

Задача Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (введение в численные методы)

Кулинич В.В., Смирнов И.П.
Нижний Новгород

Аннотация

Методическая разработка для студентов 2-го курса дневного отделения радиофизического факультета ННГУ. Излагаются основные методы построения разностных схем для задачи Коши, вопросы их сходимости и устойчивости. Приводится полный текст программы на алгоритмическом языке Фортран решения задачи Коши методом Рунге-Кутты. Формулируются задания для самостоятельной работы по вычислительному практикуму. Библиография 6 назв.

Оглавление

1 Основные методы построения разностных схем для задачи Коши	1
1.1 Введение	1
1.2 Метод разложения в ряд Тейлора	2
1.3 Методы Рунге-Кутты	3
1.4 Многошаговые методы	5
1.5 Системы уравнений первого порядка в нормальной форме и уравнения высокого порядка	7
2 Устойчивость разностных схем	8
2.1 Погрешность аппроксимации и сходимость приближенного решения	12
3 Практическая часть	13
3.1 Вопросы для самопроверки	13
3.2 Варианты заданий лабораторной работы	14
3.3 Требования к программам	14
А Подпрограмма RKF45	15

Список рисунков

Список таблиц

1	14
2 Table Caption	15

1 Основные методы построения разностных схем для задачи Коши

1.1 Введение

Широкие классы задач физики, химии, биологии, экономики и др. сводятся к решению начально-краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Считается, что приведение задачи к форме, например, задачи Коши является гарантией её решения, хотя бы приближенного. Теория численного решения таких задач является одной из развитых областей вычислительной математики.

Нашей целью является обзор основных численных методов решения задачи Коши

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), & x \in (a, b) \\ y(a) = y^0, \end{cases} \quad (1)$$

где $y(x) \equiv (y_1(x), y_2(x), \dots, y_s(x))$, y^0 - заданный начальный вектор.

При численном решении задачи (1) ищется последовательность векторов $\{y_n\}_{n=0}^N$, являющихся приближениями для значений решения $\{y(x_n)\}_{n=0}^N$ на множестве точек сетки $\omega_N \equiv \{x_i : x_{i+1} = x_i + h_i, i = \overline{0, N-1}, x_0 = a, x_N = b\}$, где $h_i > 0$ - шаг сетки. В практике используются разнообразные сетки. Мы ограничимся рассмотрением методов с равномерными сетками, т.е. сетками с постоянным шагом $h_i \equiv h$. Основное предположение относительно задачи (1), которое мы примем, состоит в непрерывности правой части дифференциального уравнения (вектор-функции $f(x, y)$) по совокупности переменных в $(a, b) \times R^s$ и глобального (равномерного относительно x) условия Липшица по y :

$$\|f(x, y^1) - f(x, y^2)\| \leq L \|y^1 - y^2\|,$$

где L - постоянная Липшица. В этих условиях решение задачи Коши (1) существует и единственно при любом начальном векторе y^0 (см. [1]). Заметим, что реализация конкретного численного метода и, в особенности, его обоснование требуют обычно более сильных ограничений на параметры задачи. Не оговаривая дополнительно, мы предполагаем всякий раз выполнение этих условий, ограничиваясь в основном изложением формальной схемы метода. Мы также “по умолчанию” ограничиваемся рассмотрением скалярного случая.

1.2 Метод разложения в ряд Тейлора

Простейшим способом построения приближенного решения в точке x_{n+1} сетки ω_N является способ, основанный на разложении решения в ряд Тейлора в предыдущей точке сетки x_n по степеням шага h :

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\Delta(x_n, y_n, h), \quad (2)$$

$$\Delta(x, y, h) \equiv y'(x) + \frac{h}{2}y''(x) + \frac{h^2}{3!}y'''(x) + \dots$$

Взяв вместо этого ряда конечный его отрезок

$$\varphi_p(x, y, h) \equiv y'(x) + \frac{h}{2}y''(x) + \dots + \frac{h^{p-1}}{p!}y^{(p)}(x)$$

