систем рівнянь та ітерації Ньютон для систем нелінійних рівнянь. Для початку наших загальних міркувань, розглянемо дану початкову задачу у вигляді системи нелінійних рівнянь,

$$\phi(y) = 0, \quad \text{з точним розв'язком } y = y^*. \quad (1)$$

A Оцінка похибки що базується на нелінійній апроксимації

Припустимо, що задано деяку допустиму лінійну або нелінійну апроксимацію $\tilde{\phi} \approx \phi$. Розглянемо деяку процедуру з метою оцінки похибки даного наближеного розв'язку y^0 і y^* . Для цього ми визначаємо дефект

$$d^0 := \phi(y^0)$$

y_0 , як величину, при якій $\phi(y^0)$ не є апроксимацією $0 = \phi(y^*)$. Крім того, з допомогою y^0 , d^0 ми розглядаємо, так звану сусідню задачу для задачі (1),

$$\phi(y) = d^0, \quad \text{при точному розв'язку } y = y^0. \quad (2)$$

Для оцінки похибки y^0 ми приводимо два евристичні принципи (А) і (В) в термінології роботи [19] (див. також [7]), вони засновані на ідеї, що (2) може вважатися тісно пов'язаним з (1), за умови досить малого d^0 .

(А) Нехай \tilde{y} та \tilde{y}^0 розв'язки рівняння $\tilde{\phi}(y) = 0$ і відповідно $\tilde{\phi}(y) = d^0$; ми припускаємо, що вони можуть бути сформовані при низьких обчислювальних затратах. Розглядаючи вихідну задачу (1), сусідню задачу (2) разом з їх наближеннями,

$$\begin{aligned} \phi(y^*) &= 0 & \phi(y^0) &= d^0 \\ \tilde{\phi}(\tilde{y}) &= 0 & \tilde{\phi}(\tilde{y}^0) &= d^0 \end{aligned}$$

припускаємо що має місце наближена тотожність

$$\tilde{y}^0 - \tilde{y} \approx y^0 - y^*.$$

Це приводить до наступної оцінки похибки

$$\varepsilon^0 := \tilde{y}^0 - \tilde{y} \quad (3a)$$

що є обчислювальною оцінкою для похибки $e^0 := y^0 - y^*$. Ми можемо використати її для одержання оновленої апроксимації y^1 у вигляді

$$y^1 := y^0 - \varepsilon^0 = y^0 - (\tilde{y}^0 - \tilde{y}). \quad (3b)$$

(В) Розглянемо похибку (локальна залишкова похибка) $\ell^* := \tilde{\phi}(y^*)$, при якій y^* не задовольняє наближене (апроксимаційне) рівняння $\tilde{\phi}(y) = 0$. Покладаючи $\tilde{d}^0 := \tilde{\phi}(y^0)$, і розглядаючи апроксимаційну тотожність

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(y^*) - \tilde{\phi}(y^0) &\approx \phi(y^*) - \phi(y^0), \\ \text{тобто } \ell^* - \tilde{d}^0 &\approx -d^0, \end{aligned}$$

пропонується вибір наступної оцінки локальної залишкової похибки

$$\lambda^0 := \tilde{d}^0 - d^0 \quad (4a)$$

тобто, $\lambda^0 = (\tilde{\phi} - \phi)(y^0)$, Відмітимо що $-d^0 = \phi(y^*) - d^0$ є локальною залишковою похибкою для y^* по відношенню до (2). У випадку $y^0 = \tilde{y}$, тобто, $\tilde{\phi}(y^0) = 0$, ми отримуємо $\lambda^0 = -d^0 \approx \ell^*$.

Розв'язуючи рівняння

$$\tilde{\phi}(y^1) = \lambda^0, \quad (4b)$$

ми можемо використати λ^0 для одержання оновленої апроксимації y^1 що також забезпечує

оцінку похибки: $\varepsilon^0 := y^0 - y^1 \approx y^0 - y^* = e^0$. Рівняння (4b) може бути переписане з точки зору оцінки похибки як

$$\tilde{\phi}(y^0 - \varepsilon^0) = \lambda^0, \quad (4c)$$

апроксимуючи рівняння похибки $\tilde{\phi}(y^0 - e^0) = \ell^*$.

В загальному, принципи (А) та (В) не є еквівалентними. Однак, якщо $\tilde{\phi}(y) = Py - c$ є афінним відображенням, то легко перевірити, що (А) і (В) призводять до тієї ж оцінки похибки ε^0 , яка може бути отримана безпосередньо як розв'язок корекційного рівняння

$$P\varepsilon^0 = d^0, \quad (5)$$

і відповідна оцінка локальної залишкової похибки буде $\lambda^0 = (Py^0 - c) - d^0$.

В Ітераційна корекція дефекту (IDeC)

Обидва підходи (А) і (В) призначені для апостеріорної оцінки похибки, і вони також можуть бути використані для розробки ітераційних алгоритмів розв'язку, використовуючи отримані в ході ітерації оновлені версії сусідніх задач. Це призводить до двох альтернативних версій методу ітераційної корекції дефекту (IDeC), починаючи з початкового наближення y^0 . Очевидно, що, $y^0 = \tilde{y}$ є природним вибором.

