

© Золотарева Н.Д., 2022

DOI 10.20310/2686-9667-2022-27-139-261-269

УДК 519.622



## О новом способе получения гарантированной оценки погрешности метода Нумерова с помощью эллипсоидов

Наталья Дмитриевна ЗОЛОТАРЕВА

ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова»

119991, Российская Федерация, г. Москва, Ленинские горы, 1

**Аннотация.** В настоящей работе рассматривается численное решение задачи Коши для дифференциального уравнения второго порядка, вычисляемое с помощью метода Нумерова. Предложен новый способ получения гарантированной оценки погрешности с помощью эллипсоидов. Численное решение заключается в эллипсоид, содержащий и точное, и численное решение задачи, который пересчитывается на каждом шаге. В отличие от ранее предложенного метода пересчета эллипсоидов, предлагается более точная оценка малых слагаемых в разностном уравнении для погрешности. Это приводит к более точной оценке погрешности численного решения и применимости предложенного метода оценки погрешности на интервалах большей длины. Приведены результаты оценки погрешности метода Нумерова при решении задачи двух тел на большом интервале. Этот численный эксперимент демонстрирует эффективность предложенного метода.

**Ключевые слова:** метод эллипсоидов, оценка погрешности, метод Нумерова, численное решение задачи Коши для ОДУ второго порядка

**Для цитирования:** Золотарева Н.Д. О новом способе получения гарантированной оценки погрешности метода Нумерова с помощью эллипсоидов // Вестник российских университетов. Математика. 2022. Т. 27. № 139. С. 261–269. DOI 10.20310/2686-9667-2022-27-139-261-269.

## On a new method for obtaining a guaranteed error estimate for Numerov's method using ellipsoids

Natalia D. ZOLOTAREVA

Lomonosov Moscow State University

1 Leninskie gory St., Moscow 119991, Russian Federation

**Abstract.** In this article, we consider a numerical solution of the Cauchy problem for a second-order differential equation calculated by the means of the Numerov method. A new method for obtaining a guaranteed error estimate using ellipsoids is proposed. The numerical solution is enclosed in an ellipsoid containing both the exact and the numerical solutions of the problem, which is recalculated at each step. In contrast to the previously proposed method for recalculating ellipsoids, a more accurate estimate of small terms in the difference equation for the error is proposed. This leads to a more accurate estimate of the error of the numerical solution and the applicability of the proposed method to estimating the error on longer intervals. The results of estimating the error of Numerov's method in solving the two-body problem over a large interval are presented. This numerical experiment demonstrates the effectiveness of the proposed method.

**Keywords:** ellipsoid method, error estimation, Numerov's method, numerical solution of the Cauchy problem for second-order ODEs

**Mathematics Subject Classification:** 65L70, 65L05.

**For citation:** Zolotareva N.D. O novom sposobe polucheniya garantirovannoy otsenki pogreshnosti metoda Numerova s pomoshch'yu ellipsoidov [On a new method for obtaining a guaranteed error estimate for Numerov's method using ellipsoids]. *Vestnik rossiyskikh universitetov. Matematika – Russian Universities Reports. Mathematics*, 2022, vol. 27, no. 139, pp. 261–269. DOI 10.20310/2686-9667-2022-27-139-261-269. (In Russian, Abstr. in Engl.)

## Введение

Если решение дифференциального уравнения второго порядка колеблется, то при поординатном оценивании погрешности численного решения возникает эффект раскрутки (эффект Мура [1, с. 155]), когда оценка погрешности растет экспоненциально с ростом длины отрезка, в то время как сама погрешность растет значительно медленнее.

В работе [2] для получения гарантированной оценки погрешности метода Штермера было предложено заключать численное решение в движущийся эллипсоид, содержащий и точное, и численное решение задачи. Предложенный способ оценки погрешности использовал дискретное преобразование эллипсоидов и позволял избежать эффекта раскрутки. Этот способ был применим и к явному, и к неявному методу Штермера.

В статьях [3] и [4] предлагалось использовать непрерывное преобразование эллипсоидов, что приводило к более точной оценке погрешности. Минусом использования непрерывного преобразования эллипсоидов является громоздкость формул для пересчета эллипсоидов на каждом шаге.

В работе [5] был предложен способ получения гарантированной оценки погрешности явного метода Штермера, основанный на дискретном преобразовании эллипсоидов, который приводит к точности оценки того же порядка, что и способы, основанные на непрерывном преобразовании эллипсоидов. Повышение точности оценки погрешности при дискретном преобразовании эллипсоидов было достигнуто за счет более точного оценивания малых слагаемых в разностном уравнении для погрешности.