и заменяя в нем производные $y^{(k)}(x)$ в силу дифференциального уравнения (1)

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)), \\ y''(x) &= \frac{d}{dx} f(x, y(x)) = f'_x + f'_y f, \\ y'''(x) &= \frac{d}{dx} (f'_x + f'_y f) = f''_{xx} + f'_x f'_y + \\ &+ \left((f'_y)^2 + 2f''_{xy} \right) f + f''_{yy} f^2, \dots, \end{aligned}$$

получаем последовательность приближений

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi_p(x_n, y_n, h), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

Отсюда, в частности, при $p = 1$ получаем схему

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_0 = y^0, \quad n = 0, N-1, \quad x_n \in \omega_N, \end{cases} \quad (4)$$

(метод Эйлера), а при $p = 2$ - схему

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h[f(x_n, y_n) + \frac{h}{2}(f_x(x_n, y_n) + f_y(x_n, y_n)f(x_n, y_n))] \\ y_0 = y^0, \quad n = 0, N-1, \quad x_n \in \omega_N. \end{cases} \quad (5)$$

Алгоритмы типа (3) не требуют вычисления дополнительных начальных условий и позволят легко менять шаг интегрирования. Применимость данных методов ограничена теми задачами, для которых легко вычисляются частные производные высоких порядков функции $f(x, y)$.

1.3 Методы Рунге-Кутты

Идея этих методов заключается в построении функций φ , которые не используют явно производных функции $f(x, y)$ и в то же время "наилучшим образом" приближают соответствующие отрезки φ_p ряда Тейлора Δ .

Продемонстрируем процесс "подгонки" рядов Тейлора следующим образом. Положим

$$\varphi(x, y, h) \equiv c_1 f(x, y) + c_2 f(x + ha_2, y + b_{21}hf(x, y)), \quad (6)$$

где c_1, c_2, a_2, b_{21} - постоянные, подлежащие определению. Разлагая φ по степеням h до членов порядка h^2 , получим

$$\varphi(x, y, h) = (c_1 + c_2)f(x, y) + hc_2[a_2 f_x(x, y) + b_{21}f_y(x, y)f(x, y)] + O(h^2). \quad (7)$$

С другой стороны,

$$\Delta(x, y, h) = f(x, y) + \frac{1}{2}h[f_x(x, y) + f_y(x, y)f(x, y)] + O(h^2). \quad (8)$$

Отсюда видно, что взяв

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2 a_2 = \frac{1}{2} \\ c_2 b_{21} = \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (9)$$

получаем в (6) функцию, для которой

$$\varphi(x, y, h) - \Delta(x, y, h) = O(h^2).$$

Алгебраическая система (9) имеет множество решений вида

$$c_1 = 1 - \alpha, \quad c_2 = \alpha, \quad a_2 = b_{21} = \frac{1}{2\alpha},$$

где α - свободный параметр.

При $\alpha = \frac{1}{2}$, в частности, получаем двукратный¹ метод Рунге-Кутты-метод Хойна:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n))], \\ y_0 = y^0, n = 0, N-1, x_n \in \omega_N, \end{cases} \quad (10)$$

требующий всего два вычисления функции $f(x, y)$ на каждом шаге.

Процесс "подгонки" рядов Тейлора можно продолжить, строя функции $\varphi(x, y, h)$, использующие все большие отрезки ряда Тейлора. Подобным образом получают m -кратные явные методы Рунге-Кутты:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h) \\ y_0 = y^0, n = 0, N-1, x_n \in \omega_N, \end{cases} \quad (11)$$

$$\varphi(x, y, h) \equiv \sum_{r=1}^m c_r k_r,$$

$$k_1 \equiv f(x, y), k_r \equiv f(x + ha_r, y + h \sum_{s=1}^{r-1} b_{rs} k_s), r = \overline{2, m},$$

требующие m вычислений функции $f(x, y)$ на каждом шаге.