IDeC (А): розв'язати $\tilde{\phi}(\tilde{y}) = 0$

Для $i = 0, 1, 2, \dots$:

- Обчислити $d^i := \phi(y^i)$
- Розв'язати $\tilde{\phi}(\tilde{y}^i) = d^i$
- Поклавши $\varepsilon^i := \tilde{y}^i - \tilde{y}$
- оновити $y^{i+1} := y^i - \varepsilon^i$

Поправки ε^i відіграють роль послідовних оцінок похибки $e^i = y^i - y^*$.

IDeC (В): Покласти $\lambda^{-1} := \tilde{\phi}(y^0)$

Для $i = 0, 1, 2, \dots$:

- Обчислити $d^i := \phi(y^i)$
- Оновити $\lambda^i := \lambda^{i-1} - d^i$
- Розв'язати $\tilde{\phi}(y^{i+1}) = \lambda^i$

Утворені в результаті накопичення дефектів величини λ^i , $\lambda^i = \tilde{\phi}(y^0) - d^0 - \dots - d^i$, відіграють роль послідовних наближень для локальної залишкової похибки $\ell^* = \tilde{\phi}(y^*)$.

Еквівалентне переформулювання має вигляд

Для $i = 0, 1, 2, \dots$:

- Обчислити $d^i := \phi(y^i)$
- Розв'язати $\tilde{\phi}(y^{i+1}) = (\tilde{\phi} - \phi)(y^i)$

Примітки.

- Нелінійна IDeC має вигляд ‘схеми повної апрокс/симації’, яку ми розв’язуємо для нового наб/лиження на кожному кроці. Якщо $\tilde{\phi}$ афінне, IDeC (A) і IDeC (B) є знову еквівалентними і можуть бути переформульованими як корекційна схема в термінах лінійних b кроків назад для корекції $\varepsilon^i = \tilde{y}^i - \hat{y}$, як це представлено в співвідношенні (5).
- IDeC (B) може бути переписано в формі співвідношення (4с).
- Зауважимо, що y^* є фіксованою точкою IDeC ітерації оскільки $d^* := \phi(y^*) = 0$.

Для систем алгебраїчних рівнянь, вибір $\tilde{\phi}$ нелінійним, як правило, не дуже актуальний з практичної точки зору. Швидше, така процедура буде корисною в бідьш загальному контексті, де ϕ представляє оператор між просторами функцій (як правило, диференціальний або інтегральний оператор), і де ϕ є дискретизацією ϕ . Це приводить нас до класу методів DeC для диференціальних або інтегральних рівнянь.

III. Застосування до звичайних диференціальних рівнянь (ЗДР)

Ми в основному зосередимося на IDeC (A), ‘класичному’ методі, згідно з [21]. IDeC (B) може бути реалізований аналогічним чином, і ми відзначимо це в міру необхідності.

A Основна версія: IDeC (A) на основі методу Ейлера вперед

Ідентифікуємо оригінальну задачу (OЗ) $\phi(y) = 0$ з початковою задачею (ПЗ) для системи n ЗДР,

$$\frac{d}{dx} y(x) = f(x, y(x)), \quad y(x_0) = y_0, \quad (6a)$$

з точним розв’язком $y^*(x) \in \mathbf{R}^n$. Це означає

$$\phi(y)(x) := \frac{d}{dx} y(x) - f(x, y(x)), \quad (6b)$$

з фіксованою початковою умовою $y(x_0) = y_0$. Щоб бути більш точними, можна сказати, що основні функціональні простори і початкова умова $y(x_0) = y_0$ є частиною повного опису задачі.

Більше того, ми ідентифікуємо задачу $\tilde{\phi}(y) = 0$ з схемою дискретизації для (6), на даний момент ми припускаємо, що використовується сталий крок h , для точок розбиття $x_l = a + l h$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Розглянемо, наприклад, точний метод Ейлера вперед першого порядку

$$\frac{Y_{l+1}^0 - Y_l^0}{h} = f(x_l, Y_l^0), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (7a)$$

і пов’яжемо його з оператором $\tilde{\phi}$, який діє на неперервні функції $y(x)$ що задовольняють початкову

умову $y(x_0) = y_0$,

$$\tilde{\phi}(y)(x_l) := \frac{y(x_{l+1}) - y(x_l)}{h} - f(x_l, y(x_l)) = 0. \quad (7b)$$

Вибираємо неперервну функцію $y^0(x)$, що інтерполює Y_l^0 у точках сітки x_l . Стандартним вибором є кусково-неперервний поліноміальний інтерполіант ступеня p на $p+1$ послідовних точках сітки розбиття, тобто кускова інтерполяція на підінтервалах \mathbf{I}_j довжиною $p h$. У відповідному кусково-поліноміальному просторі \mathcal{P}_p , $y^0(x)$ є розв’язком $\tilde{\phi}(y) = 0$. Дефект $d^0 := \phi(y^0)$ визначається коректно,

$$d^0(x) = \phi(y^0)(x) = \frac{d}{dx} y^0(x) - f(x, y^0(x)), \quad (8a)$$

і $y^0(x)$ є точним розв’язком сусідньої початкової задачі (СПЗ)

$$\frac{d}{dx} y(x) = f(x, y(x)) + d^0(x), \quad y(x_0) = y_0. \quad (8b)$$

Розглянемо корекційний крок $y^0 \mapsto y^1$ типу (A),

$$\begin{aligned} \text{Розв’язати } \tilde{\phi}(\tilde{y}^0) &= d^0, \\ \text{далі } y^1(x) &:= y^0(x) - (\tilde{y}^0 - y^0)(x). \end{aligned}$$

Це означає, що $\tilde{y}^0 \in \mathcal{P}_p$ слід розуміти як інтерполіант дискретних величин \tilde{Y}_j^0 отриманих в результаті розв’язку

$$\frac{\tilde{Y}_{l+1}^0 - \tilde{Y}_l^0}{h} = f(x_l, \tilde{Y}_l^0) + d^0(x_l), \quad l = 0, 1, 2, \dots,$$

що є наближенням Ейлера вперед до (8b), з додатковою поточною оцінкою дефекту в точках розбиття x_l .

