Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений

Теоретические основы численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений

При математическом моделировании поведения динамических систем необходимостью часто приходится иметь дело с решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Для задач, представляющих практический интерес, редко удается получить решение ОДУ в аналитическом виде, поэтому приходится пользоваться численными методами.

Постановка задачи численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Математические модели, полученные в виде систем ОДУ, могут быть представлены либо в нормальной форме Коши, либо в неявной форме.

Нормальная форма Коши

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \quad , \tag{2.1}$$

где $x = \left(x^{(1)},...x^{(n)}\right)$ - вектор переменных состояния системы, $f(x,t) = \left(f^{(1)}(x),...f^{(n)}(x)\right)$ - заданная вектор-функция правых частей, t - независимая переменная (чаще всего время).

Неявная форма

$$\Phi(x, \frac{dx}{dt}, t) = 0 \quad , \tag{2.2}$$

где
$$\Phi(x, \frac{dx}{dt}, t) = \left(\Phi^{(1)}(x, \frac{dx}{dt}, t), \dots \Phi^{(n)}(x, \frac{dx}{dt}, t)\right)$$
 - заданная вектор-функция.

Систему (2.1) можно получить из системы (2.2), если последнюю удается разрешить относительно производных $\frac{dx^{(1)}}{dt},...\frac{dx^{(n)}}{dt}$. Представление систем ОДУ в виде (2.1) удобно при решении задач на компьютере и наиболее часто

встречается. Поэтому здесь будем рассматривать численное интегрирование систем ОДУ, приведенной к нормальной форме (2.1).

Рассмотрим решение начальной задачи Коши для системы (2.1), которая формулируется следующим образом. Необходимо найти решение системы ОДУ (2.1) x(t) на отрезке $\begin{bmatrix} t_o, T \end{bmatrix}$ при заданных начальных условиях $x(t_o) = x_o$, где $x_o = \begin{pmatrix} x_o^{(1)}, ... x_o^{(n)} \end{pmatrix}$ - вектор начальных условий. Далее будем предполагать, что точное решение задачи Коши для уравнения (2.1) существует и единственно.

Первый шаг на пути численного решения системы (2.1) при заданных начальных условиях состоит в разбиении отрезка $\left[t_{o},T\right]$ на конечное число частей введением узловых точек

$$t_o < t_1 < \dots < t_m < \dots < t_N = T$$
.

Хотя неравномерное разбиение отрезка не ведет к каким-либо трудностям, для простоты положим, что узловые точки делят отрезок на равные части $h=(T-t_o)/N$, где N - число отрезков, h - шаг интегрирования. Очевидно, что в этом случае $t_m=t_o+mh$ (m=0,1,...N).

Большинство численных методов решения задачи Коши для системы (2.1) сводится к последовательному нахождению значений $x(t_0), x(t_1), ... x(t_m), ... x(t_N)$, то есть к определению $x(t_{m+1})$ по формуле

$$x_{m+1} = x_m + hF(h, x_{m+1}, x_m, x_{m-1}, ... x_{m-M}, \dot{x}_{m+1}, \dot{x}_m, \dot{x}_{m-1}, ... \dot{x}_{m-M}), (2.3)$$

где
$$x_{m+1} = x(t_{m+1}), x_m = x(t_m), \dots$$

$$\dot{x}_{m+1} = f(x_{m+1}, t_{m+1}), \ \dot{x}_m = f(x_m, t_m), \dots$$

F - некоторая функция, определяемая применяемым методом, M - количество предыдущих точек, следующих за точкой t_m , используемых в численном методе.

Если для получения x_{m+1} используются только значения x_m , \dot{x}_m , то есть M=0 , то метод называется явным одношаговым методом. Если M>0 , то метод называется многошаговым. Если правая часть соотношения (2.3) зависит от определяемых значений x_{m+1} , \dot{x}_{m+1} , то метод называется неявным методом. Сейчас наиболее популярными при расчетах на ЭВМ являются явные одношаговые методы. Это связано в основном с простотой гибкостью, алгоритма, ОНИ позволяют легко изменять ИХ шаг интегрирования, не требуют предварительного "разгона" (формулу (2.3) можно применять сразу на первом шаге) как многошаговые методы. Иногда применяют неявные методы интегрирования, однако они требуют на каждом шаге численного интегрирования решения в общем случае нелинейное уравнение (2.3) относительно определяемого значения x_{m+1} . Однако неявные методы интегрирования имеют одно важное преимущество: они абсолютно устойчивые методы. Это понятие будет дано позже, когда будем рассматривать устойчивость численных методов решения ОДУ. В практическом отношении это приводит к тому, что шаг интегрирования h не ограничен свойствами устойчивости, а зависит только от требуемой погрешности вычислений.

Перед тем как решать любую систему ОДУ необходимо убедиться в выполнении условий теоремы о единственности и существования решений системы ОДУ. Не приводя эту теорему целиком, опишем здесь только ее условия.

Условия теоремы.

В области $x \in D_x$, где определяется решения системы ОДУ должны быть выполнены:

- 1. Правые части системы (2.1) должны быть ограничены $\left|f^{(k)}(x)\right| < M_k < \infty, \ k=1,2,...n \, .$
- 2. Условия Липшица

$$\left| f^{(k)}(x^{(1)},...x^{(j)},...x^{(n)}) - f^{(k)}(x^{(1)},...\overline{x}^{(j)},...x^{(n)}) \right| < L_{kj} \left| x^{(j)} - \overline{x}^{(j)} \right|$$
 для $\forall k,j$, где $L_{kj} < \infty$.

Второе условие можно иногда рассматривается в более узком смысле, то есть в каждой точке области $x \in D_x$. При $x^{(j)} \to \overline{x}^{(j)}$ получаем ограничение на частные производные $\left| \frac{\partial f^{(k)}}{\partial x^{(j)}} \right| < L_{kj} < \infty$.

Простой пример. Имеем ОДУ вида $\frac{dx}{dt} = \sqrt{x} = f(x)$. Тогда $\frac{df}{dx} = \frac{1}{2\sqrt{x}}$ и производная в точке x = 0 не ограничена.