В данной работе предлагается обобщить результат работы [5], полученный для явного метода Штермера, на неявный численный метод решения дифференциальных уравнений второго порядка, а именно, на метод Нумерова.

## 1. Постановка задачи

Рассмотрим задачу Коши для дифференциального уравнения второго порядка:

$$y'' = f(x, y), \quad y(0) = y_0, \quad y'(0) = y'_0, \quad 0 \leq x \leq X_0, \quad y, f \in \mathbb{R}^n.$$

Численное решение  $y_m$ , являющееся приближенным к точному решению  $y(x_m)$  в точке  $x_m = hm$ , где  $h$  — постоянный шаг, будем вычислять по неявной 2-шаговой формуле метода Нумерова (см., например, в [6, с. 399])

$$\nabla^2 y_m = h^2 f(x_{m-1}, y_{m-1}) + \frac{h^2}{12} \nabla^2 f(x_m, y_m) + w_m, \quad m \geq 2, \quad (1.1)$$

где  $\nabla$  — конечная разность назад ( $\nabla a_i = a_i - a_{i-1}$ );  $\nabla^2$  — конечная разность второго порядка ( $\nabla^2 a_i = \nabla(\nabla a_i) = a_i - 2a_{i-1} + a_{i-2}$ );  $w_m$  — ошибка, получаемая из-за округлений и обрыва итераций.

Целью работы является получение гарантированной оценки погрешности численного решения  $z_m = y(x_m) - y_m$ , которая удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \nabla^2 z_m &= h^2 (f(x_{m-1}, y(x_{m-1})) - f(x_{m-1}, y_{m-1})) \\ &+ \frac{h^2}{12} \nabla^2 (f(x_m, y(x_m)) - f(x_m, y_m)) + N_m - w_m, \end{aligned} \quad (1.2)$$

где  $N_m$  — ошибка метода Нумерова на  $m$ -м шаге:

$$N_m^p = -\frac{1}{240} h^6 (y^{(6)}(\xi)), \quad x_{m-2} \leq \xi \leq x_m,$$

$\xi$  зависит от номера координаты  $p$ .

## 2. Оценивание погрешности с помощью эллипсоидов

В работе [2] был предложен способ оценивания погрешности  $z_m$ , позволяющий избежать эффекта раскрутки. Численное решение заключалось в движущийся эллипсоид, содержащий и точное, и численное решение. Для пересчета эллипсоида на каждом шаге использовались формулы дискретного преобразования эллипсоидов, полученные с помощью разностного уравнения для погрешности. В данной работе предлагается улучшенная (по сравнению с полученной в [2]) оценка погрешности, полученная благодаря более точному оцениванию малых слагаемых в разностном уравнении для  $z_m$ .

Произведя линеаризацию, уравнение (1.2) можно записать в виде разностного уравнения

$$\nabla^2 z_m = h^2 A_{m-1} z_{m-1} + \frac{h^2}{12} \nabla^2 (A_m z_m) + N_m - w_m + R_m, \quad (2.1)$$

$$\text{где } A_l = \begin{pmatrix} \frac{\partial f^1}{\partial y^1} & \cdots & \frac{\partial f^1}{\partial y^n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f^n}{\partial y^1} & \cdots & \frac{\partial f^n}{\partial y^n} \end{pmatrix} \Big|_{(x_l, y_l)}, \quad R_m^p = \frac{h^2}{2} \sum_{i=0}^2 \alpha_i \left( \sum_{q,j=1}^n \frac{\partial^2 f^p}{\partial y^q \partial y^j} (x_{m-i}, \tilde{y}_{m-i}) z_{m-i}^q z_{m-i}^j \right).$$

Здесь верхний индекс обозначает номер координаты вектора,  $\tilde{y}_l$  зависит от  $p$  и лежит в окрестности, содержащей и точное, и численное решения. Константы  $\alpha_i$  — это коэффициенты перед  $h^2 f(x_{m-i}, y_{m-i})$ , которые возникнут в (1.1), если расписать все разности. В случае метода Нумерова это

$$\alpha_0 = \frac{1}{12}, \quad \alpha_1 = \frac{10}{12}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{12}.$$

В дальнейшем будет использоваться оценка

$$\|R_m\| \leq R_m^B = \frac{1}{2} h^2 M_2 \max_{0 \leq l \leq m} \|z_l\|^2,$$

где  $M_2 \geq \max_{p=1, \dots, n} \sum_{q,j=1}^n \left| \frac{\partial^2 f^p}{\partial y^q \partial y^j} \right|$ , максимум берется в окрестности, содержащей и точное, и численное решения при  $x \in [0, mh]$ , за норму вектора принимается максимум модулей координат. Пусть при всех рассматриваемых значениях  $m$  справедливы оценки  $\|N_m\| \leq N$  и  $\|w_m\| \leq w$ .