Наиболее известным из них является четырёхкратный метод:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ y_0 = y^0, n = 0, N-1, x_n \in \omega_N, \end{cases}$$

$$\begin{aligned} k_1 &\equiv f(x_n, y_n), \\ k_2 &\equiv f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1), \\ k_3 &\equiv f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2), \\ k_4 &\equiv f(x_n + h, y_n + hk_3). \end{aligned}$$

Алгоритмы Рунге-Кутты отлично приспособлены для практических вычислений: они не требуют вычисления дополнительных начальных данных и легко позволяют менять шаг h .

Усложняя формулы (??), можно получить и более широкий класс методов, т.н. m -кратные неявные методы Рунге-Кутты:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h) \\ y_0 = y^0, n = 0, N-1, x_n \in \omega_N, \end{cases} \quad (12)$$

$$\varphi(x, y, h) \equiv \sum_{r=1}^m c_r k_r,$$

$$k_1 \equiv f(x, y), k_r \equiv f(x + ha_r, y + h \sum_{s=1}^m b_{rs} k_s), r = \overline{2, m}.$$

Формулы (12) являются, вообще говоря, более точными, чем (??). Однако более высокая точность достигается ценой значительного усложнения вычислительного алгоритма, что сильно ограничивает сферу применимости таких методов. Можно, впрочем, понизить степень неявности, положив $b_{rs} = 0$ при $s > r$. В качестве примера приведем полужавный трёхкратный метод Батчера

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3), \\ y_0 = y^0, n = 0, N-1, x_n \in \omega_N, \end{cases} \quad (13)$$

¹Под кратностью метода в данном случае понимается количество вычислений функции $f(x, y)$.

$$\begin{aligned} k_1 &\equiv f(x_n, y_n), \\ k_2 &\equiv f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{4}(k_1 + k_2)), \\ k_3 &\equiv f(x_n + h, y_n + hk_2). \end{aligned}$$

Одной из проблем, связанных с реализацией методов Рунге-Кутты, является выбор шага для достижения заданной точности. Решается она либо применением *правила Рунге*², что значительно увеличивает объем вычислений, либо путем использования специальных формул для вычисления погрешности, содержащих только величины $\{k_r\}$, (*метод Мерсона*). Например, для явного пятикратного метода

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + 4k_4 + k_5) \\ y_0 = y^0, \quad n = 0, N-1, \quad x_n \in \omega_N, \end{cases}$$

$$\begin{aligned} k_1 &\equiv \frac{1}{5}f(x_n, y_n), \\ k_2 &\equiv \frac{1}{3}f(x_n + \frac{h}{3}, y_n + hk_1), \\ k_3 &\equiv \frac{1}{3}f(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{h}{2}k_1 + \frac{h}{2}k_2), \\ k_4 &\equiv \frac{1}{3}f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{2}{8}hk_1 + \frac{9}{8}hk_3), \\ k_5 &\equiv \frac{1}{3}f(x_n + h, y_n + \frac{2}{2}hk_1 - \frac{9}{2}hk_3 + 6hk_4), \end{aligned}$$

погрешность метода Мерсона вычисляется по формуле

$$\varepsilon = \frac{h}{5}(k_1 - \frac{9}{2}k_3 + 4k_4 - \frac{1}{2}k_5). \quad (14)$$

Критерий выбора шага интегрирования состоит в следующем: если правая часть (14) превышает предписанную погрешность более чем в 5 раз, то шаг h уменьшается в 2 раза и вычисления повторяются до достижения предписанной погрешности, а если правая часть (14) меньше, чем $\frac{5}{32}$ предписанной погрешности, то шаг может быть удвоен и вычисления продолжаются с удвоенным шагом.

1.4 Многошаговые методы

В изложенных выше методах, после нахождения приближенного решения y_{n+1} на $n+1$ -ом шаге, приближенное решение y_n уже не используется в дальнейших расчетах. Идея многошаговых методов состоит в том, чтобы явно использовать ранее вычисленные значения y_n, y_{n-1}, \dots . Реализовать ее можно, например, следующим способом. Задачу Коши (1) приводят к эквивалентному интегральному уравнению

$$\begin{aligned} y(x + \zeta) - y(x) &= \int_x^{x+\zeta} f(t, y(t)) dt, \\ y(a) &= y^0, \end{aligned} \quad (15)$$

где $x, x + \zeta$ - произвольные точки интервала $[a, b]$.