С точки зрения вычислительной математики условия единственности могут также нарушаться в особых точках систем ОДУ или в окрестности особых множеств.

Пример для случая n = 2: особая точка "седло (рис. 2.1).

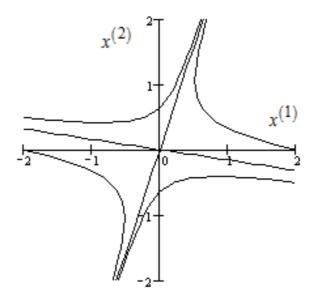


Рисунок 2.1 - Особая точка "седло

В окрестности предельных прямых (асимптот) единственность численного решения может не выполняться, так как любая малая погрешность, например, вычислительная может привести к получению совсем другого частного решения.

Численное интегрирование систем ОДУ с помощью рядов Тейлора

Рассмотрим метод решения системы ОДУ, представляющий ценность, поскольку он помогает во многих случаях оценить порядок точности для практически значимых методов интегрирования дифференциальных уравнений.

Пусть ранее было уже сделано m шагов интегрирования. В точке t_m найдено решение x_m Функцию x(t) в окрестностях точки x_m разложим в ряд Тейлора:

$$x(t) = x_m + x'_m(t - t_m) + \frac{1}{2}x''_m(t - t_m)^2 + \frac{1}{6}x'''_m(t - t_m)^3 + \dots,$$
 (2.4)

где $t_m = t_0 + mh$; h - шаг интегрирования. Тогда

$$x_{m+1} = x(t_0 + (m+1)h) = x_m + x'_m h + \frac{1}{2}x''_m h^2 + \frac{1}{6}x'''_m h^3 + \dots$$
 (2.5)

Из ОДУ имеем $x'_{m} = f(x_{m}, t_{m})$, откуда

$$x"_{m} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} f.$$
 (2.6)

Учитывая (6.7), для выражения (6.5) имеем:

$$x_{m+1} = x_m + h f(x_m, t_m) + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} f \right)_m + O(h^3), \quad (2.7)$$

если $|x'''_m| < M_3 < \infty$.

Здесь $O(h^3)$ остаточный член, означающий, что в следующие члены ряда h входит в степени не ниже третьей. Иначе говоря, если для нахождения приближённого решения уравнения будет использована формула (2.7) без $O(h^3)$, то ошибка интегрирования на одном шаге будет приблизительно равна C_3h^3 , где $C_3<\infty$ некоторая постоянная.

Для практического использования этот метод малопригоден, поскольку очень трудно (иногда невозможно) найти частные производные первого f_t' , f_x' и более высокого порядка. С другой стороны именно в этом методе

удаётся явно оценить порядок точности метода. Формулы методов рядов Тейлора являются одношаговыми и явными.

Метод Эйлера

Метод Эйлера можно рассматривать как частный случай метода интегрирования с помощью рядов Тейлора, если ограничиться только вычислением первой производной.

Идея метода заключается в следующем. Зная начальное приближение $x_0 = x(t_0)$, т.е. точку (x_0,t_0) , лежащую на искомой интегральной кривой, а также функцию f(x,t) дифференциального уравнения, мы можем на первом шаге определить угол наклона касательной $x'_0 = f(x_0,t_0)$.

Для небольшой величины шага h можно допустить, что следующая точка решения уравнения x_1 лежит на касательной прямой:

$$x_1 = x_0 + x'_0 \quad h = x_0 + hf(x_0, t_0).$$
 (2.8)

На следующем шаге интегрирования вычисляется новое значение функции x_2 в точке $t_2 = t_1 + h$, лежащей на касательной проведённой под углом $x'_1 = f\left(x_1, t_1\right)$ и т.д. В итоге, интегральная кривая x(t) заменяется ломаной (см. рис. 2.2). Таким образом, метод Эйлера имеет вид:

$$x_{m+1} = x_m + hf(x_m, t_m), (2.9)$$

где $h = t_{m+1} - t_m$ - постоянный шаг интегрирования, а значение начальной точки берётся из начальных условий системы ОДУ.

Если сравнить формулу (2.9) и формулу интегрирования с использованием рядов Тейлора, то видно, что в формуле (2.7) согласуются только два первых члена ряда, а остаточный член пропорционален h^2 . В методах численного интегрирования принято, что если погрешность на одном шаге (локальная погрешность) есть величина $O(h^2)$, то метод имеет

первый порядок точности p = 1.

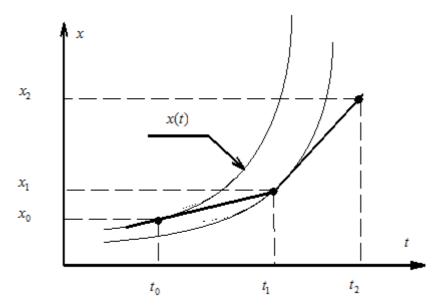


Рисунок 2.2 - Графическое представление явного метода Эйлера Иногда используется неявный метод Эйлера, формула для которого имеет вид

$$x_{m+1} = x_m + hf(x_{m+1}, t_{m+1}), (2.10)$$

то есть первая производная определяется в точке (x_{m+1}, t_{m+1}) .

Задание. Нарисовать графическое представление неявного метода Эйлера. Если потом сравнить рисунки, соответствующие явному и неявному методу Эйлера, то нетрудно увидеть, что эти метода всегда дают погрешность интегрирования на одном шаге разного знака.

Методы Рунге-Кутты

Основная идея метода Рунге-Кутты была предложена немецким математиком К.Рунге, а затем развита В.Куттой. Если метод Эйлера (2.9) использует одно вычисление производной $f(x_m,t_m)$ на каждом шаге численного интегрирования, то в методах Рунге-Кутты таких вычислений несколько, что позволяет повысить точность интегрирования системы (2.1). Общая формула методов Рунге-Кутты имеет вид

$$x_{m+1} = x_m + hF(h, x_m, t_m) ,$$

$$F(h, x_m, t_m) = \sum_{i=1}^{S} c_i K_i^{(m)} , K_1^{(m)} = f(x_m, t_m) ,$$
(2.11)

$$K_i^{(m)} = f(x_m + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j^{(m)}, t_m + hb_i)$$
, $i = 2,...S$.

