

Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений

Цели:

1. Формирование знаний об основных понятиях и определениях теории численного решения дифференциальных уравнений.
2. Формирование умений решать дифференциальные уравнения численными методами.

Задачи:

1. Сформировать теоретические знания необходимые при решении задач.
2. Содействовать расширению профессиональной компетенции в области численного решения дифференциальных уравнений.

Задача решения обыкновенных дифференциальных уравнений сложнее задачи вычисления однократных интегралов, и доля задач, интегрируемых в явном виде, здесь существенно меньше.

Когда говорят об интегрируемости в явном виде, имеют в виду, что решение может быть вычислено при помощи конечного числа «элементарных» операций: сложения, вычитания, умножения, деления, возведения в степень, логарифмирования, потенцирования, вычисления синуса и косинуса и т. п. Уже в период, предшествовавший появлению ЭВМ, понятия «элементарной» операции претерпели изменение. Решения некоторых частных задач настолько часто встречаются в приложениях, что пришлось составить таблицы их значений, в частности таблицы интегралов Френеля, функций Бесселя и ряда других, так называемых *специальных функций*. При наличии таких таблиц исчезает принципиальная разница между вычислением функций $\sin x$, $\ln x$, ... и специальных функций. В том и другом случаях можно вычислять значения этих функций при помощи таблицы, и те и другие функции можно вычислять, приближая их многочленами, рациональными дробями и т. д. Таким образом, в класс задач, интегрируемых в явном виде, включались задачи, решения которых выражаются через специальные функции. Однако и этот, более широкий, класс составляет относительно малую долю задач, предъявляемых к решению. Существенное расширение класса реально решаемых дифференциальных уравнений, а следовательно, и расширение сферы применения математики произошло с разработкой численных методов и активным повсеместным использованием ЭВМ.

В настоящее время затраты человеческого труда при решении на ЭВМ задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений сравнимы с затратами на то, чтобы просто переписать заново формулировку этой задачи. При желании можно получить график решения или его изображение на экране. В результате этого для многих категорий научных работников существенно уменьшился интерес к изучению частных способов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений в явном виде.

Эта глава посвящена описанию основных методов решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений, исследованию свойств этих методов и оценке их погрешности.

Обратим внимание на то обстоятельство, что, как и в других случаях, первоначальный анализ практической пригодности методов и отбрасывание непригодных методов часто удается произвести, изучая простейшие задачи, где точное и приближенное решения задачи выписываются в явном виде.

Один из простейших по своему описанию методов решения задачи Коши основан на использовании формулы Тейлора.

Пусть требуется найти на отрезке $[x_0, x_0 + X]$ решение дифференциального уравнения

$$y' = f(x, y) \quad (1)$$

при начальном условии $y(x_0) = y_0$; $f(x, y)$ - функция, аналитическая в точке

(x_0, y_0) . Дифференцируя (1) по x , имеем соотношения

$$y'' = f_x(x, y) + f_y(x, y)y',$$

$$y''' = f_{xx}(x, y) + 2f_{xy}(x, y)y' + f_{yy}(x, y)y'^2 + f_y(x, y)y'',$$

Подставляя $x = x_0$ и $y = y_0$ в (1) последние соотношения, последовательно получаем значения

$$y'(x_0), y''(x_0), y'''(x_0), \dots;$$

Таким образом, можно написать приближенное равенство

$$y(x) \approx \sum_{i=0}^n \frac{y^{(i)}(x_0)}{i!} (x - x_0)^i. \quad (2)$$

Если значение $|x - x_0|$ больше радиуса сходимости ряда

$$\sum_{i=0}^n \frac{y^{(i)}(x_0)}{i!} (x - x_0)^i.$$

то погрешность (2) не стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$ и предлагаемый метод неприменим.

Иногда целесообразно поступить следующим образом. Разобьем отрезок $[x_0, x_0 + X]$ на отрезки $[x_{j-1}, x_j]$, $j = 1, \dots, N$. Будем последовательно получать приближения y_i к значениям решения $y(x_j)$, $j = 1, \dots, N$, по следующему правилу. Пусть значение y_i уже найдено, вычисляем значения в точке x_j производных $y_j^{(i)}$ решения исходного дифференциального уравнения, проходящего через точку (x_i, y_i) . На отрезке $y_j^{(i)}$ полагаем

$$y(x) \approx z_j(x) \approx \sum_{i=0}^n \frac{y_i^{(i)}}{i!} (x - x_0)^i. \quad (3)$$