Функции $F(x) \equiv f(x, y(x))$ заменяют интерполяционным многочленом, принимая значения $F_n = f(x_n, y_n)$ на множестве точек сетки x_n , в которых должны быть вычислены приближенные значения y_n . Пусть $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-k}$ - узлы интерполяции, тогда интерполяционный многочлен можно записать, например, в форме Лагранжа,

$$L_n^k(x) = \sum_{i=0}^k p_{ki}(x) F_{n-i}. \quad (16)$$

²Сравниваются решения, полученные с шагами h и $h/2$. В случае их совпадения с указанной погрешностью решение считается удовлетворительным.

Здесь $p_{ki}(x)$ многочлены Лагранжа.

Подставляя (16) в уравнение (15) для $x = x_n, \zeta = h$ и выполняя интегрирование, получаем *схему Адамса-Бешфорта*

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^k \beta_{ki} F_{n-i} \\ y_0 = y^0, \quad n = 0, \overline{N-1}, \quad x_n \in \omega_N, \end{cases} \quad (17)$$

$$\beta_{ki} \equiv \frac{1}{h} \int_{x_n}^{x_n+h} p_{ki}(t) dt.$$

При $x = x_{n-1}, \zeta = h$ получим *схему Адамса-Мултона*

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + h \sum_{i=0}^k \beta_{ki} F_{n-i} \\ y_0 = y^0, \quad n = 0, \overline{N-1}, \quad x_n \in \omega_N, \end{cases} \quad (18)$$

$$\beta_{ki} \equiv \frac{1}{h} \int_{x_n-h}^{x_n} p_{ki}(t) dt.$$

Общая форма записи таких методов:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j F_{n+j}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (19)$$

где α_j, β_j - постоянные, $\alpha_n \neq 0, |\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0$. Уравнение (19) - линейное соотношение между y_{n+j} и F_{n+j} . Поэтому соответствующий формуле (19) метод называют *линейным многошаговым методом* (LLM - linear multistep method). Для применения схемы (19) требуется заранее знать k начальных значений y_0, y_1, \dots, y_{k-1} . Эти значения получают каким-либо одношаговым методом. Далее процесс может следовать по одному из двух возможных путей. Если $\beta_k = 0$, то y_{n+k} легко вычислится из формул (19), и метод называют *явным многошаговым*. В противном случае правая часть $F_{n+k} \equiv f(x_{n+k}, y_{n+k})$ содержит искому величину y_{n+k} , и для ее определения приходится решать (нелинейное в общем случае) уравнение. Метод при этом называют *неявным многошаговым*. Формулы Адамса (17), (18) являются примерами соответственно явных и неявных методов. Явные многошаговые методы на первый взгляд кажутся самыми простыми для проведения вычислений. Но на практике такие методы используются редко, т.к. они обладают меньшей устойчивостью к малым возмущениям значений y_n (ошибки округления). Оказывается также, что в явных методах шаг h должен быть значительно меньше для достижения заданной точности, чем в неявных, и в случае т.н. "жестких" дифференциальных уравнений явные методы нередко приводят к неверным результатам.

Отметим, что неявные методы предпочтительнее явных, покажем как они реализуются на практике. Из (19) имеем

$$y_{n+k} = h \frac{\beta_k}{\alpha_k} f(x_{n+k}, y_{n+k}) + g_n, \quad \beta_k \neq 0, \quad (20)$$

где g_n содержит уже известные величины $y_{n+j}, F_{n+j}, j = \overline{0, k-1}$. Оказывается, что если

$$hL < \left| \frac{\alpha_k}{\beta_k} \right|, \quad (21)$$

где L - постоянная Липшица, определенная в п.1.1, то единственное решение нелинейного уравнения (20) можно получить с помощью итерационного процесса

$$y_{n+k}^{\nu+1} = h \frac{\beta_k}{\alpha_k} f(x_{n+k}, y_{n+k}^{\nu}) + g_n, \quad \nu = 0, 1, \dots \quad (22)$$