где S - количество этапов метода. Формулы методов Рунге-Кутты являются одношаговыми, поэтому удобны при программировании и позволяют легко менять шаг интегрирования в процессе интегрирования.

Возможно, наиболее известной является в настоящее время формула 4-х этапного классического метода Рунге-Кутты

$$x_{m+1} = x_m + \frac{h}{6} (K_1^{(m)} + 2K_2^{(m)} + 2K_3^{(m)} + K_4^{(m)})$$

$$K_1^{(m)} = f(x_m, t_m) , K_2^{(m)} = f(x_m + \frac{h}{2} K_1^{(m)}, t_m + \frac{h}{2}) ,$$
(2.6)

$$K_3^{(m)} = f(x_m + \frac{h}{2}K_2^{(m)}, t_m + \frac{h}{2}), K_4^{(m)} = f(x_m + hK_3^{(m)}, t_m + h)$$

Явные методы Рунге-Кутты иногда удобно представить в виде таблицы

В этом случае 4-х этапный метод Рунге-Кутты имеет вид

В общем случае матрица коэффициентов a_{ij} может быть полностью заполненная, что будет соответствовать неявным методам интегрирования.

Порядок точности методов Рунге-Кутты не всегда совпадает с количеством этапов, что можно видеть в таблице

p	1	2	3	4	5	6	7	•••	8	10
S	1	2	3	4	6	7	9		10	17

Вывод формулы 2-х этапного метода Рунге-Кутты

Вывод формул методов Рунге-Кутты основан на использовании рядов Тейлора. представим 2-х этапный метод в виде

$$x_{m+1} = x_m + hF(x_m, t_m, h) . (2.7)$$

Здесь $F(x_m,t_m,h)=c_1f\left(x_m,t_m\right)+c_2f\left(x_m+ha_{21}f\left(x_m,t_m\right),t_m+b_2h\right)$, где c_1,c_2,a_{21},b_2 - коэффициенты метода, которые надо определить.

Разложим функцию $F(x_m,t_m,h)$ в ряд Тейлора по параметру h в точке $h{=}0$

$$F(x_m, t_m, h) = F(x_m, t_m, 0) + F'(x_m, t_m, 0)h + O(h^2) . \quad (2.8)$$

Определим функции

$$F(x_m, t_m, 0) = (c_1 + c_2) f(x_m, t_m),$$

$$F'(x_m, t_m, 0) = C_2 \left(\frac{\partial f}{\partial x} a_{21} f + \frac{\partial f}{\partial t} b_2 \right)_m$$

Тогда

$$hF(x_m, t_m, h) = h(c_1 + c_2) f(x_m, t_m) + h^2 C_2 \left(\frac{\partial f}{\partial x} a_{21} f + \frac{\partial f}{\partial t} b_2\right)_m + O(h^3)$$
(2.9)

С другой стороны имеется ряд Тейлора

$$x_{m+1} = x_m + h f\left(x_m, t_m\right) + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} f\right)_m + O\left(h^3\right), \quad (2.10)$$

Отсюда, приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях h в выражениях (2.9) и (2.10), получим $c_1+c_2=1,\ c_2a_{21}=1/2,\ c_2b_2=1/2.$

Особенностью все методов Рунге-Кутты является то, что количество алгебраических уравнения всегда меньше, чем количество определяемых коэффициентов. Поэтому решений существует бесконечное множество. Это объясняет большое разнообразие методов Рунге-Кутты, которые известны в настоящее время.

Для 2-х этапного метода обычно берут дополнительное условие в виде $c_1=c_2$, что приводит к следующей формуле ($c_1=c_2=\frac{1}{2},\ a_{21}=b_2=1$)

$$x_{m+1} = x_m + \frac{1}{2} \left(f(x_m, t_m) + f(x_m + hf(x_m, t_m), t_m + h) \right), \quad (2.11)$$

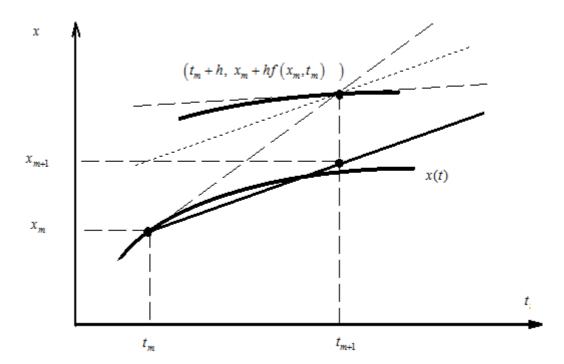


Рисунок 2.3 - Графическое представление 2-х этапного метода Рунге-Кутты Рассмотренный метод является одношаговым явным методом второго порядка точности.

Многошаговые методы интегрирования систем ОДУ

Для решения начальной задачи Коши

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \quad , \tag{2.12}$$

где $t \in [t_o, T]$, $x(t_o) = x_o$, уравнение (2.12) записывается в виде

$$dx = f(x,t)dt (2.13)$$

Здесь для простоты рассматривается одномерный случай, хотя в многомерном случае все тоже самое делается для каждого уравнения системы ОДУ.

После этого формально берется интеграл от правой и левой части

$$\int_{x_m}^{x_{m+1}} dx = \int_{t_m}^{t_{m+1}} f(x,t)dt \quad , \tag{2.14}$$

ИЛИ

$$x_{m+1} = x_m + \int_{t_m}^{t_{m+1}} f(x,t)dt \quad , \tag{2.15}$$

Теперь, чтобы построить формулу численного интегрирования необходимо приближенно описать функцию $f(x,t) \approx P(t)$ как функцию только времени. Если функция P(t) построена, то

$$x_{m+1} = x_m + \int_{t_m}^{t_{m+1}} P(t)dt \quad , \tag{2.16}$$

Если интеграл в выражение берется в аналитическом виде, то получается некоторая приближенная формула для интегрирования уравнения (2.12).