и соответственно берем

$$y_{j+1} = z_j(x_{j+1}). \quad (4)$$

Рассмотрим случай, когда $x_{j+1} - x_j \equiv h$. Если бы значение y_j совпадало со значением точного значения $y(x_j)$, то погрешность от замены y_{j+1} на $z_j(x_{j+1})$ имела бы порядок $O(h^{n+1})$. Поскольку мы вносим погрешность на $O(h^{-1})$ отрезках, то можно ожидать, что при уменьшении шага сетки будет выполняться соотношение

$$\max |y_j - y(x_j)| = O(h^n).$$

В ряде случаев такого рода рассуждения приводят к неправильному заключению о наличии факта сходимости приближенного решения к точному, в то время как в действительности этого нет. Поэтому строгое обоснование сходимости методов при уменьшении шага, а также получение оценки погрешности имеет не только теоретическое, но и важнейшее практическое значение.

При использовании этого метода нужно вычислять значения функции f и всех ее производных $f_{z^j, y^{m-j}}$ при $m < n$, т.е. вычислять $n(n+1)/2$ значений различных функций. Это требует написания большого числа блоков вычисления производных, что противоречит основной тенденции упрощения отношений между пользователем и ЭВМ.

В настоящее время на некоторых ЭВМ имеются пакеты программ, которые по заданной программе вычисления значений функции строят программу вычисления значений ее производных. Таким образом, при наличии таких пакетов программ, казалось бы, отпадает приведенное выше возражение о сложности использования описанного ранее метода.

Однако этот метод применяется редко. Как правило, программы, создаваемые с помощью таких пакетов, при той же точности результата требуют существенно больших затрат машинного времени, чем программы, основанные на рассматриваемых далее более простых методах типа Рунге-Кутты и Адамса.

В то же время описанный выше алгоритм может быть полезен. Например, при расчетах траекторий движения небесных тел приходится многократно интегрировать системы дифференциальных уравнений вполне определенного вида при различных начальных

условиях и различных значениях параметров в правых частях. То обстоятельство, что все время решается одна и та же система дифференциальных уравнений, дает следующее преимущество: конкретные формулы для производных правых частей системы имеют много общего; одновременное вычисление всех этих производных требует относительно малого числа арифметических операций, и рассматриваемый метод иногда оказывается эффективнее других методов численного интегрирования.

Методы Рунге—Кутты

В частном случае $n = 1$ формула (1.3) имеет вид

$$y_{j+1} = y_j + hf(x_j, y_j), h = x_{j+1} - x_j \quad (1)$$

Этот метод называется *методом Эйлера*. Можно построить другой класс расчетных формул, к которому принадлежит метод Эйлера. Укажем сначала простейшие методы этого класса, получаемые из наглядных соображений. Пусть известно значение $y(x)$ и требуется вычислить значение $y(x + h)$. Рассмотрим равенство

$$y(x + h) = y(x) + \int_0^h y'(x + t) dt$$

При замене интеграла в правой части на величину $hy'(x)$ погрешность имеет порядок $O(h^2)$, т.е.

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + O(h^2).$$

Поскольку $y'(x) = f(x, y(x))$, отсюда имеем

$$y(x + h) = y(x) + hf(x, y(x)) + O(h^2).$$

Отбрасывая член порядка $O(h^2)$ и обозначая $x = x_j$, $x + h = x_{j+1}$, получим расчетную формулу Эйлера (1). Для получения более точной расчетной формулы нужно точнее аппроксимировать интеграл в правой части (2). Воспользовавшись квадратурной формулой трапеции, получим

$$y(x + h) = y(x) + h/2 (y'(x) + y'(x + h)) + O(h^3),$$

иначе,

$$y(x + h) = y(x) + h/2(f(x, y(x)) + f(x + h, y(x + h))) + O(h^3), \quad (3)$$

соответствующая расчетная формула

$$y(x + h) = y_i + h/2(f(x_j, y_j) + f(x_{j+1}, y_{j+1})) + O(h^3) \quad (4)$$

называется *неявной формулой Адамса второго порядка точности*. В некоторых случаях, в частности, когда f линейна по y , это уравнение может быть разрешено относительно y_{j+1} . Обычно же это уравнение неразрешимо явно относительно y_{j+1} , поэтому произведем дальнейшее преобразование алгоритма.

