3. Численные методы решения дифференциальных уравнений

Глава 1. Обыкновенные дифференциальные уравнения

§1. Введение

1. Задача Коши. Численный подход

Как известно, задача Коши заключается в отыскании решения $y(x)$, $x_0 \le x \le x_0+a$ обыкновенного дифференциального уравнения $y' = f(x,y)$, удовлетворяющего заданному начальному условию $y(x_0) = y_0$. Будем считать, как минимум, что функция $f(x,y)$ определена и непрерывна в некотором прямоугольнике

$$\mathcal{D} = \{x, y : x_0 \le x \le x_0 + a, |y - y_0| \le b\}$$

и удовлетворяет в $\mathcal{D}$ условию Липшица по переменной y :

$$|f(x, y + \Delta y) - f(x, y)| \le L|\Delta y|, \ \ (x, y) \in \mathcal{D}, \ \ (x, y + \Delta y) \in \mathcal{D}.$$

В этих условиях, на основании известной теоремы, решение $y(x)$ задача Коши существует и единственно по крайней мере в некоторой окрестности (x_0, x_0+d) точки x_0. Будем предполагать, что это решение можно однозначно продолжить на весь $[x_0, x_0 + a]$.

Численные методы решения задачи Коши характеризуются тем, что на $[x_0, x_0+a]$ вводится сетка $\{x_1, \dots, x_n\}$ *узлов интегрирования.* Для типичного случая равномерной сетки имеем $x_i = x_0+ih, i = \overline{1,n}$, при этом величина $h = x_{i+1}-x_i$ – *шаг интегрирования.* Далее, последовательно отыскиваются приближенные значения y_i точного решения $y(x)$ в узлах интегрирования: $y_i \approx y(x_i), i = \overline{1,n}$. В результате получается таблица $\{x_i, y_i\}$ (сеточная функция) приближенных значений искомого решения $y(x)$ в узлах интегрирования (функция $y(x)$ аппроксимируется последовательностью точек).

Величина $r_i = y(x_i) - y_i, \ i = \overline{1,n}$ характеризует погрешность метода в узле x_i. Понятно, что $r_0 = 0$. Погрешность r_i оценивают в зависимости от шага h. Эта оценка определяет порядок погрешности метода (порядок точности). При этом используются локальная и глобальная оценки погрешности:

1) $r_i = 0$, $|r_{i+1}| \le C_i h^s$ – *локальная* (шаговая) *оценка погрешности*, s – *порядок погрешности на шаге*;

2) $R = \max_{1 \le i \le n} |r_i|$, $R \le Ch^q$ – *глобальная оценка погрешности*, q – *порядок точности метода.*

2. Простейшие методы численного решения задачи Коши

Рассмотрим задачу

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad x_0 \le x \le x_0 + a. \tag{1}$$

Введем сетку узлов интегрирования $x_i = x_0 + ih, i = \overline{1, n}$ с шагом $h > 0$. Рассмотрим уравнение $y'(x) = f(x, y(x))$ вдоль решения $y(x)$ на частичном отрезке $[x_i, x_{i+1}]$. После интегрирования по $x \in [x_i, x_{i+1}]$ получаем

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx, \quad i = \overline{0, n-1}. \tag{2}$$

Представим интеграл по формуле левых прямоугольников

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx = hf(x_i, y(x_i)) + O(h^2).$$

Отбрасывая остаток и переходя к приближенным значениям y_i, из (2) получаем следующую расчетную формулу

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = \overline{0, n-1}. \tag{3}$$

Процедура (3) носит название *метода Эйлера.*

Рассмотрим другие подходы к построению метода. С помощью представления по формуле Тейлора получаем

$$y(x_{i+1}) = y(x_i + h) = y(x_i) + y'(x_i)h + O(h^2) =$$
$$= y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + O(h^2).$$

Отбрасывая остаточный член разложения, приходим к процедуре Эйлера (3).

Укажем ещё один способ получения формулы (3). Запишем уравнение (1) в узле x_i

$$y'(x_i) = f(x_i, y(x_i)).$$

Воспользуемся формулой численного дифференцирования (правая разностная производная)

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + O(h).$$

Это сразу приводит к методу Эйлера.

Получим другой вариант метода. Применяя для интеграла из (2) формулу правых прямоугольников, получаем *неявный метод Эйлера*:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad i = \overline{0, n-1}$$

(для нахождения y_{i+1} необходимо решить уравнение, y_{i+1} задается формулой неявно).