Так же, как и в [2] введем вспомогательную переменную  $v_m$  и представим (2.1) в виде системы

$$\begin{cases} v_m = v_{m-1} + h A_{m-1} z_{m-1} + h^{-1} Q_m, & (m \geq 2) \\ z_m = z_{m-1} + h v_m + \frac{h^2}{12} \nabla (A_m z_m), & (m \geq 1), \end{cases} \quad (2.2)$$

где  $Q_m = N_m - w_m + R_m$ . Начальные значения:

$$v_0 = 0, \quad v_1 = \frac{z_1 - z_0}{h} - \frac{h}{12} \nabla (A_1 z_1).$$

Подставим  $v_m$  из первого уравнения системы (2.2) во второе и перейдем к матрично-векторной записи:

$$\begin{pmatrix} v_m \\ z_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & h A_{m-1} \\ h I & I + h^2 A_{m-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{m-1} \\ z_{m-1} \end{pmatrix} + \frac{h^2}{12} \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla (A_m z_m) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} h^{-1} Q_m \\ Q_m \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

где  $I$  — единичная матрица.



2. С помощью (2.5) вычисляется предварительная оценка погрешности  $(v_m^b, z_m^b)^T$  и строится предварительный эллипсоид, содержащий вектор  $\vec{Z}_m = (v_m, z_m)^T$  погрешности.
3. Каждое из трех слагаемых (2.4) заключается в свой эллипсоид и вычисляется эллипсоид, содержащий сумму этих трех эллипсоидов. Таким образом, на каждом шаге по предварительной оценке  $z_m^b$  из (2.5) находится эллипсоид  $E(0, \mathbf{Z}_m)$ , который содержит вектор  $\vec{Z}_m = (v_m, z_m)^T$  из (2.4), и с помощью этого эллипсоида вычисляется улучшенная оценка погрешности

$$z_m^* = \sqrt{\max_{i=n+1, \dots, 2n} \mathbf{Z}_m^{i,i}}.$$

Здесь эллипсоид  $E(0, \mathbf{Z}_m) = \mathbf{Z}_m^{\frac{1}{2}} S_1$ , где  $S_1 = E(0, I)$  – единичный шар,  $\mathbf{Z}_m$  – симметрическая положительно-определенная матрица  $(2n \times 2n)$ .

Затем  $m$  увеличивается на 1 и происходит переход к пункту 2.

В статье [5] для явного метода Штермера предлагалось увеличить точность оценки погрешности, используя не оценки величин  $A_{m-i}z_{m-i}$ , а оценки их первых разностей. В этой статье проведем подобное улучшение для метода Нумерова.

Предлагается последовательно находить оценки векторов погрешностей не из представления

$$\vec{Z}_m = C_0 \vec{Z}_m + C_1 \vec{Z}_{m-1} + \vec{Q}_m, \quad m \geq 2,$$

а из представления

$$\vec{Z}_m = D_0 \vec{Z}_m + \frac{h^2}{12} \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla(A_m z_m) \end{pmatrix} + \vec{Q}_m, \quad m \geq 2, \quad \text{где } D_0 = \begin{pmatrix} I & hA_{m-1} \\ hI & I + h^2 A_{m-1} \end{pmatrix}.$$

Для того, чтобы каждое из трех слагаемых заключить в эллипсоид, нам надо получить оценку разности  $\nabla(A_m z_m)$ . Найдем оценку первых разностей  $P_l^1$  такую, что  $\max_{0 \leq i \leq l} \|\nabla(A_i z_i)\| \leq P_l^1$  через оценки

$$L \geq \|A_i\|, \quad L' \geq \|\nabla A_i\|/h, \quad z_l^B \geq \max_{0 \leq i \leq l} \|z_i\|, \quad v_l^B \geq \max_{0 \leq i \leq l} \|v_i\|.$$

Отметим, что в качестве  $L$  и  $L'$  можно взять оценки функций  $A(x) = \frac{\partial f}{\partial y}(x, y^*(x))$  и  $A'(x)$ , где  $y^*(x)$  лежит в окрестности, содержащей и точное, и численное решения.