Заменим $y(x + h)$ в правой части (3) на некоторую величину

$$y^* = y(x + h) + O(h^2) \quad (5)$$

Тогда правая часть изменится на величину

$$h/2(f(x + h, y^*) - f(x + h, y(x + h))) = h/2 f_y(x + h, \bar{y})(y^* - y(x + h)),$$

где \bar{y} находится между y^* и $y(x + h)$. Вследствие предположения (5) эта величина имеет порядок $O(h^3)$. Таким образом, при условии (5) имеет место соотношение

$$y(x + h) = y(x) + h/2(f(x, y(x)) + f(x + h, y^*)) + O(h^3).$$

Условию (5) удовлетворяет результат вычислений по формуле Эйлера

$$y^* = y(x) + hf(x, y(x)).$$

Последние соотношения определяют пару расчетных формул

$$y_{j+1}^* = y_j + hf(x_j, y_j). \quad (6)$$

$$y_{j+1} = y_j + h/2(f(x_j, y_j) + f(x_{j+1}, y_{j+1}^*)).$$

При малых h выражение в правой части (4) удовлетворяет условию сжимаемости (§ 7.1), поэтому уравнение (4) также можно решать методом простой итерации:

$$y_{j+1}^{k+1} = y_j + \frac{h}{2}(f(x_j, y_j) + f(x_{j+1}, y_{j+1}^k))$$

Если y_{j+1}^0 вычисляется по методу Эйлера:

$$y_{j+1}^0 = y_j + hf(x_j, y_j)$$

то y_{j+1}^1 , получаемое на первом шаге итерации, совпадает с y_{j+1} , получаемым по формуле (6). Дальнейшие итерации не приводят к повышению порядка точности по h ; в то же время иногда главный член погрешности уменьшается при переходе от y_{j+1}^1 к y_{j+1}^2 . Если такое уменьшение погрешности компенсирует возрастание вычислительных затрат на шаге, то оно целесообразно.

Можно предложить теоретически обоснованный критерий, позволяющий при малых h выбирать каждый раз наиболее целесообразное число итераций. Однако его использование требует очень большого объема дополнительных вычислений. Поэтому выбор между числом итераций, равным 1 или 2, обычно осуществляется на основе предшествующего опыта, вычислительного эксперимента или просто «волевым» образом.

Построим другую пару формул с погрешностью на шаге такого же порядка. Интеграл в правой части (2) заменим по формуле прямоугольников:

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x+h/2) + O(h^3),$$

или, что все равно,

$$y(x+h) = y(x) + hf(x+h/2, y(x+h/2)) + O(h^3).$$

Если

$$y^* = y(x + \frac{h}{2}) + O(h^2)$$

то, как и в предшествующем случае, имеем

$$y(x+h) = y(x) + hf(x + \frac{h}{2}, y^*) + O(h^3)$$

В качестве y^* можно взять результат вычислений по формуле Эйлера с шагом $h/2$: $y^* = y(x) + h/2 f(x, y(x))$. Этим соотношениям соответствует пара расчетных формул

$$\begin{aligned} y_{j+1/2} &= y_j + \frac{h}{2} f(x_j, y_j) \\ y_{j+1} &= y_j + hf(x_j + \frac{h}{2}, y_{j+1/2}) \end{aligned} \quad (7)$$

Полученные методы относятся к семейству *методов Рунге—Кутты*, имеющих следующий вид. В процессе вычислений фиксированы некоторые числа

$$\alpha_2, \dots, \alpha_q, \quad p_1, \dots, p_q, \quad \beta_{ij}, 0 < j < i \leq q;$$

последовательно получаем

$$k_1(h) = hf(x, y),$$

$$k_2(h) = hf(x + \alpha_2 h, y + \beta_{21} k_1(h)),$$

.....

$$k_q(h) = hf(x + \alpha_q h, y + \beta_{q1} k_1(h) + \dots + \beta_{q,q-1} k_{q-1}(h))$$

и полагаем

$$y(x+h) \approx z(h) = y(x) + \sum_{i=1}^q p_i k_i(h).$$

Рассмотрим вопрос о выборе параметров α_i , p_i , β_{ij} . Обозначим

$\varphi(h) = y(x+h) - z(h)$. Если $f(x, y)$ - достаточно гладкая функция своих аргументов, то $k_1(h)$, ..., $k_q(h)$ и $\varphi(h)$ — гладкие функции параметра h . Предположим, что $f(x, y)$ настолько гладкая, что существуют производные $\varphi'(h)$, ..., $\varphi^{(s+1)}(h)$, а α_i , p_i , β_{ij} выбраны так, что $\varphi'(0)$, ..., $\varphi^{(s)}(0) = 0$. Кроме