Для примера построим 2-х шаговый метод интегрирования. Для этого возьмем две точки (x_m,t_m) , (x_{m-1},t_{m-1}) и проведем через них полином первой степени $P(t)=\frac{t-t_{m-1}}{h}f_m+\frac{t_m-t}{h}f_{m-1}$. Нетрудно заметить, что $P(t_m)=f_m$, $P(t_{m-1})=f_{m-1}$. Теперь, подставляя функцию P(t) в (2.16)

$$x_{m+1} = x_m + \int_{t_m}^{t_{m+1}} \left(\frac{t - t_{m-1}}{h} f_m + \frac{t_m - t}{h} f_{m-1} \right) dt \quad , \tag{2.16}$$

и взяв интеграл, получим

$$x_{m+1} = x_m + \frac{h}{2} (3f_m - f_{m-1}) \quad , \tag{2.17}$$

Формула (2.17) определяет 2-х шаговый явный метод интегрирования

второго порядка точности.

Аналогично может быть построена неявный метод. для этого надо взять точки (x_m,t_m) , (x_{m+1},t_{m+1}) и провести те же преобразования. В этом случае можно получить

$$x_{m+1} = x_m + \frac{h}{2} (f_m + f_{m+1}) \quad , \tag{2.18}$$

Нетрудно заметить, что формула (2.18) фактически повторяет структуру 2-х этапного метода Рунге-Кутты (2.13), только в том случае значение f_{m+1} вычисляется с помощью метода Эйлера.

Понятно, что чтобы применить формулу (2.18) надо решить (в общем случае численно с использованием методов решения нелинейных уравнений) уравнение (2.18), что конечно усложняет алгоритмы использования неявных методов. В связи с этим часто используется подход, который заключается в совместном применение явных и неявных формул. Такие методы получили названия методов "прогноза-коррекции". В этом случае предварительное вычисление f_{m+1} (прогноз) осуществляется по явной формуле, например, (2.17), а окончательное значение получается по неявной формуле (2.18) (коррекция). Тогда метод "прогноза-коррекции" в рассматриваемом случае будет иметь вид

$$\overline{x}_{m+1} = x_m + \frac{h}{2} (3f_m - f_{m-1})$$
 , (2.17)

$$x_{m+1} = x_m + \frac{h}{2} \left(f_m + \overline{f}_{m+1} \right) \quad , \tag{2.18}$$

где
$$\overline{f}_{m+1} = f(\overline{x}_{m+1}, t_{m+1})$$
.

Методы "прогноза-коррекции" обладают той особенностью, что погрешность интегрирования на одном шаге может быть приближенно вычислена по формуле $|x_{m+1} - \overline{x}_{m+1}|$. Дело в том, что явные и неявные формулы всегда приводят к погрешностям разных знаков, поэтому разность значений, полученных по этим формулам, можно использовать для оценки

локальной погрешности интегрирования.

Замечание. Тоже самое было справедливо для явного и неявного методов Эйлера.

При построении многошаговых методов более высокого порядка точности функция P(t) строится по большему количеству точек. Чаще всего в качестве функции P(t) используются интерполяционные полиномы, которые будут изложены в разделе "Приближение функций". В общем случае многошаговые методы можно записать в виде

$$x_{m+1} = x_m + h \sum_{i=0}^{S} c_i f_{m+1-i} \quad , \tag{2.19}$$

где c_i - коэффициенты метода.

Если $c_0 = 0$, то метод будет явным, если $c_0 \neq 0$ - то неявным.

Оценка полной (глобальной) методической погрешности интегрирования ОДУ

При интегрировании ОДУ на некотором конечном интервале $[t_0,T]$ времени локальные погрешности определенным образом суммируются и в конечной точке t=T получается полная (или глобальная погрешность) интегрирования. Оценим эту погрешность в простом случае для явного метода Эйлера. Проведем равномерную дискретизацию всего отрезка точками $t_0, t_1, ... t_{N-1}, t_N = T$. Введем обозначения: $x(t_m)$ - решение ОДУ, x_m - приближенное численное значение, m=0,1,...N.

Полная погрешность в конечной точке будет равна

$$\delta_N = x(t_N) - x_N. \tag{2.20}$$

Вычисляя x_N с использованием метода Эйлера, получим

$$x_N = x_{N-1} + h f(x_{N-1}, t_{N-1}). (2.21)$$

С другой стороны, определяя решение x(t) ОДУ через ряд Тейлора, найдем

$$x(t_N) = x(t_{N-1}) + h f(x(t_{N-1}), t_{N-1}) + \delta_{N-1}^l,$$
(2.22)

где δ_{N-1}^l - локальная погрешность на последнем шаге.

Подставляя (2.21) и (2.22) в (2.20), получим

$$\delta_N = x(t_{N-1}) + h f(x(t_{N-1}), t_{N-1}) + \delta_{N-1}^l - x_{N-1} - h f(x_{N-1}, t_{N-1}). \quad (2.23)$$

или

$$\delta_{N} = \delta_{N-1} + h \left[f(x(t_{N-1}), t_{N-1}) - f(x_{N-1}, t_{N-1}) \right] + \delta_{N-1}^{l}.$$
 (2.24)

где $\delta_{N-1} = x(t_{N-1}) - x_{N-1}$ - полная методическая погрешность на предыдущем шаге.