Згідно нашої загальної характеристики IDeC (A), цей процес має бути продовжений для отримання наступних ітерацій, $y^i(x)$. Якщо ми використовуємо m IDeC кроків на першому підінтервалі $\mathbf{I}_1 = [a, a + p h]$, то можливо перезапустити процес в початковій точці $a + p h$ для другого відрізка \mathbf{I}_2 , з новим початковим значенням $y(a + p h) = y^m(a + p h)$. Це називають локальним, або активним режимом. Альтернативно можна інтегрувати методом Ейлера вперед вздовж довшого інтервалу I що охоплює декілька \mathbf{I}_j і застосовувати IDeC I , де кожен $y^i(x)$ розглядається на повному інтервалі. Це називається глобальним, або пасивним режимом.

Зауваження. Точний розв’язок y^* не входить в сферу ітерацій, так як y^i належить простору \mathcal{P}_p . Але існує фіксована точка $\hat{y} \in \mathcal{P}_p$ пов’язана з y^* : Це характеризується властивістю $\hat{d} := \phi(\hat{y}) = 0$, тобто, $\frac{d}{dx} \hat{y}(x_l) = f(x_l, \hat{y}(x_l))$ для всіх l . Це означає, що \hat{y} є колокаційним поліномом, і IDeC, що базується на методі Ейлера можна розглядати як ітеративний метод для апроксимації колокаційних розв’язків. Насправді, це означає що замість співвідношення (6), в якості ефективної вихідної задачі можна розглядати систему колокаційних рівнянь $\phi(\hat{y})(x_l) = \frac{d}{dx} \hat{y}(x_l) - f(x, \hat{y}(x_l)) = 0$ в колокаційних точках x_l .

В IDeC що базуються на методах вищого порядку $\tilde{\phi}$. Замітки стосовно теорії збіжності

При застосуванні IDeC до ПЗ замість методу Ейлера можна використати довільну базову схему $\tilde{\phi}$. Наприклад, в одній з перших робіт [21], було використано класичний метод Рунге-Кутта (РК) 4 порядку. Використання РК в корекції кроку означає, що в кожній окремій оцінці правої частини поточкове значення поточного дефекту має бути додане (РК застосовуються до [СЗ]). Використання РК як базової конструкції для IDeC також розглядалося багатьма авторами.

Незважаючи на природню ідею стосовно IDeC, аналіз збіжності не є однозначним. Отримання повного вищого порядку асимптотичної збіжності при $h \rightarrow 0$ вимагає

- достатньо гладкої задачі,
- достатньо високого ступеня p для локальних інтерполіантів $y^i(x)$,
- достатньої гладкості цих інтерполіантів, в сенсі обмеженості певної кількості похідних $y^i(x)$, рівномірно при $h \rightarrow 0$.

Типовий результат збіжності має вигляд :

Якщо послідовність сіток є рівновіддаленою і схема що застосовується має порядок q , то t IDeC кроків призводять до похибки $y^m(x) - y^(x) = \mathcal{O}(h^{\min\{p, mq\}})$ при $h \rightarrow 0$, де p є ступенем інтерполяції.*

Отриманий порядок p , як правило, ідентичний до апроксимаційного порядку фіксованої точки $\hat{y} \in \mathcal{P}_p$, що в узагальненому сенсі відповідає колокаційному поліному.

Природно, IDeC також може бути застосований до крайових задач (КЗ). Для двоточкових крайових задач другого порядку, необхідні алгоритмічні модифікації вперше були описані в [10]. Тут, особливу увагу слід звернути на кінці інтерполяційних інтервалів I_j , де появляються додаткові дефекти через стрибки похідних локальних інтерполіантів.

С Вплив нерівновіддаленої сітки

Як уже згадувалося раніше, гладкість глобальної похибки має важливе значення для успішного виконання IDeC ітерацій. Технічним засобом для забезпечення такої властивості гладкості є асимптотичне розвинення глобальної похибки дискретизації $\tilde{y} - y^*$ для базової схеми, існування якого було доведено для РК методів на послідовності сталих кроків. Збіжність результатів для IDeC, отриманих таким способом, подається, в [11], див також [18].

Припущення про сталий крок видається цілком обмеженим, але достатньо припустити, що крок h

буде фіксованим протягом кожного інтервалу інтерполяції. Зауважимо, що для алгоритму IDeC, ця вимога є дійсно необхідною, як було показано в [3]. В іншому випадку похибка $\tilde{y} - y^*$ втрачає властивості необхідної гладкості, незважаючи на її асимптотичний порядок.

