Шәкір Айдос

Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

e-mail: ajdossakir@gmail.com

7-лекция. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Цель лекции – изучение теоретических основ и освоение практических навыков применения численных методов для приближённого решения обыкновенных дифференциальных уравнений с анализом их точности, устойчивости и сходимости.

План лекции:

1 Постановка задачи

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 изменения. 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 $\sin x$, $\ln x$, $\ldots$ и специальных функций. В том и другом случаях можно вычислять значения этих функций при помощи таблиц, и те и другие функции можно вычислять, приближая их многочленами, рациональными дробями и т. д. Таким образом, в класс задач, интегрируемых в явном виде, включились 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.

2 Решение задачи Коши с помощью формулы Тейлора

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

$$y' = f(x, y), \tag{2.1}$$

при начальном условии

$$y(x_0) = y_0,$$

где $f(x, y)$ — функция, аналитическая в точке (x_0, y_0).

Дифференцируя (1) по x, имеем

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

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

Подставляя $x = x_0$, $y = y_0$ в (2.1) и в последние соотношения, последовательно получаем значения

$$y'(x_0),\ y''(x_0),\ y'''(x_0), \ldots$$

Таким образом, можно написать приближённое равенство

$$y(x) \approx \sum_{i=0}^{n} \frac{y^{(i)}(x_0)}{i!}(x - x_0)^i. \tag{2.2}$$

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

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

то погрешность (2.2) не стремится к нулю при $n \to \infty$, и предлагаемый метод неприменим. Иногда целесообразно поступить следующим образом. Разобьём отрезок $[x_0, x_0 + X]$ на отрезки $[x_{j-1}, x_j]$, $j = 1, \ldots, N$. Будем последовательно получать приближения y_j к значениям решения $y(x_j)$, $j = 1, \ldots, N$, по следующему правилу. Пусть значение y_j уже найдено. Вычислим значения в точке x_j производных $y^{(i)}$ решения исходного дифференциального уравнения, проходящего через точку (x_j, y_j). На отрезке $[x_j, x_{j+1}]$ полагаем

$$y(x) \approx z_j(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{y_j^{(i)}}{i!}(x - x_j)^i, \tag{2.3}$$

и соответственно берём

$$y_{j+1} = z_j(x_{j+1}). \tag{2.4}$$

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

$$\max_{0 \le j \le N} |y_j - y(x_j)| = O(h^n).$$

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

3 Методы Рунге–Кутта

В частном случае $n = 1$ формула (2.3) имеет вид

$$y_{j+1} = y_j + hf(x_j, y_j), \qquad h = x_{j+1} - x_j. \tag{3.1}$$

Этот метод называется методом Эйлера. Можно построить другой класс расчётных 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

$$y(x+h) = y(x) + \int_0^h y'(x+t)\,dt. \tag{3.2}$$

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 расчётную формулу Эйлера (3.1).

Для получения более точной расчётной формулы нужно точнее аппроксимировать интеграл в правой части (3.2). Воспользовавшись квадратурной формулой трапеций, получим

$$y(x+h) = y(x) + \frac{h}{2}\left(y'(x) + y'(x+h)\right) + O(h^3),$$

иначе,

$$y(x+h) = y(x) + \frac{h}{2}\left(f(x, y(x)) + f(x+h, y(x+h))\right) + O(h^3). \tag{3.3}$$

Соответствующая расчётная формула

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}\left(f(x_j, y_j) + f(x_{j+1}, y_{j+1})\right) + O(h^3) \tag{3.4}$$

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 произведём дальнейшее преобразование алгоритма.

Заменим $y(x+h)$ в правой части (3.3) на некоторую величину

$$y^* = y(x+h) + O(h^2). \tag{3.5}$$

Тогда правая часть изменится на величину

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

где $\bar{y}$ находится между y^* и $y(x+h)$. Вследствие предположения (3.5) эта величина имеет порядок $O(h^3)$. Таким образом, при условии (3.5) имеет место соотношение

$$y(x+h) = y(x) + \frac{h}{2}\left(f(x, y(x)) + f(x+h, y^*)\right) + O(h^3).$$

Условию (3.5) удовлетворяет результат вычислений по формуле Эйлера:

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

Последние соотношения определяют пару расчётных формул

$$y^*_{j+1} = y_j + hf(x_j, y_j), \tag{3.6}$$

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}\left(f(x_j, y_j) + f(x_{j+1}, y^*_{j+1})\right). \tag{3.7}$$

При малых h выражение в правой части (3.4) удовлетворяет условию сжимаемости, поэтому уравнение (3.4) также можно решать методом простой итерации:

$$y^{k+1}_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}\left(f(x_j, y_j) + f(x_{j+1}, y^k_{j+1})\right).$$