Для оценки погрешности (2.24) воспользуемся условием Липшица

$$\left| f\left(x(t_{N-1}), t_{N-1}\right) - f\left(x_{N-1}, t_{N-1}\right) \right| < L \left| x(t_{N-1}) - x_{N-1} \right| = L \left| \delta_{N-1} \right|. \tag{2.25}$$

$$\text{где } L < \infty.$$

Используя (2.25), оценим δ_N по модулю

$$\left|\delta_{N}\right| < \left|\delta_{N-1}\right| + hL\left|\delta_{N-1}\right| + \left|\delta_{N-1}^{l}\right| = \left|\delta_{N-1}\right|\left(1 + hL\right) + \left|\delta_{N-1}^{l}\right|.$$
 (2.26)

Сделаем тоже самое для предыдущего шага, уменьшив в (2.26) на единицу, тогда

$$\left|\delta_{N-1}\right| < \left|\delta_{N-2}\right| (1+hL) + \left|\delta_{N-2}^{l}\right|.$$
 (2.27)

Подставляя (2.27) в (2.26), получим

$$\left| \delta_{N} \right| < \left| \delta_{N-2} \right| (1 + hL) + \left| \delta_{N-2}^{l} \right| (1 + hL) + \left| \delta_{N-1}^{l} \right|.$$
 (2.28)

Продолжая данный процесс для предыдущих шагов, получим окончательно

$$\left|\delta_{N}\right| < \left|\delta_{0}^{l}\right| \left(1 + hL\right)^{N-1} + \dots + \left|\delta_{N-2}^{l}\right| \left(1 + hL\right) + \left|\delta_{N-1}^{l}\right|.$$
 (2.29)

Таким образом, полная погрешность (2.29) представляет собой сумму локальных погрешностей, умноженных на соответствующие коэффициенты.

Оценку (2.29) можно еще более упростить, введя величины

$$C_i(h) < \left| \delta_i^l \right| (1 + hL)^{N - 1 - i}, \tag{2.30}$$

причем $(1+hL) \to 1$ при $h \to 0$. Поэтому порядок функций $C_i(h) = O(h^2)$ совпадает с порядком локальных погрешностей.

Определим

$$\overline{C}(h) = \max_{i} C_{i}(h), i = 0, 1, ... N - 1,$$
 (2.31)

Поэтому (2.29) принимает вид

$$\left| \delta_N \right| < N\overline{C}(h) = \frac{T - t_0}{h} M_2 h^2 = (T - t_0) M_2 h.$$
 (2.32)

где
$$\overline{C}(h) = M_2 h^2$$
.

Таким образом, для явного метода Эйлера имеем оценку полной методической погрешности

$$\left|\delta_{N}\right| = O(h). \tag{2.33}$$

В общем случае для метода порядка точности р справедливы оценки

- для локальной методической погрешности

$$\left|\delta_m^l\right| = O\left(h^{p+1}\right),\tag{2.34}$$

- для полной методической погрешности

$$\left|\delta_{m}\right| = O\left(h^{p}\right),\tag{2.35}$$

Если количество шагов N >> 1, то один порядок точности полной погрешности меньше на единицу по сравнению с локальной погрешностью.

Обратный анализ погрешности. Экстраполяция Ричардсона

Обобщением правила Рунге обратного анализа погрешностей при численном решении ОДУ является метод, который получил имя математика Ричардсона. Как и правило Рунге, экстраполяция Ричардсона может быть применена для любого дискретного метода, если известен порядок его точности. При использовании экстраполяции Ричардсона количество численных экспериментов больше двух (два расчета применяются в правиле Рунге). В этом случае для оценки "точного" значения некоторой

характеристики процесса, которая интересна специалисту, используется полином

$$\tilde{x}(h) = c_0 + c_1 h^p + c_2 h^{p+2} + \dots + c_r h^{p+r}, \qquad (2.36)$$

где $c_0, c_1, ... c_r$ - коэффициенты полиномы. Следовательно, для построения полинома (2.36) необходимо провести r+1 численных экспериментов на компьютере. В выражении (2.36) младшая степень полинома h^p соответствует главному члену полной погрешности интегрирования ОДУ. Экстраполяция заключается в определении уточненного значения выходной характеристики, которая определяется пределом

$$\lim_{h \to 0} \tilde{x}(h) = c_0, \tag{2.37}$$

Соответственно погрешность при шаге h будет равна

$$\delta(h) = |\tilde{x}(h) - c_0|, \tag{2.38}$$

Формула (2.38) также относится к практическим способам оценки погрешности по результатам численного эксперимента (апостериорная оценка). Коэффициенты полинома определяются посредством решения системы линейных алгебраических уравнений

$$c_{0} + c_{1}h_{1}^{p} + c_{2}h_{1}^{p+2} + \dots + c_{r}h_{1}^{p+r} = \tilde{x}(h_{1}),$$

$$c_{0} + c_{1}h_{2}^{p} + c_{2}h_{2}^{p+2} + \dots + c_{r}h_{2}^{p+r} = \tilde{x}(h_{2}),$$

$$\vdots$$

$$c_{0} + c_{1}h_{r}^{p} + c_{2}h_{r+1}^{p+2} + \dots + c_{r}h_{r+1}^{p+r} = \tilde{x}(h_{r+1}),$$

$$(2.38)$$

которую можно записать в матричном виде

$$AC = B,$$

$$C = B,$$

$$C = \begin{bmatrix} 1 & h_1^p & \dots & h_1^{p+r} \\ 1 & h_2^p & \dots & h_2^{p+r} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & h^p & h^{p+r} \end{bmatrix}, C = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \dots \\ c_r \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} \tilde{x}(h_1) \\ \tilde{x}(h_2) \\ \dots \\ \tilde{x}(h_{r+1}) \end{bmatrix}.$$

Здесь вектор B представляет собой совокупность результатов численных экспериментов, проведенных с шагами $h_1,...h_{r+1}$.

Процесс экстраполяции иллюстрируется на рис.

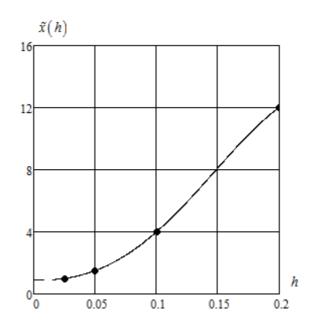


Рисунок 2.4 - Иллюстрация процесса интерполяции Ричардсона

Устойчивость численных методов интегрирования ОДУ

Важным свойством численных методов ОДУ является свойство устойчивости. При анализе устойчивости решений ОДУ будем различать устойчивость частного решения ОДУ и устойчивость численного решения метода интегрирования.