Из второй строчки (2.2) следует, что

$$\nabla z_m = h v_m + \frac{h^2}{12} \nabla(A_m z_m). \quad (2.6)$$

Из неравенства  $\|\nabla(A_i z_i)\| \leq \|\nabla A_i\| z_l^B + L \|\nabla z_i\|$ , используя оценку, полученную из (2.6), имеем

$$\|\nabla(A_i z_i)\| \leq h L' z_l^B + L(h v_l^B + \frac{h^2}{12} P_l).$$

Откуда следует, что

$$P_l^1 \leq \frac{h}{1 - \frac{h^2}{12} L} (L' z_l^B + L v_l^B),$$

причем знаменатель дроби должен быть положительным.

Пусть  $\|z_i\| \leq \delta$  при  $i = 0; 1$ . Предлагается, начиная со значений  $\mathbf{Z}_0 = n \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \delta^2 I \end{pmatrix}$  и  $\mathbf{Z}_1 = 2n \begin{pmatrix} (v_1^B)^2 I & 0 \\ 0 & \delta^2 I \end{pmatrix}$ , где  $\|v_1\| \leq v_1^B = \frac{2\delta}{h} + \frac{h}{6}\delta L$ , на каждом шаге пересчитывать эллипсоид  $E(0, \mathbf{Z}_m)$ , содержащий вектор погрешностей  $(v_m, z_m)^T$ .

При сложении эллипсоидов надо использовать вложение

$$E(0, B_1) + E(0, B_2) \subset E(0, (1 + p)B_1 + (1 + 1/p)B_2),$$

где значение параметра  $p$  можно выбрать таким образом, чтобы сумма квадратов полуосей была минимальна [8]:  $p = \sqrt{\text{Tr}B_2/\text{Tr}B_1}$ . Если же брать эллипсоид с минимальным объемом, то в качестве  $p$  надо использовать  $p = \sqrt{n^{-1}\text{Tr}(B_1^{-1}B_2)}$ . При умножении матрицы  $D$  на эллипсоид  $E(0, B)$  надо использовать (см., например, в [7, с. 74]) равенство

$$D \cdot E(0, B) = E(0, DBD^T).$$

В качестве эллипсоидов, содержащих второе и третье слагаемые (2.3), удобно взять соответственно эллипсоиды

$$E\left(0, \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & (\frac{h^2}{12}P_m^1)^2 I \end{pmatrix}\right) \quad \text{и} \quad E\left(0, \begin{pmatrix} \frac{(Q_m^B)^2}{h^2} I & \frac{(Q_m^B)^2}{h} I \\ \frac{(Q_m^B)^2}{h} I & (Q_m^B)^2 I \end{pmatrix}\right).$$

Здесь используется то, что

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \in E\left(0, \begin{pmatrix} (a, a)I & (a, b)I \\ (a, b)I & (b, b)I \end{pmatrix}\right) \quad \text{при} \quad a \parallel b.$$

Оценка неоднородности  $Q_m^B = N + w + R_m^B \geq \|Q_m\|$  пересчитывается на каждом шаге.

### 3. Численный эксперимент

Продемонстрируем работу предложенного метода оценки погрешности на конкретном примере. Вычисления будем проводить с точностью до 56-го двоичного знака, то есть с  $\delta = \frac{1}{2}2^{-56}$ .

Рассмотрим задачу двух тел

$$\begin{cases} x'' = -\frac{Kx}{\sqrt{x^2 + y^2}^3} \\ y'' = -\frac{Ky}{\sqrt{x^2 + y^2}^3} \end{cases}$$

с начальными значениями

$$\begin{cases} x(0) = 2/3, & x'(0) = 0 \\ y(0) = 0, & y'(0) = \sqrt{2K}. \end{cases}$$

Положим  $K = \pi^2/9$ . В этом случае одно тело движется вокруг другого по эллипсу с периодом  $T = 6$ .

Численное решение будем считать методом Нумерова с шагом  $h = 1/512$ . Применение метода более высокого порядка не приведет к значительному улучшению точности оценки погрешности из-за влияния ошибки округлений  $w$ .

В качестве оценок шестых производных возьмем оценки, полученные для этой задачи в [2]:

$$|x^{(6)}| < 2509, \quad |y^{(6)}| < 1912;$$

откуда  $N^1 = 5,9 \cdot 10^{-16}$ ,  $N^2 = 4,5 \cdot 10^{-16}$ .