Формула (3) определяет *явный метод Эйлера.*

Построим некоторые модификации метода Эйлера. Возьмем за основу выражение (2) и представим интеграл по формуле трапеций

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx = \frac{h}{2}[f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))] + O(h^3).$$

В результате получаем расчетную формулу неявного типа (метод трапеций)

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})], \quad i = \overline{0, n-1}.$$

Для упрощения этой процедуры значение y_{i+1} в правой части можно считать по явной формуле Эйлера. Это приводит к следующей расчетной схеме (*метод Эйлера с пересчетом*, метод Хьюна)

$$\begin{aligned} &\tilde{y}_i = y_i + hf(x_i, y_i), \\ &y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \tilde{y}_i)], \quad i = \overline{0, n-1}. \end{aligned} \tag{4}$$

Построим вторую модификацию метода Эйлера. С этой целью интеграл в правой части (2) заменим по формуле средних прямоугольников

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx \approx hf(x_i + \frac{h}{2}, y(x_i + \frac{h}{2})).$$

Пусть $\overline{x}_i = x_i + \frac{h}{2}$. Значение $y(\overline{x}_i)$ приближенно вычислим по явному методу Эйлера

$$y(\overline{x}_i) \approx \overline{y}_i = y_i + \frac{h}{2} f(x_i, y_i).$$

В результате, вторая модифицированная схема имеет вид (*метод средней точки*)

$$\overline{y}_i = y_i + \frac{h}{2} f(x_i, y_i), \quad y_{i+1} = y_i + hf(\overline{x}_i, \overline{y}_i). \tag{5}$$

Получим еще одну модификацию метода Эйлера. Проинтегрируем уравнение $y'(x) = f(x, y(x))$ по $x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$. Тогда

$$y(x_{i+1}) = y(x_{i-1}) + \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx.$$

Для приближенного вычисления интеграла применим формулу средних прямоугольников

$$\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x, y(x))dx \approx 2hf(x_i, y(x_i)).$$

В результате получаем расчетную формулу (*уточненный метод Эйлера*)

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i), \quad i = \overline{1, n-1}. \tag{6}$$

Этот же метод может быть получен на основе равенства $y'(x_i) = f(x_i, y(x_i))$ с помощью формулы численного дифференцирования (центральная разностная производная)

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h}.$$

Формула (6) определяет явный двушаговый метод: для подсчета y_{i+1} необходимо знать два предыдущих приближения y_{i-1}, y_i.

§2. Методы Рунге - Кутта

Общая схема данного класса методов имеет вид

$$y_{i+1} = y_i + h\sum_{j=1}^{m} p_j k_j, \quad i = \overline{0, n-1}, \tag{7}$$

$$k_1 = f(x_i, y_i),$$

$$k_2 = f(x_i + \alpha_2 h, y_i + \beta_{21} hk_1),$$

$$\ldots$$

$$k_m = f(x_i + \alpha_m h, y_i + \beta_{m1} hk_1 + \ldots + \beta_{m,m-1} hk_{m-1}).$$

Здесь $p_1, \ldots, p_m$, $\alpha_2, \ldots \alpha_m$, β_{eq}, $0 < q < l \le m$ – параметры метода, подлежащие выбору. Формула (7) определяет m – *этапный метод Рунге-Кутта.*

Предположим, что в узле x_i погрешность метода равна нулю: $y(x_i) = y_i$. Исследуем локальную погрешность в узле x_{i+1}

$$r(h) = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = y(x_i + h) - y_i - h\sum_{j=1}^{m} p_j k_j.$$

Будем считать, что функция $f(x, y)$ является достаточное число раз дифференцируемой по своим аргументам, так что допустимо следующее разложение погрешности по формуле Тейлора

$$r(h) = \sum_{k=0}^{s} \frac{r^{(k)}(0)}{k!}h^k + \frac{r^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!}h^{s+1}, \quad 0 < \theta < 1.$$

Пусть параметры метода (7) выбраны так, чтобы $r(0) = r'(0) = \ldots = r^{(s)}(0) = 0$. Тогда $r(h) \sim O(h^{s+1})$, и число s называют *порядком точности метода.*

Основная цель выбора параметров для заданного m состоит в максимально возможном повышении порядка погрешности при сохранении относительной простоты расчетных формул.

Выделим из (7) некоторые конкретные формулы типа Рунге-Кутта, соответствующие специальным выборам параметров.

1) Пусть $m = 1$ (*одноэтапный метод*).