Щоб проілюструвати цей факт, розглянемо схему Ейлера вперед (7а), застосовану до простого ЗДР $y'(x) = y(x) - (\sin x + \cos x)$. Для $y(0) = 1$, розв'язок ПЗ має вигляд $y^*(x) = \cos x$. Ми застосуємо (7а) на відрізку $x \in [0, 1]$ і візьмемо 20 кроків інтегрування з постійним кроком $h = 1/20$. Тоді ми повторюємо процедуру на нерівномірній сітці, де кроки h_j є відносно малими випадковими збуреннями кроку h . На мал. 1 показано поведінку похибки (нижня крива) і перша часткова різниця вздовж сітки (верхня крива) для обох випадків. У правому графіку добре видно нерегулярну зміну похибки, і цей ефект стає ще більш значним для різниць вищих порядків. Це не складно пояснити теоретично, див [20]. Як наслідок, вищі похідні асоційованих інтерполіантів $y^i(x)$ не є рівномірно обмеженими, що буде вимагатися в теорії збіжності для IDeC схем.

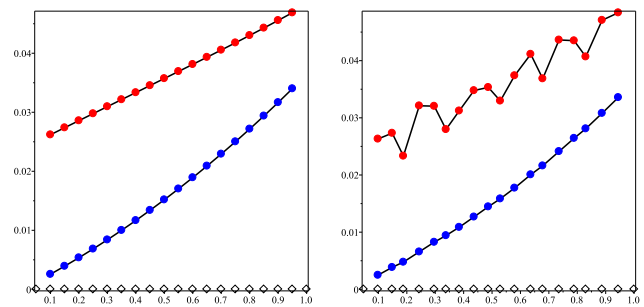


Рис. 1. Поведінка похибки розв'язку методом Ейлера, на рівномірній сітці (ліворуч) і нерівномірній сітці (праворуч)

Д Реформулювання в термінах інтегральних рівнянь. IQDeC (А) і IQDeC (В) ('спектральні IDeC')

ЗДР може бути перетворено в інтегральне рівняння. Проінтегрувавши (6а) в інтервалі двох послідовних точок сітки отримаємо

$$\frac{y(x_{l+1}) - y(x_l)}{h} = \frac{1}{h} \int_{x_l}^{x_{l+1}} f(x, y(x)) dx. \quad (9)$$

Зауважимо, що ліва сторона цього співвідношення такого ж типу як в наближенні Ейлера (7а). Тому природно розглядати в якості оригінальної задачі співвідношення (9) замість співвідношення (6). Крім того, для чисельної оцінки, інтеграл в правій частині має бути апроксимованим за допомогою поліноміальних квадратур використовуючи $p+1$ точки розбиття, які є доступними в поточному робочому інтервалі $I_j \ni x_l$. Коефіцієнти залежать від розташування x_l в I_j . Використовуючи Q в якості загального символу для цих квадратур ми отримаємо модифікацію

оригінальної задачі заміною ЗДР (6b), що визначена на сітці розбиття $\{x_l\}$ на

$$\phi(y)(x_l) := \frac{y(x_{l+1}) - y(x_l)}{h} - (Qf)(x, y(x))_l = 0, \quad (10a)$$

Згідно квадратурної похибки, (10a) є 'точною скінченно-різницевою схемою' яку задовольняє y^* . Використання терміну y' при старшій похідній аналогічне як для співвідношення (10a) так і для (7b). Співвідношення (10a) призводить до альтернативного визначення дефекту в точці оцінювання x_l , а саме

$$\begin{aligned} \bar{d}^i(x_l) &:= \phi(y^i)(x_l) \\ &= \frac{y^i(x_{l+1}) - y^i(x_l)}{h} - (Qf)(x, y^i(x))_l. \end{aligned} \quad (10b)$$

Це можна інтерпретувати в тому розумінні, що спочатку, оригінальний дефект $d^i(x)$ 'передумовлений', застосуванням локальних квадратур. Всі інші алгоритмічні компоненти IDeC залишаються незмінними, з відповідно визначеними сусідніми задачами.

Ця версія розглянута в [3], і позначена як IQDeC (типу (A)). Варіанти в дусі IQDeC типу (B) також були розроблені, часто їх називають "спектральною корекцією дефекту" і вперше були описані в роботі [9]. Доведення збіжності див. в [13].

Зауваження.

- При відповідному виборі квадратури дефекту, фіксована точки IQDeC така ж, як для IDeC. Насправді, рівняння $\hat{d} = \phi(\hat{u}) = 0$ виявляється тісно пов'язаним з переформулюванням відповідного колокаційного рівняння $\hat{y}'(x_l) = f(x_l, \hat{y}(x_l))$ в вигляді точної скінченно-різницевої схеми апроксимованої через квадратури. Остання тісно пов'язана з неявними методами Рунге-Кутта (ІРК) переформульованими стосовно колокаційних рівнянь.
- Є декілька мотивів для розгляду IQDeC. Основним є те, що, як показано в [3], його властивості збіжності набагато менше підлягають впливу нерівномірного розподілу x_l . Це обумовлено тісним взаємозв'язком між $\tilde{\phi}$ і ϕ , див. (7a) і (10a). Наприклад, у випадку метода Ейлера вперед (прямий метод Ейлера), показана нормальна послідовність порядку 1,2,3,..., на відміну від класичних IDeC.

Ми також посилаємося на [2] для мотивації і пояснень техніки IQDeC в контексті напівлінійних задач.