Устойчивость решения ОДУ

Рассмотрим дифференциальное уравнение

$$\frac{dx}{dt} = f\left(x, t\right),\tag{2.40}$$

Пусть функция $\overline{x}(t)$ есть частное решение уравнения (2.40), то есть тождественно

$$\frac{d\overline{x}}{dt} \equiv f(\overline{x}, t), \tag{2.41}$$

Рассмотрим малые отклонения от частного решения Δx и подставим $x = \overline{x} + \Delta x$ в (2.40), тогда

$$\frac{d(\overline{x} + \Delta x)}{dt} = f(\overline{x} + \Delta x, t) \tag{2.42}$$

Разложим правую часть (2.42) в ряд Тейлора по отклонению

$$\frac{d\overline{x}}{dt} + \frac{d\Delta x}{dt} = f(\overline{x}, t) + \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{\Delta x = 0} \Delta x + \dots$$
(2.43)

Учитывая (2.41) и оставляя только линейные члены по отклонению, получим

$$\frac{d\Delta x}{dt} = A(t)\Delta x \tag{2.44}$$

где $A(t) = \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{\Lambda x = 0}$, причем предполагается, что $A(t) \neq 0$.

Определение. Частное решение $\overline{x}(t)$ будет устойчиво, причем асимптотически, если $\Delta x(t) \to 0$ при $t \to \infty$.

Рассмотрим малый отрезок $t \in [t_m, t_{m+1}]$, имея ввиду, что далее для определения решения будет использоваться численный метод. На этом отрезке положим $A(t) \approx A(t_*) = A_* = \mathrm{const}$. В этом случае уравнение (2.44) можно проинтегрировать методом разделения переменных

$$\frac{d\Delta x}{\Delta x} = A_* dt \Rightarrow \int_{\Delta x_m}^{\Delta x} \frac{d\Delta x}{\Delta x} = A_* \int_{t_m}^t dt \Rightarrow \Delta x(t) = \Delta x_m e^{A_*(t - t_m)}$$
(2.45)

где Δx_m - значение отклонения в момент времени t_m .

Частное решение $\overline{x}(t)$ будет устойчиво, если на каждом отрезке $t\in [t_m,t_{m+1}]$ будет выполняться условие $A_*<0$. Тогда $\Delta x(t)=\Delta x_m e^{A_*(t-t_m)}\to 0$ при $t\to\infty$. И соответственно неустойчиво, если $A_*>0$.

В идеальном случае свойства устойчивости решения ОДУ и его численного решения должны совпадать, то есть устойчивому частному решению должно соответствовать устойчивое численное решение, а неустойчивому - неустойчивое.

Тестовое дифференциальное уравнение

Для сравнения свойств устойчивости различных численных методов используется тестовая задача

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x \tag{2.46}$$

где $\lambda = \text{Re}(\lambda) + i \, \text{Im}(\lambda)$ - комплексный параметр. Уравнение (2.46) имеет тривиальное частное решение $\overline{x} = 0$

Уравнение (2.46) имеет аналитическое решение

$$\frac{d\Delta x}{\Delta x} = \lambda dt \Rightarrow \int_{\Delta x_0}^{\Delta x} \frac{d\Delta x}{\Delta x} = \lambda \int_0^t dt \Rightarrow \Delta x(t) = \Delta x_0 e^{\lambda t}$$
 (2.47)

где Δx_0 - начальное отклонение (можно взять вещественным).

Решение (2.47) перепишем в виде

$$\Delta x(t) = \Delta x_0 e^{\lambda t} = \Delta x_0 e^{(\operatorname{Re}(\lambda) + i \operatorname{Im}(\lambda))t} =$$

$$= \Delta x_0 e^{\operatorname{Re}(\lambda)t} \left[\cos \operatorname{Im}(\lambda)t + i \sin \operatorname{Im}(\lambda)t \right]$$
(2.48)

Так как тригонометрические функции ограничены $\cos \operatorname{Im}(\lambda)t$, $\sin \operatorname{Im}(\lambda)t \le 1$, то частное решение $\overline{x}=0$ будет устойчивым, если $\operatorname{Re}(\lambda) < 0$ и тогда $e^{\operatorname{Re}(\lambda)t} \to 0$ при $t \to \infty$. И неустойчивым, если $\operatorname{Re}(\lambda) > 0$. Если рассмотреть на плоскости координаты $\operatorname{Re}(\lambda)$ (ось абсцисс) и $\operatorname{Im}(\lambda)$ (ось ординат), то областью устойчивости частного решения $\overline{x}=0$ тестовой задачи будет вся левая полуплоскость.

Область устойчивости численного метода как правило не совпадает с областью устойчивости тестовой задачи.

Численный метод называется **абсолютно устойчивым** или A - устойчивым, если он устойчив во всей левой полуплоскости тестовой задачи (в координатах $\operatorname{Re}(\lambda)$, $\operatorname{Im}(\lambda)$).

Численный метод называется **ограниченно устойчивым**, если он устойчив в ограниченной области, принадлежащей левой полуплоскости тестовой задачи.

В качестве примера рассмотрим определение областей устойчивости для явного и неявного методов Эйлера.

Определение областей устойчивости для методов Эйлера

Явный метод Эйлера имеет вид

$$x_{m+1} = x_m + h f(x_m, t_m) (2.49)$$

Для тестовой задачи $f(x_m, t_m) = \lambda x_m$, поэтому

$$x_{m+1} = x_m + h \,\lambda x_m \tag{2.50}$$

или

$$x_{m+1} = x_m \left(1 + h \lambda \right) \tag{2.51}$$

Тогда

$$\frac{\left|x_{m+1}\right|}{\left|x_{m}\right|} = \left|1 + h\lambda\right| \tag{2.52}$$

Если $\frac{\left|x_{m+1}\right|}{\left|x_{m}\right|}$ < 1 на каждом шаге численного интегрирования, то $\left|x_{m}\right| \to 0$

при $m \to \infty$, то есть численное решение будет устойчивым. Поэтому условие устойчивости явного метода Эйлера будет иметь вид

$$|1 + h\lambda| < 1 \tag{2.53}$$

Преобразуем неравенство (2.53) следующим образом

$$\left|1 + h\left[\operatorname{Re}(\lambda) + i\operatorname{Im}(\lambda)\right]\right| < 1 \Longrightarrow \left|1 + h\operatorname{Re}(\lambda) + ih\operatorname{Im}(\lambda)\right| < 1 \tag{2.54}$$

3амечание. Модуль комплексного числа z=a+ib равен $|z|=\sqrt{a^2+b^2}$. Из (2.54) следует

$$\left[1 + h\operatorname{Re}(\lambda)\right]^{2} + \left[h\operatorname{Im}(\lambda)\right]^{2} < 1 \tag{2.55}$$

Граница области (2.55) на плоскости параметров $h \operatorname{Re}(\lambda)$ и $h \operatorname{Im}(\lambda)$ представляет собой окружность, поэтому область устойчивости явного метода есть область, ограниченная окружностью на этой плоскости с координатами ее центра (-1,0).