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

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

то y^1_{j+1}, получаемое на первом шаге итерации, совпадает с y_{j+1}, получаемым по формуле (3.7). Дальнейшие итерации не приводят к повышению порядка точности по h, в то же время иногда главный член погрешности уменьшается при переходе от y^1_{j+1} к y^2_{j+1}. 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 объёма 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 того же порядка. Интеграл в правой части (3.2) заменим по формуле прямоугольников:

$$y(x+h) = y(x) + hy'\left(x + \frac{h}{2}\right) + O(h^3),$$

или, что всё равно,

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

Если

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

то, как и в предыдущем случае, имеем

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

В качестве y^* можно взять результат вычислений по формуле Эйлера с шагом $\frac{h}{2}$:

$$y^* = y(x) + \frac{h}{2} f(x, y).$$

Этим соотношениям соответствует пара расчетных формул

$$\begin{aligned} y_{j+1/2} &= y_j + \frac{h}{2} f(x_j, y_j), \\ y_{j+1} &= y_j + hf\left(x_j + \frac{h}{2}, y_{j+1/2}\right). \end{aligned} \tag{3.8}$$

Полученные методы относятся к семейству методов Рунге–Кутта, имеющих следующий вид. В процессе вычислений фиксированы некоторые числа

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

последовательно получаем

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

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

$$\ldots$$

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

и полагаем

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

Рассмотрим вопрос о выборе параметров $\alpha_i, p_i, \beta_{ij}$. Обозначим

$$\varphi(h) = y(x+h) - z(h).$$

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

$$\varphi'(0)=\dots=\varphi^{(s)}(0)=0.$$

Кроме того, предположим, что существует некоторая гладкая функция $f_0(x,y)$, для которой соответствующее значение $\varphi^{(s+1)}(0)\neq 0$. Согласно формуле Тейлора выполняется равенство

$$\varphi(h)=\sum_{i=0}^{s}\frac{\varphi^{(i)}(0)}{i!}h^i+\frac{\varphi^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!}h^{s+1}=\frac{\varphi^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!}h^{s+1}. \qquad (3.9)$$

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

$$\varphi(h)=y(x+h)-y(x)-p_1hf(x,y), \qquad \varphi(0)=0,$$

$$\varphi'(0)=\left(y'(x+h)-p_1f(x,y)\right)\big|_{h=0}=f(x,y)(1-p_1),$$

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

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 (3.9), получаем выражение

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

Рассмотрим случай $q=2$. Имеем

$$\varphi(h)=y(x+h)-y(x)-p_1hf(x,y)-p_2hf(\bar{x},\bar{y}),$$

где

$$\bar{x}=x+\alpha_2h, \qquad \bar{y}=y+\beta_{21}hf(x,y).$$

Вычислим производные функции $\varphi(h)$:

$$\varphi'(h)=y'(x+h)-p_1f(x,y)-p_2f(\bar{x},\bar{y})-p_2h\left(\alpha_2f_x(\bar{x},\bar{y})+\beta_{21}f_y(\bar{x},\bar{y})f(x,y)\right),$$

$$\varphi''(h)=y''(x+h)-2p_2\left(\alpha_2f_x(\bar{x},\bar{y})+\beta_{21}f_y(\bar{x},\bar{y})f(x,y)\right)$$

$$-p_2h\left(\alpha_2^2f_{xx}(\bar{x},\bar{y})+2\alpha_2\beta_{21}f_{xy}(\bar{x},\bar{y})f(x,y)+\beta_{21}^2f_{yy}(\bar{x},\bar{y})(f(x,y))^2\right),$$

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

Согласно исходному дифференциальному уравнению

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

Подставив в выражения $\varphi(h)$, $\varphi'(h)$, $\varphi''(h)$, $\varphi'''(h)$ значение $h = 0$ и воспользовавшись этими соотношениями, получим

$$\begin{aligned}
\varphi(0) &= y - y = 0,\\
\varphi'(0) &= (1 - p_1 - p_2) f(x, y),\\
\varphi''(0) &= (1 - 2p_2\alpha_2) f_x(x, y) + (1 - 2p_2\beta_{21}) f_y(x, y) f(x, y),\\
\varphi'''(0) &= (1 - 3p_2\alpha_2^2) f_{xx}(x, y) + (2 - 6p_2\beta_{21}) f_{xy}(x, y) f(x, y)\\
&\quad + (1 - 3p_2\beta_{21}^2) f_{yy}(x, y)(f(x, y))^2 + f_y(x, y) y''(x).
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Соотношение $\varphi(0) = 0$ выполняется при всех $f(x, y)$, если

$$1 - p_1 - p_2 = 0; \tag{3.11}$$

соотношение $\varphi''(0) = 0$ выполняется, если

$$1 - 2p_2\alpha_2 = 0 \qquad \text{и} \qquad 1 - 2p_2\beta_{21} = 0. \tag{3.12}$$