Матрица из частных производных будет иметь вид

$$A(x, y) = \frac{K}{r^5} \begin{pmatrix} 2x^2 - y^2 & 3xy \\ 3xy & 2y^2 - x^2 \end{pmatrix},$$

где  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Ошибка округления  $w_m$  по абсолютной величине не будет превосходить  $w = 8\delta$ .

В статье [2] были приведены результаты подсчета оценки погрешности численного решения, полученного методом Нумерова, в моменты времени  $t = 51$  и  $t = 99$ :

$$|z(51)| < 5,7 \cdot 10^{-6}, \quad |z(99)| < 4,1 \cdot 10^{-5}.$$

При дальнейшем увеличении времени происходит сильное увеличение роста оценки погрешности, что делает ее неприемлемой. Если же при пересчете эллипсоидов использовать более точную оценку малых слагаемых, предложенную в данной статье, то будут получены следующие оценки погрешности численного решения:

$$|z(51)| < 1,4 \cdot 10^{-6}, \quad |z(99)| < 2,6 \cdot 10^{-6}, \quad |z(150)| < 1,6 \cdot 10^{-5}, \quad |z(198)| < 3,8 \cdot 10^{-5}.$$

Результаты численных экспериментов демонстрируют более точную оценку погрешности численного решения, полученного методом Нумерова, по сравнению с ранее предложенными методами, а также применимость предложенного способа оценивания погрешности на интервалах большой длины.

## References

- [1] R. E. Moore, R. B. Kearfott, M. J. Cloud, *Introduction to Interval Analysis*, 1st ed., SIAM, Philadelphia, 2009, 184 с.
- [2] Н. Д. Золотарева, “Метод эллипсоидов для оценки глобальной ошибки метода Штермера”, *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн.*, 2002, № 1, 18–23; англ. пер.: N. D. Zolotareva, “Ellipsoid method for estimating the global error of the Stormer method”, *Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics*, 2002, № 1, 20–26.
- [3] А. Ф. Филиппов, Н. Д. Золотарёва, “Оценка локальной и глобальной ошибок метода Штермера для системы уравнений”, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, **44**:1 (2004), 111–122; англ. пер.: A. F. Philippov, N. D. Zolotareva, “Estimates of local and global errors of the Stormer method for systems of equations”, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **44**:1 (2004), 100–111.
- [4] Н. Д. Золотарева, “Оценка локальной и глобальной ошибок неявного метода Штермера для системы уравнений”, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, **45**:2 (2005), 267–271; англ. пер.: N. D. Zolotareva, “Estimates of local and global errors of the implicit Stormer method for systems of equations”, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **45**:2 (2005), 256–260.
- [5] Н. Д. Золотарева, “О новом способе получения гарантированной оценки ошибки метода Штермера с помощью эллипсоидов”, *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн.*, 2002, № 3, 3–9. [N. D. Zolotareva, “New approach to Shtermer’s method guaranteed error assessment using ellipsoids”, *Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics*, 2002, № 3, 3–9 (In Russian)].



- [6] Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков, *Численные методы*, Наука, М., 1987. [N. S. Bakhvalov, N. P. Zhidkov, G. M. Kobelkov, *Numerical Methods*, Nauka Publ., Moscow, 1987 (In Russian)].
- [7] Ф. Л. Черноусько, *Оценивание фазового состояния динамических систем*, Наука, М., 1988. [F. L. Chernousko, *Estimation of the Phase State of Dynamical Systems*, Nauka Publ., Moscow, 1988 (In Russian)].
- [8] Ю. Н. Решетняк, “Суммирование эллипсоидов в задаче гарантированного оценивания”, *Прикл. матем. и механ.*, **53**:2 (1989), 249–254. [Yu. N. Reshetnyak, “Summation of ellipsoids in the guaranteed estimation problem”, *Applied. Math. and Mechan.*, **53**:2 (1989), 249–254 (In Russian)].

### Информация об авторе

**Золотарева Наталья Дмитриевна**, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник факультета Вычислительной математики и кибернетики. Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация. E-mail: zolotareva-vmk@yandex.ru

**ORCID:** <https://orcid.org/0000-0003-1490-2091>

Поступила в редакцию 21.06.2022 г.

Поступила после рецензирования 05.09.2022 г.

Принята к публикации 13.09.2022 г.

### Information about the author

**Natalia D. Zolotareva**, Candidate of Physics and Mathematics, Researcher, Computational Mathematics and Cybernetics Faculty. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation. E-mail: zolotareva-vmk@yandex.ru

**ORCID:** <https://orcid.org/0000-0003-1490-2091>

Received 21.06.2022

Reviewed 05.09.2022

Accepted for press 13.09.2022