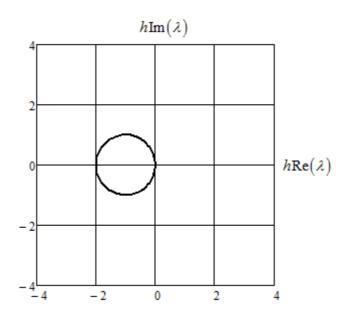


Рисунок 2.5 - Окружность, определяющая область устойчивости явного метода Эйлера (внутренняя область окружности)

Из рис. 2.5 следует, что явный метод Эйлера является ограниченно устойчивым на тестовой задаче.

Неявный метод Эйлера имеет вид

$$x_{m+1} = x_m + h f(x_{m+1}, t_{m+1})$$
(2.56)

Для тестовой задачи $f(x_{m+1},t_{m+1}) = \lambda x_{m+1}$, поэтому

$$x_{m+1} = x_m + h \,\lambda x_{m+1} \tag{2.57}$$

или

$$x_{m+1}\left(1-h\,\lambda\right) = x_m\tag{2.58}$$

Тогда

$$\frac{|x_{m+1}|}{|x_m|} = \frac{1}{|1 - h\lambda|} < 1 \tag{2.59}$$

Если $\frac{|x_{m+1}|}{|x_m|}$ < 1 на каждом шаге численного интегрирования, то $|x_m| \to 0$

при $m \to \infty$, то есть численное решение будет устойчивым. Поэтому условие устойчивости неявного метода Эйлера будет иметь вид

$$\left|1 - h\lambda\right| > 1\tag{2.60}$$

Преобразуем неравенство (2.53) следующим образом

$$\left|1-h\left[\operatorname{Re}(\lambda)+i\operatorname{Im}(\lambda)\right]\right|>1 \Rightarrow \left|1-h\operatorname{Re}(\lambda)-ih\operatorname{Im}(\lambda)\right|>1$$
 (2.61)

Из (2.54) следует

$$\left[1 - h\operatorname{Re}(\lambda)\right]^{2} + \left[h\operatorname{Im}(\lambda)\right]^{2} > 1 \tag{2.62}$$

Граница области (2.62) на плоскости параметров $h \operatorname{Re}(\lambda)$ и $h \operatorname{Im}(\lambda)$ представляет собой окружность, поэтому область устойчивости неявного метода есть область внешняя по отношению к окружности на этой плоскости с координатами ее центра (1,0).

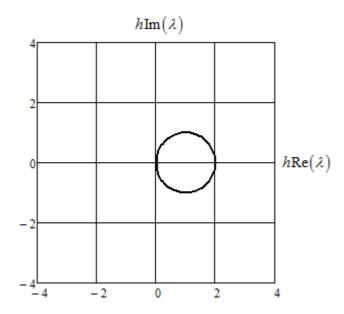


Рисунок 2.6 - Окружность, определяющая область устойчивости неявного метода Эйлера (внешняя область окружности)

Из рис. 2.5 следует, что неявный метод Эйлера является абсолютно устойчивым на тестовой задаче.

Если численный метод имеет порядок точности p > 1, то область устойчивости, например, по сравнению с явным методом Эйлера постепенно увеличивается с увеличением p. Однако все явные методы остаются ограниченно устойчивыми. Соответственно неявные методы чаще всего являются абсолютно устойчивыми.

Определение областей устойчивости численных методов в общем случае сводится к определению корней характеристических многочленов для разностных уравнений. Например, для явного метода Эйлера имеем разностное уравнение

$$x_{m+1} - x_m (1 + h \lambda) = 0 (2.63)$$

Этому уравнению соответствует характеристический многочлен (линейный)

$$r - (1 + h\lambda) = 0,$$
 (2.64)

который имеет корень $r=1+h\,\lambda$. Тогда область устойчивости определяется из условия

$$|r| = |1 + h\lambda| < 1,$$
 (2.65)

что совпадает с ранее полученным условием (2.53).

В общем случае для метода p порядка точности получается многочлен степени больше единицы, например, для явного многошагового метода

$$x_{m+1} = x_m + h \sum_{i=1}^{S} c_i f_{m+1-i} \quad , \tag{2.66}$$

имеем

$$x_{m+1} = x_m + h \sum_{i=1}^{S} c_i f_{m+1-i} \quad , \tag{2.67}$$

и получаем характеристический многочлен вида

$$r^{S} - (1 + hc_{1}\lambda)r^{S-1} - \dots - hc_{S}\lambda = 0 \quad , \tag{2.68}$$

Тогда область устойчивости численного метода определяется из условия, чтобы все корни

$$|r_k| < 1, \quad k = 1, 2, \dots S$$
 (2.68)

Жесткие системы ОДУ

Рассмотрим систему ОДУ

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \quad , \tag{2.69}$$

где $x = (x^{(1)}, ... x^{(n)})$ - вектор переменных состояния системы.

Жесткими системами называются такие системы ОДУ, в которых разные переменные $x^{(k)}$ изменяются с существенно разными скоростями. Например, это можно видеть на рис. 2.7.

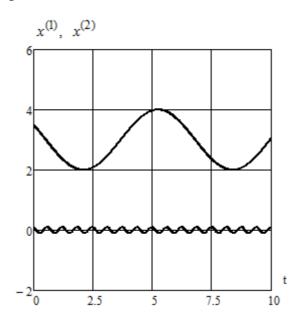


Рисунок 2.7 - Пример поведения переменных в жесткой системе ОДУ

В этом случае полезными могут оказаться неявные методы интегрирования, которые являются абсолютно устойчивыми, то есть не обращая внимание на быстрые переменные (если они не интересуют специалиста), можно увеличить шаг интегрирования, исходя из погрешности вычисления поведения медленных переменных.