Скорость сходимости итерационной последовательности тем выше, чем меньше величина $h|\beta_k/\alpha_k|L$. Величина y_{n+k}^0 выбирается произвольно. Желательно, конечно, выбирать y_{n+k}^0 вблизи искомой величины. Надлежащий выбор достигается с помощью явного метода. Явный метод в этом случае называют "предсказывающим", а неявный метод (20) - "исправляющим". В литературе весь процесс принято называть методом "предиктора-корректора". Существует два способа реализации методов предиктора-корректора. В первом случае итерации (22) проводят до тех пор, пока они не будут совпадать с заданной точностью. Во втором случае корректирующие итерации применяются фиксированное, например t , число раз. Полученное таким образом значение y_{n+k}^t принимается за приближение к точному значению $y(x_{n+k})$.

В качестве примера рассмотрим методы Адамса при $k = 1$. Здесь формулы для явного метода имеет вид

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f(x_n, y_n) - f(x_{n-1}, y_{n-1})),$$

а формулы для неявного метода

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})).$$

Для $t = 1$ формулы метода предиктора-корректора можно записать в виде

$$\begin{cases} y_{n+1}^0 = y_n + \frac{h}{2}(3f(x_n, y_n) - f(x_{n-1}, y_{n-1})), \\ y_{n+1}^1 = y_n + \frac{h}{2}(3f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^0)). \end{cases}$$

Главной трудностью при использовании многошаговых методов является изменение шага интегрирования. Преимущество перед одношаговыми - меньшее число вычислений правой части дифференциального уравнения для достижения одинаковой точности.

1.5 Системы уравнений первого порядка в нормальной форме и уравнения высокого порядка

Коротко продемонстрируем, как изложенные выше методы можно применять к системам первого порядка и уравнениям высших порядков. Для системы из s уравнений первого порядка

$$\begin{cases} y' = f(x, y), & x \in (a, b) \\ y(a) = y^0, \end{cases} \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} y(x) &\equiv [y^1(x), y^2(x), \dots, y^s(x)], \\ f(x, y) &\equiv [f^1(x, y), f^2(x, y), \dots, f^s(x, y)], \end{aligned}$$

метод разложения в ряд Тейлора можно применить покомпонентно. А именно, разложим каждую из функций $y^i(x)$, $i = \overline{1, s}$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_n

$$y^i(x_n + h) = y^i(x_n) + h \frac{dy^i}{dx}(x_n) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 y^i}{dx^2}(x_n) + \dots$$

Обрывая этот ряд, получаем соответствующие обобщения методов п.1.2. Например, отбрасывая члены порядка h^3 и выше, получаем в покомпонентной форме

$$y_{n+1}^i = y_n^i + h \left(f^i(x_n, y_n^1, y_n^2, \dots, y_n^s) + \frac{h}{2} \left(\frac{\partial f^i}{\partial x} + \sum_{j=1}^s \frac{\partial f^i}{\partial y^j} f^j(x_n, y_n^1, y_n^2, \dots, y_n^s) \right) \right), \quad (24)$$

$$i = \overline{1, s}.$$

В векторной записи этот метод тождественен по форме методу (5) для скалярного уравнения:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(f(x_n, y_n) + \frac{h}{2} f'(x_n, y_n) \right), \quad (25)$$

где теперь

$$f'(x, y) \equiv \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) + J(x, y) f(x, y),$$

$J(x, y) \equiv (\partial f^i / \partial y^j)$ - матрица Якоби функции f .

Методы Рунге-Кутты, рассмотренные выше, также можно применять к системам, заменив скаляры $y, f, \varphi, k_j, j = \overline{1, m}$, соответствующими s -мерными векторами.

Идея построения многошаговых методов состоит в приближенном вычислении интегралов в системе интегральных уравнений

$$y^i(x + \zeta) = y^i(x) + \int_x^{x+\zeta} f^i(t, y^1(t), y^2(t), \dots, y^s(t)) dt,$$

$$y(a) = y^0, \quad i = \overline{1, s},$$

эквивалентных задаче Коши (23). Для получения разностных схем вида (15)-(19), достаточно повторить рассуждения предыдущего раздела, считая $y_{n+j}, F_{n+j}, j = \overline{0, k}$ s -мерными векторами.