- IQDeC також тісно пов'язаний з поняттям точних різницевоїх схем, див., наприклад, [12, 16]: рівняння (9) являє собою точну різницеву схему (TRC) яку задовольняє точний розв'язок y^* . У контексті з IQDeC, дефект, взято по відношенні до цієї TRC, використовуючи відповідні

квадратурні формули для оцінки правої частини. Однак спосіб 'усікання' TRC відрізняється від відповідного поданого в роботах в [12, 16], де будуються компактні схеми і корекція дефекту, як правило, не розглядається в алгоритмічному сенсі.

- Подібні міркування можна застосувати для задач другого порядку (які також розглядаються в IV.). Ми вважаємо, що цікаво було б розглянути комбінування компактно усічених TRC схем з корекцією дефекту як альтернативу до простих ітерацій фіксованої точки або більш складних схем типу Ньютон застосованих до TRC.
- Для відповідного підходу в контексті двоточкових крайових задач другого порядку, для змінного кроку сітки, див. [8].
- Ще одна модифікація може бути використана для побудови суперзбіжних методів IDeC: В [3] ('IPDeC') і в [17], використання рівновіддаленої базисної сітки поєднується з оцінкою дефекту на гауссовських вузлах, таким чином, що в результаті ітерації сходяться до відповідної фіксованої точки (колокації у вузлах Гауса).

Е Жорсткі і сингулярні задачі

Для жорстких систем звичайних диференціальних рівнянь, DeC методи були використані з деяким успіхом. Однак, як і для будь-якого іншого методу, властивості збіжності сильно залежать від типу задачі. Основною трудностю для DeC є те, що швидкість збіжності може бути досить поганою для компонент похибки, пов'язаних з жорсткими власними напрямками. Огляд і додатковий матеріал по даній темі можна знайти в [4] або [9]. Аналогічні зауваження відносяться до сингулярних задач.

Ф Крайові задачі (КЗ) і 'Відстрочена корекція'

Історично, одним з перших застосування типу (B) оцінки похибки (4a) появляється в контексті скінченно-різницевоїх наближень до КЗ

$$\frac{d}{dx} y(x) = f(x, y(x)), \quad R(y(x_0), y(b)) = 0, \quad (11)$$

які розглядаються на відрізку $[a, b]$ (з граничними умовами представленими функцією R), або задач вищого порядку. (Класичний текст по темі можна знайти в [15].) Для скінченно-різницевої апроксимації $y'(x_l)$, наприклад, як в (7a), асимптотичний розклад локальної залишкової похибки ℓ^* є простим завдяки використанню рядів Тейлора і співвідношення (11):

$$\begin{aligned} \ell^*(x_l) &= \tilde{\phi}(y^*)(x_l) = \frac{y^*(x_{l+1}) - y^*(x_l)}{h} - \frac{d}{dx} y^*(x_l) \\ &= \frac{h}{2} \frac{d^2}{dx^2} y^*(x_l) + \frac{h^2}{6} \frac{d^3}{dx^3} y^*(x_l) + \dots \end{aligned} \quad (12)$$

Ідея полягає в тому, щоб апроксимувати головний вираз $\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} y^*(x_l)$ різницевою часткою другого порядку використовуючи три послідовні вузли. Це визначає локальну залишкову похибку апроксимації, пов'язану з апроксимацією вихідної задачі, що відповідає більш високому порядку дискретизації (11). Відповідна оцінка λ^0 отримується шляхом оцінювання апроксимованої локальної залишкової похибки при заданому $y = y^0$. Це використовується на першому кроці IDeC (B) процедури, див (4). У цьому контексті, поновлення [OP] в ході ітерації є природним, використовуючи різниці апроксимації більш високого порядку в (12), які потрібно оцінювати на ітераціях y^i .

ІDeC такого типу, як правило називаються відкладеними методами корекції і набули широкого застосування в контексті крайових задач. Аналіз значною мірою спирається на властивості гладкості похибки. Як правило, вимагається наявності кусково-нерівномірних сіток. Труднощі будуть пов'язані з фактом, що використання різницевих часток приводить до зростання складності і вони повинні бути модифікованими біля країв та в точках зміни кроку.

G Оцінка похибки на основі дефекту і адаптивність

На практиці принцип DeC також застосовується – в дусі нашої початкової мотивації – для оцінки похибки даного чисельного розв'язку з метою адаптації сітки. Типовий випадок описаний і проаналізований у [7]: Припустимо, що y^0 є кусково-полиноміальним колокаційним розв'язком крайової задачі (11). Колокаційні методи дуже популярні і мають хороші властивості збіжності. Згідно з визначенням y^0 , поточковий дефект $d^0(x) = \frac{d}{dx} y^0(x) - f(x, y^0(x))$ прямує до нуля в вузлах колокації які, наприклад, вибираються в середині колокаційних інтервалів I_j . Таким чином, інформація про якість y^0 буде отримана шляхом оцінки $d^0(x)$ в інших вузлах, наприклад, кінці I_j .

Для оцінки глобальної похибки $e^0(x) = (y^0 - y^*)(x)$ можна використовувати оцінювач похибки (3a) типу (A) який базується на допоміжних схемах нижчого порядку $\tilde{\phi}$, наприклад методі Ейлера чи правилі середньої точки вздовж колокаційної сітки. Заміна поточкового дефекту d^0 модифікованим дефектом \tilde{d}^0 , аналогічно як в (10b), є досить вигідною, оскільки ця версія є стійкою по відношенню до відсутності гладкості y^0 який є лише C^1 функцією. В роботі [6] було доведено, що така процедура призводить до надійного і асимптотично коректного оцінювача похибки типу QDeC.