того, предположим, что существует некоторая гладкая функция $f(x, y)$, для которой соответствующее значение $\varphi^{(s+1)}(0) \neq 0$. Согласно формуле Тейлора выполняется равенство

$$\varphi(h) = \sum_{i=0}^s \frac{\varphi^{(i)}(0)}{i!} h^i + \frac{\varphi^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!} h^{s+1} = \frac{\varphi^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!} h^{s+1}, \quad (8)$$

где $0 < \theta < 1$. Величина $\varphi(h)$ называется погрешностью метода на шаге, а s - порядком погрешности метода. При $q = 1$ имеем

$$\varphi(h) = y(x+h) - y(x) - p_1 h f(x, y), \quad \varphi(0) = 0,$$

$$\varphi'(0) = (y'(x+h) - p_1 f(x, y))|_{h=0} = f(x, y)(1 - p_1),$$

$$\varphi''(h) = y''(x+h);$$

здесь и далее $y = y(x)$. Равенство $\varphi'(0) = 0$ выполняется для всех гладких функций $f(x, y)$ лишь в случае $p_1 = 1$. Этому значению p_1 соответствует метод Эйлера. Для погрешности этого метода на шаге, согласно (8), получаем выражение

$$\varphi(h) = \frac{y''(x + \theta \cdot h) h^2}{2}.$$

Рассмотрим случай $q = 2$. Имеем

$$\varphi(h) = y(x+h) - y(x) - p_1 h f(x, y) - p_2 h \bar{f}(\bar{x}, \bar{y}),$$

$$\text{где } \bar{x} = x + \alpha_2 h, \quad \bar{y} = \beta_{21} h f(x, y).$$

Вычислим производные функции $\varphi(h)$:

$$\varphi'(h) = y'(x+h) - p_1 f(x, y) - p_2 f(\bar{x}, \bar{y}) - p_2 h (\alpha_2 f_x(\bar{x}, \bar{y}) + \beta_{21} f_y(\bar{x}, \bar{y}) f(x, y)),$$

$$\varphi''(h) = y''(x+h) - 2p_2 (\alpha_2 f_x(\bar{x}, \bar{y}) + \beta_{21} f_y(\bar{x}, \bar{y}) f(x, y)) - p_2 h (\alpha_2^2 f_{xx}(\bar{x}, \bar{y}) + 2\alpha_2 \beta_{21} f_{xy}(\bar{x}, \bar{y}) f(x, y) + \beta_{21}^2 f_{yy}(\bar{x}, \bar{y}) (f(x, y))^2),$$

$$\varphi'''(h) = y'''(x+h) - 3p_2 (\alpha_2^2 f_{xx}(\bar{x}, \bar{y}) + 2\alpha_2 \beta_{21} f_{xy}(\bar{x}, \bar{y}) f(x, y) + \beta_{21}^2 f_{yy}(\bar{x}, \bar{y}) (f(x, y))^2) + O(h).$$

Согласно исходному дифференциальному уравнению

$$y' = f, \quad y'' = f_x + f_y f, \quad y''' = f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_y y''.$$

Подставим в выражения $\varphi(h)$, $\varphi'(h)$, $\varphi''(h)$, $\varphi'''(h)$ значение $h = 0$ и воспользуемся этими соотношениями; получим]

$$\varphi(0) = y - y = 0,$$

$$\varphi'(0) = (1 - p_1 - p_2) f(x, y),$$

$$\varphi''(0) = (1 - 2p_2 \alpha_2) f_x(x, y) + (1 - 2p_2 \beta_{21}) f_y(x, y) f(x, y), \quad (9)$$

Соотношение $\varphi(0) = \varphi'(0) = 0$ выполняется при всех $f(x, y)$, если $1 - p_1 - p_2 = 0$; (10)

соотношение $\varphi''(0) = 0$ выполняется, если $1 - 2p_2 \alpha_2 = 0$ и $1 - 2p_2 \beta_{21} = 0$. (11)

Таким образом, $\varphi(0) = \varphi'(0) = \varphi''(0) = 0$ при всех $f(x, y)$, если выполнены три указанных выше соотношения (10), (11) относительно четырех параметров. Задавая произвольно один из параметров, получим различные методы Рунге—Кутты с погрешностью второго порядка

малости по h . Например, при $p_1=1/2$ получаем $p_2 = 1/2$, $\alpha_2 = 1$, $\beta_{12} = 1$ - что соответствует паре расчетных формул (6). При $p_1 = 0$ получаем $p_2 = 1$, $\alpha_2 = 1/2$, $\beta_{21} = 1/2$, что соответствует паре расчетных формул (7). В случае уравнения $y' = y$, согласно (9) имеем $\varphi'''(0) = y$ независимо от значений $p_1, p_2, \alpha_2, \beta_{21}$. Отсюда следует, что нельзя построить формулы Рунге—Кутты со значениями $q = 2$ и $s=3$.