Задачу Коши для уравнения p -го порядка, разрешенного относительно старшей производной

$$\begin{cases} y^{(p)}(x) = f(x, y'(x), y''(x), \dots, y^{(p-1)}), & x \in [a, b], \\ y(a) = \beta_1, y'(a) = \beta_2, \dots, y^{(p-1)}(a) = \beta_p, \end{cases} \quad (26)$$

сводят введением новых функций

$$y^i(x) \equiv y^{(i-1)}(x), \quad i = \overline{1, p},$$

к эквивалентной задаче Коши для системы первого порядка

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} y^i(x) = y^{i+1}(x), & i = \overline{1, p-1} \\ \frac{d}{dx} y^p(x) = f(x, y^1(x), y^2(x), \dots, y^p(x)) \\ y^1(a) = \beta_1, y^2(a) = \beta_2, \dots, y^p(a) = \beta_p. \end{cases}$$

Для численного решения этой системы можно применять методы, изложенные в настоящем пункте выше.

Методы Рунге-Кутты и многошаговые методы также допускают обобщения на случай задачи (26) (см. [4], [5]).

2 Устойчивость разностных схем

Рассмотренные выше алгоритмы численного решения задачи Коши, являются алгоритмами рекуррентного типа, и поэтому допускаемые в процессе вычислений ошибки различного рода могут накапливаться. Не следует также

забывать, что входные данные исходной задачи (правые части и начальные условия) обычно задаются лишь с определенной точностью. Естественно требовать от алгоритма, с помощью которого мы решаем задачу Коши, чтобы ошибки, допущенные во входных данных и ошибки, связанные с округлением в процессе вычислений, не приводили к значительным искажениям решения. Алгоритмы, которые в процессе вычислений усиливают погрешности называются *неустойчивыми* и, как правило, не используются на практике.

Прежде, чем переходить к изложению вопроса устойчивости вычислительных алгоритмов решения задачи Коши (23), коротко остановимся на вопросе устойчивости решения самой задачи Коши по начальным данным и правым частям.

Пусть $u(x), v(x)$ - решения задачи Коши (23) с начальными данными $u(0) = u_0, v(0) = v_0$. Их разность $z(x)$ удовлетворяет системе линейных уравнений

$$\frac{dz}{dx} = \Lambda(x)z,$$

где $\Lambda(x)$ - матрица Якоби вектор-функции $f(x, y)$, вычисленная в некоторых средних точках $\bar{u}_k(x)$, $k = \overline{1, s}$:

$$\begin{aligned} f^k(x, u(x)) - f^k(x, v(x)) &\equiv \sum_{i=1}^s \frac{\partial f^k}{\partial x_i}(x, \bar{u}_k(x)) (u^i(x) - v^i(x)) \equiv \\ &\equiv \sum_{i=1}^s \Lambda_{ki}(x) (u^i(x) - v^i(x)). \end{aligned}$$

Поэтому задачу

$$\frac{dz}{dx} - \Lambda(x)z = 0, \quad z(0) = z_0, \quad (27)$$

можно рассматривать как модельную при исследовании свойств устойчивости по начальным данным решения задачи (23).

Вопросам устойчивости решений линейных систем посвящена обширная литература (см., например, [1]). В частности, в случае постоянной матрицы Λ для асимптотической устойчивости решения задачи (27) по возмущению начальных данных достаточно, чтобы матрица была самосопряженной, отрицательно определенной³. При этом для решения задачи выполняется оценка

$$\|z(x)\| \leq e^{\lambda_1 x} \|z(0)\|, \quad x > 0,$$

где $\lambda_1 < 0$ - наименьшее по модулю собственное число матрицы Λ .