З відповідно модифікованою версією \tilde{d}^0 , див. [5], оцінка QDeC може бути поширеною і на задачі другого або більш високого порядку.

IV. Розширення

У цьому розділі ми більш детально опишемо недавні дослідження по застосуванню I*DeC техніки (версія A) до початкових неявних задач першого і другого порядку. Також представлено чисельні результати для деяких тестових прикладів. Очевидно, що ці версії можуть бути застосовані в окремому випадку для явних ЗДР.

A IQDeC (A) для неявних звичайних диференціальних рівнянь першого порядку – IIQDeC

Розглянемо початкову задачу для рівняння першого порядку виду

$$F\left(x, y(x), \frac{d}{dx} y(x)\right) = 0, \quad y(x_0) = y_0. \quad (13)$$

IIQDeC алгоритм для розв'язку (13) є продовженням IQDeC підходу поясненого в III. D. Для чисельного розв'язку рівняння (13) введемо сітку, що містить декілька підінтервалів I_1, I_2, \dots , де відносно положення точок сітки в I_j визначається $m + 1$ параметрами $0 \leq c_0 < c_1 < \dots < c_{m-1} < c_m \leq 1$, а абсолютне положення визначається

$$x_{j,l} = x_{j-1} + c_l h_j, \quad j = 1, 2, \dots, \quad l = 0 \dots m,$$

де h_j відрізки I_j . На цій сітці, обчислюється перше наближення $Y_{j,l}^0$, використовуючи зворотну схему Ейлера в якості основної дискретизаційної схеми, тобто ми розв'язуємо

$$F\left(x_{j,l}, Y_{j,l}^0, \frac{Y_{j,l}^0 - Y_{j,l-1}^0}{h_{j,l}}\right) = 0, \quad (14)$$

починаючи з $Y_{1,0}^0 = y_0$ при $x_{1,0} = x_0$. $Y_{j,l}^0$ а потім $Y_{j,l}^i$ ($i = 1, 2, \dots$) інтерполюються поліномами $p_j^i(x)$ степеня $\leq m$, які визначають кусково-полиноміальну функцію $p^i(x) = p_j^i(x)$. Поточковий дефект $p_j^i(x)$ по відношенню до (13) має вигляд

$$d_j^i(x) = F\left(x, p_j^i(x), \frac{d}{dx} p_j^i(x)\right), \quad x \in I_j.$$

Тепер визначимо локально модифікований дефект, розширення співвідношення (10b) для неявного випадку,

$$\tilde{d}_{j,l}^i := \sum_{\mu=1}^m \alpha_{l,\mu} d_j^i(x_{j,\mu}) \approx \frac{\int_{x_{j,l-1}}^{x_{j,l}} d_j^i(x) dx}{x_{j,l} - x_{j,l-1}}. \quad (15)$$

коєфіцієнти $\alpha_{l,\mu}$ є вагами відповідних інтерполяційних квадратурних формул з вузлами c_1, \dots, c_m і ступенем точності $m - 1$. З базисною дискретизаційною схемою (14), і дефектом (15), сусідня дискретизація на задача має вигляд

$$F\left(x_{j,l}, \tilde{Y}_{j,l}^i, \frac{\tilde{Y}_{j,l}^i - \tilde{Y}_{j,l-1}^i}{h_{j,l}}\right) = \tilde{d}_{j,l}^i, \quad (16)$$

починаючи з $\tilde{Y}_{1,0}^i = y_0$ при $x_{1,0} = x_0$. За допомогою розв'язку співвідношення (16), покращені наближення визначаються

$$Y_{j,l}^i = Y_{j,l}^0 - (\tilde{Y}_{j,l}^{i-1} - Y_{j,l}^{i-1}), \quad i = 1, 2, \dots \quad (17)$$

Доведення збіжності IQDeC методу подано в [20].

Приклад 1. Розглянемо неявну скалярну нелінійну тестову задачу

$$e^{y'(x)} + y'(x) + y(x) \quad (18a)$$

$$= e^{-\sin x} + \cos x - \sin x,$$

$$y(0) = 1, \quad (18b)$$

з точним розв'язком $y^*(x) = \cos x$. Чисельний розв'язок обчислюється на послідовності відрізків довжиною \mathbf{h} , кожний з них представлений нерівномірною сіткою з 4 'випадково' обраними вузлами ($c_1 = 0.1234$, $c_2 = 0.5054$, $c_3 = 0.7134$, $c_4 = 1$), для того, щоб продемонструвати стійкість IQDeC по відношенню до зміни розміру кроку.

Ми вибираємо інтервал інтегрування $x \in [0, 3]$. Результуючі глобальні помилки по відношенню до точного розв'язку в кінцевій точці $x = 3$ представлені в таблиці 1 разом з відповідними порядками збіжності.

Результати наведені для базисної схеми (BEUL), чотири IQDeC ітерації працюють в пасивному режимі, і фіксована точка для IQDeC ітерацій (COLL, відповідно до колокацій в точках оцінки дефекту).