Более строгое определение жестких систем связано с условиями Липшица

$$\left|f^{(k)}(x^{\left(1\right)},...x^{\left(j\right)},...x^{\left(n\right)}) - f^{(k)}(x^{\left(1\right)},...\overline{x}^{\left(j\right)},...x^{\left(n\right)})\right| < L_{kj} \left|x^{\left(j\right)} - \overline{x}^{\left(j\right)}\right|$$
 для $\forall k,j$, где $L_{kj} < \infty$.

Или если
$$x^{\left(j\right)} \to \overline{x}^{\left(j\right)}, \quad \left| \frac{\partial f^{(k)}}{\partial x^{\left(j\right)}} \right| < L_{kj}.$$

Жесткими называются такие системы, для которых

$$\max \left| \frac{L_{kj}}{L_{im}} \right| >> 1 \quad , \tag{2.70}$$

Обычно порядка
$$\max \left| \frac{L_{kj}}{L_{im}} \right| \approx 10^4 - 10^5$$
 .

Особенно это часто встречается для систем с большим количеством уравнений, среди которых как правило встречаются быстрые и медленные перееменные.

Автоматический выбор шага интегрирования (интегрирование с переменных шагом)

Интегрирование с переменным шагом применяется тогда, когда на различных участках изменение переменных происходит с существенно разными скоростями. Например,

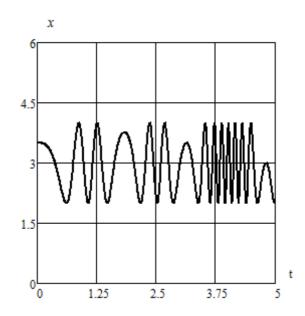


Рисунок 2.8 - Пример поведения решения, требующего переменного шага

Существуют много алгоритмов изменения шага интегрирования в процессе счета, однако все они основаны на каких-либо оценках локальной ошибки интегрирования. В зависимости от поведения локальной ошибки

происходит изменение шага.

Рассмотрим часто применяемый алгоритм Фельберга. На каждом шаге интегрирования вычисляется величина

$$A_m = \max_{k} \left| \frac{\tilde{\delta}_k^{(m)}}{D_k} \right| \quad , \tag{2.71}$$

где $\tilde{\delta}_k^{(m)}$ - оценки локальной ошибки интегрирования k -ой переменной на m -ом шаге, D_k - константы автоматического выбора шага (заданная локальная погрешность). Тогда используется следующий алгоритм

$$h_{m+1} = \begin{cases} h_m & \text{if } 2^{-(p+1)} \le A_m \le 1\\ h_m / 2 & \text{if } A_m > 1\\ 2h_m & \text{if } A_m < 2^{-(p+1)} \end{cases} , \qquad (2.71)$$

где h_m - шаг интегрирования в момент времени t_m .

Чтобы использовать алгоритм (2.71) необходимо знать оценку локальной ошибки интегрирования $\tilde{\delta}_k^{(m)}$.

Перечислим возможные оценки, которые приводились ранее

1. На каждом шаге интегрирования используется правило Рунге

$$\tilde{\delta}_{k}^{(m)} = \frac{\left|\tilde{x}_{m+1}(h_{m}) - \tilde{x}_{m+1}(h_{m}/2)\right|}{2^{p+1} - 1} 2^{p+1} , \qquad (2.72)$$

где $\tilde{x}_{m+1}(h_m), \, \tilde{x}_{m+1}(h_m \, / \, 2)$ - численные решения, вычисленные с использованием шагов h_m и $h_m \, / \, 2$.

Этот универсальный способ может быть применен для любого численного метода порядка точности p, однако он имеет недостаток: двойной расчет.

2. Для методов Рунге-Кутты используется вариант методов, которые называются вложенные методы. Используются два решения

$$\overline{x}_{m+1} = x_m + hF_S(h, x_m, t_m) \quad ,$$

$$x_{m+1} = x_m + hF_{S+1}(h, x_m, t_m)$$
 ,

где
$$F_S(h,x_m,t_m) = \sum\limits_{i=1}^S c_i K_i^{ig(mig)}, \; F_{S+1}(h,x_m,t_m) = \sum\limits_{i=1}^{S+1} c_i K_i^{ig(mig)}$$

Причем методы построены так, что разность

$$\tilde{\delta}_k^{(m)} = \left| \overline{x}_{m+1} - x_{m+1} \right| \tag{2.73}$$

есть оценка локальной ошибки, то есть для этого требуется одно дополнительное вычисление $K_{S+1}^{\left(m\right)}$ правых частей ОДУ.

- 3. Для многошаговых методов при вычислении локальной ошибки используются методы "прогноза коррекции" (явные и неявные схемы). В этом случае оценка имеет тот же вид (2.73), только \overline{x}_{m+1} вычисляется по явной схеме, а x_{m+1} по неявной. Использование такого способа связано с тем, что явные и неявные схемы всегда дают погрешности разных знаков.
- 4. Если используется метод интегрирования с помощью рядов Тейлора, то для оценки локальной погрешности рассматривается остаточный член

$$\tilde{\delta}_{k}^{(m)} = \left| \frac{h^{p+1}}{(n+1)!} x_{t}^{(n+1)} \right|$$
 (2.74)

где $x_t^{(n+1)}$ - производная n+1 - порядка по времени функции x(t).

5. Для стандартного метода интегрирования Рунге-Кутты 4-ого порядка точности хорошо зарекомендовала на практике формула

$$\tilde{\delta}_{k}^{(m)} = h \left(K_{1k}^{(m)} - K_{2k}^{(m)} - K_{3k}^{(m)} + K_{4k}^{(m)} \right) \tag{2.75}$$

где $K_{ik}^{(m)}$ (i=1,2,3,4) - вычисленные правые части дифференциальных уравнений для k - ой переменной.