Аналогичные подходы используются и при изучении свойств устойчивости вычислительных алгоритмов решения задачи Коши. Прежде чем давать более или менее строгие определения устойчивости вычислительных алгоритмов решения задачи Коши рассмотрим несколько примеров [3] для модельного уравнения

$$\begin{cases} u' + \alpha u = 0, x > 0 \\ u(0) = u_0. \end{cases} \quad (28)$$

Точным решением уравнения (28) является функция $u(x) = u_0 e^{-\alpha x}$. Это решение при $\alpha > 0$ убывает с ростом x : $|u(x)| \leq |u_0| e^{-\alpha x} \rightarrow 0$ и непрерывно зависит от начального значения u_0 . Естественно ожидать выполнения этих условий и для приближенного решения задачи.

Пример 1. Устойчивая схема.

Задачу (28) на равномерной сетке $\omega_h = \{x_i = ih, i = 0, 1, \dots\}$ аппроксимируем неявной схемой Эйлера

$$y_i = y_{i-1} - h\alpha y_i, \quad y_0 = u_0, \quad i = 1, 2, \dots$$

³Т.е. симметричной и удовлетворяющей условию $(\Lambda y, y) < 0 \forall y \neq 0$. Заметим, что любая отрицательно определенная матрица обратима.

Перепишывая это уравнение в виде

$$y_i = \frac{1}{1 + \alpha h} y_{i-1}, \quad y_0 = u_0, \quad i = 1, 2, \dots$$

получаем

$$y_i = \left(\frac{1}{1 + \alpha h} \right)^i y_0, \quad i = 1, 2, \dots$$

Рассмотрим фиксированную точку \bar{x} сетки ω_h и выберем такую последовательность шагов h , чтобы точка \bar{x} все время оставалась узловой точкой, т.е. $\bar{x} = i_0 h$. Тогда при измельчении сетки ($h \rightarrow 0$) номер i_0 , соответствующий выбранной точке \bar{x} , неограниченно возрастает. Значение приближенного решения в этой точке

$$y_{i_0} = \left(\frac{1}{1 + \alpha h} \right)^{i_0} y_0.$$

Так как $1/|1 + \alpha h| < 1$, то

$$|y_{i_0}| \leq \left| \frac{1}{1 + \alpha h} \right|^{i_0} |y_0| < |y(0)|.$$

Из последнего неравенства следует, что решение разностной задачи непрерывно зависит от начальных данных и следовательно ошибки, допущенные в начальных данных и ошибки округления, которые появляются при вычислениях, не нарастают. В таких случаях говорят, что алгоритм вычислений *устойчив*.

Пример 2. Неустойчивая схема.

Для решения задачи (28) на равномерной сетке ω_h рассмотрим схему

$$\begin{cases} \sigma \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + (1 - \sigma) \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + \alpha y_i = 0 \\ y_0 = u_0, \quad y_1 = \bar{u}_0, \quad i = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (29)$$

где $\sigma > 1$ - числовой параметр. Решение задачи (29) имеет вид

$$y_i = A s_1^i + B s_2^i, \quad (30)$$

где

$$s_{1,2} \equiv \frac{2\sigma - 1 + \alpha h \pm \sqrt{1 + 2(\sigma - 1)\alpha h + \alpha^2 h^2}}{2(\sigma - 1)},$$

$$A \equiv \frac{\bar{u}_0 - s_2 u_0}{s_1 - s_2}, \quad B \equiv \frac{s_1 u_0 - \bar{u}_0}{s_1 - s_2}.$$

Так как $\sigma > \sigma - 1 > 0$, то $s_1 s_2 > 1$. Кроме того, $s_2 < 1$, $s_1 > 1$ при любых значениях αh . Из (30) видно, что $y_i \rightarrow \infty$ при $i \rightarrow \infty$, если $A \neq 0$.

Таким образом, при фиксированном h схема (29) приводит к нарастанию решения с ростом $x_i = ih$. Сгущение сетки (т.е. уменьшение h) приводит к нарастанию решения в фиксированной точке $\bar{x} = i_0 h$, так как $i_0 = \bar{x}/h$ растет с уменьшением h . Малое изменение начальных данных u_0, \bar{u}_0 приводит при $h \rightarrow 0$ к неограниченному возрастанию ошибки в любой заданной точке.