В этом случае

$$r(h) = y(x_i + h) - y_i - hp_1 f(x_i, y_i).$$

Отсюда

$$r(0) = y(x_i) - y_i = 0,$$
$$r'(0) = y'(x_i) - p_1 f(x_i, y_i) = (1 - p_1) f(x_i, y_i),$$
$$r''(h) = y''(x_i + h).$$

Полагая $p_1 = 1$, получаем $r'(0) = 0$. Этому значению p_1 соответствует метод Эйлера

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = 0, 1, \ldots$$

Погрешность метода на шаге (локальная погрешность) имеет вид

$$r(h) = \frac{1}{2} y''(x_i + \theta h)h^2 \sim O(h^2).$$

Таким образом, метод Эйлера является простейшим случаем методов Рунге- Кутта и имеет *первый порядок точности*

2) Рассмотрим случай $m = 2$ (*двухэтапные методы*).

Тогда

$$r(h) = y(x_i + h) - y_i - h(p_1 f(x_i, y_i) + p_2 f(\overline{x}_i, \overline{y}_i)),$$
$$\overline{x}_i = x_i + \alpha_2 h, \ \ \overline{y_i} = y_i + \beta_{21} h f(x_i, y_i).$$

Для сокращения записи будем обозначать

$$f = f(x_i, y_i), \ \ \overline{f} = f(\overline{x}_i, \overline{y}_i),$$
$$\overline{f}_x = \frac{\partial f}{\partial x}(\overline{x}_i, \overline{y}_i), \ \ \overline{f}_y = \frac{\partial f}{\partial y}(\overline{x}_i, \overline{y}_i).$$

Отметим, что по правилу дифференцирования сложной функции

$$\frac{d}{dh}\overline{f} = \overline{f}_x \alpha_2 + \overline{f}_y f \beta_{21}.$$

Понятно, что $r(0) = 0$. Подсчитаем производные

$$r'(h) = y'(x_i + h) - p_1 f - p_2 \overline{f} - h p_2 [\overline{f}_x \alpha_2 + \overline{f}_y f \beta_{21}],$$

$$r''(h) = y''(x_i + h) - 2p_2[\overline{f}_x \alpha_2 + \overline{f}_y f \beta_{21}] - p_2 h \frac{d^2}{dh^2}\overline{f}.$$

Согласно уравнению (1)

$$y'(x) = f(x, y(x)), \ \ y''(x) = f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) f(x, y(x)).$$

Следовательно

$$r'(0) = (1 - p_1 - p_2) f,$$
$$r''(0) = (1 - 2p_2\alpha_2) f_x + (1 - 2p_2\beta_{21}) f_y f.$$

Чтобы выполнить равенства $r'(0) = r''(0) = 0$ для любой функции f, положим

$$1 - p_1 - p_2 = 0, \ \ 1 - 2p_2\alpha_2 = 0, \ \ 1 - 2p_2\beta_{21} = 0.$$

Получили три уравнения относительно четырех параметров. Произвольно задавая один из них, можно получить различные варианты методов Рунге-Кутта с локальной погрешностью $r(h) = O(h^3)$ (*методы второго порядка точности*).

Положим, например, $p_1 = \frac{1}{2}$. Тогда $p_2 = \frac{1}{2}$, $\alpha_2 = 1$, $\beta_{21} = 1$. Формула (7) принимает вид

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + h f(x_i, y_i))], \ \ i = 0, 1, \ldots$$

Это метод Эйлера с пересчетом (формула (4)).

Пусть теперь $p_1 = 0$. Тогда $p_2 = 1$, $\alpha_2 = \frac{1}{2}$, $\beta_{21} = \frac{1}{2}$. Из (7) получаем процедуру

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}f(x_i, y_i)), \quad i = 0, 1, \ldots$$

Получили вторую модификацию метода Эйлера (метод средней точки(5)).

Таким образом, *модифицированные схемы (4), (5) являются методами Рунге- Кутта с локальной погрешностью порядка h^3 (второго порядка точности).*

Отметим, что увеличить порядок погрешности в случае $m = 2$ невозможно.

3) Пусть $m = 4$ (*четырехэтапный метод*).

В этом случае за счет выбора параметров можно обеспечить локальную погрешность $r(h) \sim O(h^5)$ (четвертый порядок точности).

Приведем наиболее употребительную совокупность формул четвертого порядка точности

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

$$k_1 = f(x_i, y_i),$$

$$k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1),$$

$$k_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2),$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3).$$

Замечание. В принципе методы Рунге-Кутта описываются следующей структурой

$$y_{i+1} = y_i + h\varphi(x_i, y_i, h), \quad i = 0, 1, \ldots$$

Эта формула определяет класс явных одношаговых методов.