В случае $q = 3$ расчетных формул, соответствующих значению $s = 4$, не существует. Наиболее употребительна совокупность расчетных формул при $q = s = 3$:

$$k_1 = hf(x, y), \quad k_2 = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2}\right),$$

$$k_3 = hf(x + h, y - k_1 + 2k_2), \quad \Delta y = \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3).$$

При $q = 4, 5$ нельзя построить расчетных формул рассматриваемого вида со значением $s = 5$; при $q = s = 4$ наиболее употребительна совокупность расчетных формул:

$$k_1 = hf(x, y), \quad k_2 = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2}\right), \quad k_3 = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_2}{2}\right),$$

$$k_4 = hf(x + h, y + k_3), \quad \Delta y = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).$$

Мы использовали выше формулировку «наиболее употребительный». Эта формулировка отражает исторически сложившуюся тенденцию в использовании численных методов. Казалось бы, в руководстве по численным методам следовало не просто отражать тенденцию, а указать, какая формула из данного семейства расчетных формул является наилучшей. Однако ответ на такой вопрос не прост.

У формул одинакового порядка точности по h главные члены погрешности на шаге часто оказываются непропорциональными. Например, вследствие (8), (9) главный член погрешности формулы (6) равен $(B-A)h^3$,

$$\text{Где} \quad B = 1/6 f_{yy} y'', \quad A = 1/12 (f_{xx} + 2f_{xy} y' + f_{yy} (y')^2),$$

$$\text{а у формулы (7) — } (B + A/2)h^3.$$

Поэтому можно указать два уравнения таких, что для первого уравнения меньшую погрешность дает метод (6), а для второго уравнения — метод (7).

В подобной ситуации рекомендации в пользу того или другого метода должны основываться на «волевом решении», принятом с учетом традиций и практики использования методов. Понятие практики вычислительной работы является довольно неопределенным. Число различных классов реально встречающихся дифференциальных уравнений существенно превосходит число задач, на которых производится сравнение методов их численного решения, поэтому суждения «с позиций практики» не всегда объективны. Однако несмотря на такую неопределенность, критерий практики часто несет в себе определенную положительную информацию, которая зачастую на данном этапе развития науки не может быть формализована или обоснована.

Если исторически первый из методов рассматриваемого класса оказался приемлемым, то в дальнейшем пользователи привыкают к нему. Замена этого метода на другой, даже более эффективный метод требует определенных затрат времени на «привыкание» пользователей к новому методу (а следовательно, и определенных психологических затрат). Чтобы широкий круг пользователей согласился на подобную перестройку, необходимо существенное преимущество нового метода по какой-либо из характеристик.

При дальнейшем рассмотрении для нас будет существенно, что погрешность метода на шаге $\varphi(h)$ имеет главный член, а именно справедливо представление вида

$$\varphi(h) = \psi(x, y)h^{s+1} + O(h^{s+2}). \quad (12)$$

Наметим основные этапы доказательства этого соотношения. Предположим, что правая часть и все ее производные до порядка $s + 1$ включительно ограничены равномерно в области G : $x_0 \leq x \leq x_0 + X$, $-\infty < y < \infty$. Тогда также будут равномерно ограничены производные всех решений

уравнения до порядка $s + 2$ включительно. Согласно формуле Тейлора соотношение (8) можно записать в уточненной форме

$$\varphi(h) = \frac{\varphi^{(s+1)}(0)}{(s+1)!} h^{s+1} + \frac{\varphi^{(s+2)}(\theta h)}{(s+2)!} h^{s+2}. \quad (12)$$

Имеем равенство

$$\varphi^{(s+1)}(0) = y^{(s+1)}(0) - z^{(s+1)}(0).$$

Обе величины $y^{(s+1)}(0)$ и $z^{(s+1)}(0)$ явно выражаются через значения в точке (x, y) функции f и ее производных порядка не выше s ; примеры таких явных выражений (при $s = 2$) мы уже получали.

Поскольку правая часть дифференцируема $s + 1$ раз, то отсюда следует, что функция $\psi(x, y)$ дифференцируема в области G и ее производные ψ_x и ψ_y равномерно ограничены в этой области. Аналогично устанавливается, что величина $\varphi^{(s+2)}(\theta h)$ равномерно ограничена при $x_0 \leq x < x + h \leq x_0 + X$. Таким образом, соотношение (12) имеет место.