Таким образом, $\varphi(0) = \varphi'(0) = \varphi''(0) = 0$ при всех $f(x, y)$, если выполнены три указанных выше соотношения (3.11), (3.12), относительно четырёх параметров. Задавая произвольно один из параметров, получим различные методы Рунге–Кутта с погрешностью второго порядка малости по h. Например, при $p_1 = \frac{1}{2}$ получаем $p_2 = \frac{1}{2}$, $\alpha_2 = 1$, $\beta_{21} = 1$, что соответствует паре расчётных формул (3.7). При $p_1 = 0$ получаем $p_2 = 1$, $\alpha_2 = \frac{1}{2}$, $\beta_{21} = \frac{1}{2}$, что соответствует паре расчётных формул (3.8).

В случае уравнения $y' = y$, согласно (3.10), имеем $\varphi'''(0) = y$ независимо от значений $p_1, p_2, \alpha_2, \beta_{21}$. Отсюда следует, что нельзя построить формулы Рунге–Кутта со значениями $q = 2$ и $s = 3$.

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

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

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

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

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

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

4 Пример метода Рунге–Кутты 4-го порядка

Рассмотрим задачу Коши:

$$y' = f(x, y), \qquad y(x_0) = y_0.$$

Возьмём конкретное уравнение:

$$y' = x + y, \qquad y(0) = 1.$$

Пусть шаг $h > 0$. Формула метода Рунге–Кутты 4-го порядка имеет вид:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right),$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n), \\ k_2 &= f\left(x_n + \frac{h}{2},\, y_n + \frac{h}{2}k_1\right), \\ k_3 &= f\left(x_n + \frac{h}{2},\, y_n + \frac{h}{2}k_2\right), \\ k_4 &= f(x_n + h,\, y_n + hk_3). \end{aligned}$$

Подставляя $f(x, y) = x + y$, при $x_0 = 0$, $y_0 = 1$, $h = 0.1$, получаем:

$$k_1 = f(0, 1) = 1,$$

$$k_2 = f(0.05, 1.05) = 1.10,$$

$$k_3 = f(0.05, 1.055) = 1.105,$$

$$k_4 = f(0.1, 1.1105) = 1.2105.$$

Тогда

$$y_1 = 1 + \frac{0.1}{6}\left(1 + 2 \cdot 1.10 + 2 \cdot 1.105 + 1.2105\right) \approx 1.125.$$

Таким образом,

$$y(0.1) \approx 1.125.$$

5 Контрольные вопросы

1. Что называется задачей Коши для обыкновенного дифференциального уравнения?
2. В чём заключается идея метода Тейлора для численного решения ОДУ?
3. Как выводится разложение решения задачи Коши в ряд Тейлора?
4. Какие производные необходимо вычислять для построения метода Тейлора заданного порядка?
5. Как оценивается погрешность метода Тейлора?
6. В чём заключается идея методов Рунге–Кутта?
7. Как выводится метод Рунге–Кутта четвёртого порядка?
8. Что представляют собой коэффициенты k_1, k_2, k_3, k_4?
9. Чем методы Рунге–Кутта отличаются от метода Тейлора?
10. Как определяется порядок точности метода Рунге–Кутта?

6 Список литературы

Для получения дополнительных и более полных сведений студентам рекомендуется обратиться к литературе [1–11].

ЛИТЕРАТУРА

[1] Ш. Е. Микеладзе, *Численные методы математического анализа*, Гостехиздат, Москва, 1953.

[2] А. А. Самарский, А. В. Гулин, *Численные методы*, Наука, Москва, 1989.

[3] Н. Н. Калиткин, *Численные методы*, Наука, Москва, 1978.

[4] G. E. Forsythe, M. A. Malcolm, C. B. Moler, *Computer Methods for Mathematical Computations*, Prentice–Hall, Englewood Cliffs, 1977.

[5] A. Iserles, *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2009.

[6] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, *Numerical Mathematics*, Springer, Berlin, 2007.

[7] J. C. Butcher, *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*, 2nd ed., Wiley, Chichester, 2008.

[8] E. Hairer, S. P. Nørsett, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*, 2nd ed., Springer, Berlin, 1993.

[9] E. Hairer, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential–Algebraic Problems*, Springer, Berlin, 1996.

[10] J. W. Thomas, *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*, Springer, New York, 1995.

[11] L. N. Trefethen, *Approximation Theory and Approximation Practice*, SIAM, Philadelphia, 2013.