\mathbf{h}	BEUL	IQDeC/1	IQDeC/2
0.1	6.31E-03	1.14E-04	1.02E-06
0.05	3.16 E-03	2.90E-05	1.31 E-07
0.025	1.58E-03	7.30E-05	1.66E-08
0.0125	7.91E-04	1.83E-06	2.09E-09
0.1	1.00	1.98	2.96
0.05	1.00	1.99	2.98
0.025	1.00	1.99	2.99
0.0125	1.00	1.99	2.99
\mathbf{h}	IQDeC/3	IQDeC/4	COLL
0.1	3.83E-09	3.95E-09	3.98E-09
0.05	2.69E-10	2.42E-10	2.43E-10
0.025	1.77E-11	1.49E-11	1.50E-11
0.0125	1.14E-12	9.29E-12	9.31E-12
0.1	3.83	4.03	4.04
0.05	3.92	4.01	4.02
0.025	3.96	4.00	4.01
0.0125	3.96	4.00	4.01

Табл. 1. Чисельні результати для прикладу 1

В IPDeC (A) для неявних звичайних диференціальних рівнянь другого порядку IPDeC2-DQ2

Тут ми представляємо новий суперзбіжний I*DeC алгоритм для неявної початкової задачі другого поряд-

ку. Розглянемо задачу типу

$$F\left(x, y(x), \frac{d}{dx} y(x), \frac{d^2}{dx^2} y(x)\right) = 0, \quad (19a)$$

$$y(x_0) = y_0, \quad \frac{d}{dx} y(x_0) = y'_0. \quad (19b)$$

IPDeC 2 алгоритм для розв'язку (19), є розширенням IPDeC підходу, згаданого в кінці розділу III. D. Він базується на поєднанні рівновіддаленої сітки $\{x_{j,l}, l = 0 \dots m\}$ з сталим внутрішнім кроком h на кожному інтервалі \mathbf{I}_j , з іншою сіткою $\{\hat{x}_{j,k}, k = 1 \dots \hat{m}\}$ ($\hat{m} = m - 1$) на основі вузлів Лобатто (з параметрами \hat{c}_k).

Рівномірна сітка $\{x_{j,l}\}$ використовується для реалізації базової дискретизації другого порядку (DQ2) на основі симетричних кінцевих різниць відповідно до

$$\left\{ \begin{array}{l} F\left(x_{1,0}, y_0, y'_0, \frac{Y_{1,1}^0 - y_0}{h} - y'_0\right) = 0; \\ \text{Для } j \geq 1, l > 1 : \\ F\left(x_{j,l}, Y_{j,l}^0, \frac{Y_{j,l+1}^0 - Y_{j,l-1}^0}{2h}, \frac{Y_{j,l+1}^0 - 2Y_{j,l}^0 + Y_{j,l-1}^0}{h^2}\right) = 0; \\ \text{Для } j > 1, l = 1 : \\ F\left(x_{j-1,m}, Y_{j-1,m}^0, \frac{Y_{j,1}^0 - Y_{j-1,m-1}^0}{2h}, \frac{Y_{j,1}^0 - 2Y_{j-1,m}^0 + Y_{j-1,m-1}^0}{h^2}\right) = 0. \end{array} \right.$$

Сітка розбиття Лобатто $\{\hat{x}_{j,l}\}$ використовується для обчислення дефекту інтерполяції. Це реалізується наступним чином:

- По-перше, після інтерполяції поточної ітерації і визначення дефектів у звичайному порядку, дефект оцінюється в $\hat{x}_{j,k}$,

$$\hat{d}_{j,k}^i := \frac{d}{dx} p^i(x_{j,k}) - f(x^i, p^i(x_{j,k})), \quad k = 1 \dots \hat{m}.$$

- Далі, після інтерполяції $\hat{d}_{j,k}^i$ кусково - поліноміальною функцією $\hat{d}(x)$ визначаємо модифікований дефект

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{d}_{1,0}^{A,i} := \hat{d}^i(x_{1,0}), \quad \hat{d}_{1,0}^{B,i} := \frac{d}{dx} p^i(x_{1,0}) - y'_0; \\ \text{Для } j \geq 1, l > 0 : \quad \hat{d}_{j,l}^i := \hat{d}^i(x_{j,l}); \\ \text{Для } j > 1, l = 0 : \\ \hat{d}_{j,0}^i = F\left(x_{j,l}, p_{j,0}^i, \frac{d}{dx} p^i(x_{j,0}) + \frac{d}{dx} p^i(x_{j-1,m}), \hat{\gamma}_{j,0}^i\right) \end{array} \right. \quad (20a)$$

з 'стрибком дефекту'

$$\hat{\gamma}_{j,0}^i := \frac{\frac{d^2}{dx^2} p^i(x_{j,0}) + \frac{d^2}{dx^2} p^i(x_{j-1,m})}{2} + \frac{\frac{d}{dx} p^i(x_{j,0}) - \frac{d}{dx} p^i(x_{j-1,m})}{h}. \quad (20b)$$

Тоді ми розв'яжемо відповідно дискретизовану сусідню задачу

$$\left\{ \begin{array}{l} F\left(x_{1,0}, y_0, y'_0 + \hat{d}_{1,0}^{B,i}, \frac{\tilde{Y}_{1,1}^{i-y_0} - (y'_0 + d_{1,0}^{B,i})}{\frac{h}{2}}\right) = d_{1,0}^{A,i}; \\ \text{Для } j \geq 1, l > 1: \\ F\left(x_{j,l}, \tilde{Y}_{j,l}^i, \frac{\tilde{Y}_{j,l+1}^i - \tilde{Y}_{j,l}^i}{2h}, \frac{\tilde{Y}_{j,l+1}^i - 2\tilde{Y}_{j,l}^i + \tilde{Y}_{j,l-1}^i}{h^2}\right) = \hat{d}_{j,l}^i; \\ \text{Для } j > 1, l = 1: \\ F\left(x_{j-1,m}, \tilde{Y}_{j-1,m}^i, \frac{\tilde{Y}_{j,1}^i - \tilde{Y}_{j-1,m-1}^i}{2h}, \frac{\tilde{Y}_{j,1}^i - 2\tilde{Y}_{j-1,m}^i + \tilde{Y}_{j-1,m-1}^i}{h^2}\right) = \hat{d}_{j,0}^i, \end{array} \right.$$

і, далі поводимось як і раніше (див. (17)).