§3. Метод Эйлера. Анализ глобальной погрешности

Рассмотрим задачу Коши

$$y' = f(x,y), \quad y(x_0) = y_0 \tag{1}$$

на отрезке $[x_0, x_0 + a]$. Предположим, что функция $f(x,y)$ непрерывна в области

$$\mathcal{D} = \{(x,y) : x_0 \le x \le x_0 + a, \quad |y - y_0| \le b\}$$

вместе с производными f_x, f_y. Это значит, что

1) выполняется условие Липшица для функции $f(x,y)$ по переменной y

$$|f(x, y + \Delta y) - f(x,y)| \le L|\Delta y| \quad (L = \max_{x,y\in\mathcal{D}} |f_y(x,y)|),$$

2) решение $y(x), \;\; x \in [x_0, x_0 + a]$ имеет непрерывную вторую производную

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

[результат дифференцирования тождества $y'(x) = f(x, y(x))$].

Обозначим $M_2 = \max_{x\in[x_0,x_0+a]} |y''(x)|$.

Для численного решения задачи (1) введем сетку узлов интегрирования $x_i = x_0 + ih$, $i = \overline{1,n}$, $nh = a$ и будем использовать метод Эйлера

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = \overline{0, n-1}. \tag{2}$$

Величина $r_i = y(x_i) - y_i$ характеризует локальную погрешность метода в узле $x_i, i = \overline{0,n}$. Понятно, что $r_0 = 0$. Если $r_i = 0$, то $r_{i+1} = O(h^2)$ (локальная погрешность имеет порядок h^2).

Введем глобальную погрешность метода на сетке $R = \max_{1\le i\le n} |r_i|$ и найдем оценку R через h (выясним порядок точности метода Эйлера).

Рассмотрим погрешность метода (2) в узле x_{i+1}

$$r_{i+1} = y(x_i + h) - y_{i+1} = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i + \xi h) - y_i - hf(x_i, y_i) =$$

$$= r_i + h[f(x_i, y(x_i)) - f(x_i, y_i)] + \frac{h^2}{2} y''(x_i + \xi h), \;\; \xi \in [0,1].$$

Переходя к оценке по модулю с учетом условий 1), 2), получаем

$$|r_{i+1}| \le |r_i| + hL|r_i| + \frac{h^2}{2} M_2 = (1 + hL)|r_i| + \frac{1}{2} h^2 M_2, \quad i = \overline{0, n-1}.$$

Введем обозначения: $q = 1 + hL$, $\delta = \frac{1}{2}h^2 M_2$. Тогда

$$|r_{i+1}| \le q|r_i| + \delta, \;\; i = \overline{0, n-1}, \;\; r_0 = 0.$$

Отсюда

$$|r_{i+1}| \le q^2|r_{i-1}| + q\delta + \delta \le$$
$$\le q^3|r_{i-2}| + q^2\delta + q\delta + \delta \le \ldots \le$$
$$\le q^{i+1}|r_0| + q^i\delta + q^{i-1}\delta + \ldots + q\delta + \delta =$$
$$= (1 + q + \ldots + q^i)\delta \le (1 + q + \ldots + q^{n-1})\delta \le nq^n\delta \quad (q^i \le q^n, \;\; i = \overline{0, n-1}).$$

Следовательно, имеет место оценка

$$R = \max_{1 \le i \le n} |r_i| \le nq^n\delta.$$

Поскольку $n = \frac{a}{h}$, то в исходных обозначениях

$$R \le \frac{a}{h}(1 + hL)^n \frac{h^2}{2} M_2 = \frac{a}{2} M_2 (1 + hL)^n h.$$

Далее используем известное неравенство $1 + x \le e^x$, $x > 0$. В нашем случае

$$1 + hL \le e^{hL} \Rightarrow (1 + hL)^n \le e^{hLn} = e^{aL}.$$

В результате получаем итоговую оценку глобальной погрешности метода Эйлера

$$R \le Kh, \;\; K = \frac{1}{2} a M_2 e^{aL}.$$

Это значит, что *метод Эйлера имеет первый порядок точности.*

§4. Методы Адамса

Задача:

$$y' = f(x, y), \;\; y(x_0) = y_0. \tag{1}$$

Точное решение: $y(x), \;\; x \in [x_0, x_0 + a]$.

Сетка узлов интегрирования: $x_i = x_0 + ih, \; i = \overline{1, n}, \; hn = a$.

Приближенное решение: $y_i \approx y(x_i), \;\; i = \overline{1, n}$.

Обозначение: $f_i = f(x_i, y_i), \;\; i = \overline{1, n}$.