Метою модифікації визначення дефекту (20) є, як і для класичного явного першого IPDeC з [3], модифікація ітерації таким чином, що її нерухома точка задається суперзбіжною колокаційною схемою вищого порядку, в нашому випадку типу Лобатто. Насправді, колокації Лобатто у вузлах $\hat{x}_{j,k}$ означають, що дефект колокаційного полінома прямує до нуля на цих вузлах, і отже, цей колокаційний поліном є фіксованою точкою нашої ітерації. Це дозволяє очікувати, що після декількох кроків корекції дефекту отримаємо суперзбіжну ітерацію; для чисельного доказу цього див. Приклад 2.

Зауваження. В співвідношенні (20a), також приймається до уваги дефект по відношенню до початкових умов для першої похідної. Більш того, розривність першої похідної $p^i(x)$ на кінцях інтервалів I_j ($p^i(x_j)$) заставляє включити стрибок дефекту $\hat{\gamma}_{j,0}^i$; див. (20), див. також [10].

Приклад 2. Розглянемо неявну нелінійну скалярну тестову задачу

$$e^{y''(x)} + y'(x) + y(x) \tag{21a}$$

$$= e^{-\sin x} + 1 + \sin x + \cos x,$$

$$y(0) = 1, \quad y'(0) = 1, \tag{21b}$$

з точним розв'язком $y^*(x) = 1 + \sin x$. Чисельний розв'язок обчислюється на послідовності відрізків довжиною h , кожний з яких розділений на 6 рівновіддалених вузлів і 5 Лобатто вузлів ($\hat{c}_1 = 0, \hat{c}_2 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{21}}{14}, \hat{c}_3 = \frac{1}{2}, \hat{c}_4 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{21}}{14}, \hat{c}_5 = 1$).

Ми вибираємо інтервал інтегрування $x \in [0, 3]$. Результуюча глобальна похибка по відношенню до точного розв'язку в кінцевій точці $x = 3$ відображається в таблиці 2 разом з відповідним порядком збіжності. Результати подано для базисної схеми (DQ 2), чотири IPDeC 2 ітерації працюють в пасивному режимі, і фіксована точка для IPDeC 2 ітерацій (L-COLL, відповідно колокаціям Лобатто ступеня $\hat{m} = 5$ в точках $\hat{x}_{j,k}$ де інтерполюється дефект). Відмітимо що, порядок збіжності колокаційної схеми Лобатто $\mathcal{O}(h^{2\hat{m}-2}) = \mathcal{O}(h^8)$, і такий же порядок збіжності буде після виконання лише 3 кроків IPDeC 2 ітерації.

h	DQ 2	IPDeC 2/1	IPDeC 2/2
0.1	2.30E-05	1.93E-09	9.62E-14
0.05	5.75E-06	1.21E-10	1.51E-15
0.025	1.44E-06	7.54E-12	2.36E-17
0.0125	3.59E-07	4.71E-13	3.69E-19
h			
0.1	2.00	4.00	5.99
0.05	2.00	4.00	6.00
0.025	2.00	4.00	6.00
0.0125			
h	IPDeC 2/3	IPDeC 2/4	L-COLL
0.1	6.07E-16	6.32E-16	6.32E-16
0.05	2.37E-18	2.47E-18	2.47E-18
0.025	9.24E-21	9.63E-21	9.63E-21
0.0125	3.61E-23	3.76E-23	3.76E-23
h			
0.1	8.00	8.00	8.00
0.05	8.00	8.00	8.00
0.025	8.00	8.00	8.00
0.0125			

Табл. 2. Чисельні результати для прикладу 2.

Література

- [1] Auzinger W., In 'Encyclopedia of Computational and Applied Mathematics', Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2014).
- [2] Auzinger W., Journal of Numerical Analysis, Industrial and Applied Mathematics (JNAIAM) **6/1-2**, 15 (2011).
- [3] Auzinger W., Hofstätter H., Kreuzer W., Weinmüller E., Numer. Algorithms, **36**, 135 (2004).
- [4] Auzinger W., Hofstätter H., Kreuzer W., Weinmüller E., Numer. Algorithms, **40**, 285 (2005).
- [5] Auzinger W., Koch O., Saboor Bagherzadeh A., BIT Numer. Math., published online 15 April 2014.
- [6] Auzinger W., Koch O., Weinmüller E., Numer. Algorithms, **85**, 5 (2002).
- [7] Böhmer W., Stetter H.J., Eds., Computing Suppl. 5, Springer-Verlag, Wien, New York (1984).
- [8] Butcher J.C., Cash J.R., Moore G., Russell R.D., Math. Comp., **64**, 629 (1995).
- [9] Dutt A., Greengard L., Rokhlin V., BIT, **40**, 241 (2000).