Сравнительно просто дать определение устойчивости и привести критерии устойчивости для двухслойных разностных схем для модельной задачи

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} + A(x)u = \varphi(x), \quad x > 0 \\ u(0) = u_0. \end{cases} \quad (31)$$

Здесь $A(x)$ - квадратная матрица порядка $s \times s$ с элементами, зависящими от x , $u(x), \varphi(x)$ - вектор-функции размерности s .

Под *двухслойной схемой* понимают разностное уравнение, связывающее значение вектора $y(x)$ для двух слоев значений аргументов $x = x_n$ и $x = x_{n+1}$. В канонической форме это соотношение задат в виде:

$$\begin{cases} B \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + Ay_n = \varphi_n \\ n = 0, 1, 2, \dots, y_0 = u_0, \end{cases} \quad (32)$$

где B, A - квадратные матрицы порядка $s \times s$, y_n, φ_n - векторы размерности s . Если $B = E$ - единичной матрице, то каноническую схему (32) называют *явной*, в противном случае - *неявной*.

Конкретные часто используемые схемы:

- *чисто неявная схема* ($B = E + hA$)

$$\begin{cases} \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + Ay_{n+1} = \varphi_n \\ n = 0, 1, 2, \dots, y_0 = u_0; \end{cases} \quad (33)$$

- *симметричная схема* ($B = E + \frac{1}{2}hA$)

$$\begin{cases} \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + \frac{1}{2}A(y_n + y_{n+1}) = \varphi_n \\ n = 0, 1, 2, \dots, y_0 = u_0; \end{cases} \quad (34)$$

- *схема с весами* ($B = E + \sigma hA$)

$$\begin{cases} \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + A((1 - \sigma)y_n + \sigma y_{n+1}) = \varphi_n \\ n = 0, 1, 2, \dots, y_0 = u_0. \end{cases} \quad (35)$$

Пусть $\|\cdot\|_{(1)}, \|\cdot\|_{(2)}$ - некоторые нормы в R_s .

Определение. Каноническую схему (32) назовем *устойчивой по начальным данным и правой части*, если существуют положительные постоянные M_1, M_2 , не зависящие от h, n, y_0, φ_n , такие, что для решения y_n задачи (32) имеет место оценка

$$\|y_n\|_{(1)} \leq M_1 \|y_0\|_{(1)} + M_2 \max_{0 \leq k \leq n-1} \|\varphi_k\|_{(2)}. \quad (36)$$

Удобным средством исследования устойчивости канонической схемы оказывается следующее понятие равномерной устойчивости.

Определение. Каноническую схему (32) назовем *равномерно устойчивой по начальным данным*, если существует положительная постоянная ρ , не зависящая от h, n, y_0 , такая, что для решения однородной задачи (32)

$$\begin{cases} B \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + Ay_n = 0 \\ n = 0, 1, 2, \dots, y_0 = u_0, \end{cases} \quad (37)$$

имеет место оценка

$$\|y_{n+1}\|_{(1)} \leq \rho \|y_n\|_{(1)}, \quad n = 0, 1, \dots$$

Перепишав уравнение (37) в операторной форме

$$y_{n+1} = Sy_n,$$

где $S \equiv E - hB^{-1}A$ - *оператор перехода*, нетрудно показать, что введенное выше условие равномерной устойчивости эквивалентно ограниченности нормы оператора перехода:

$$\|S\| \leq \rho. \quad (38)$$

С другой стороны, можно показать, что из равномерной устойчивости схемы по начальным условиям вытекает ее устойчивость по начальным данным и правой части с постоянными M_1, M_2 , вычисляемыми через постоянную ρ , и нормой $\|\varphi\|_{(2)} \equiv \|B^{-1}\varphi\|_{(1)}$.

Наконец, условие ограниченности нормы оператора перехода (38) легко выразить в терминах исходных операторов A, B .

Пусть D - самосопряженная положительная матрица. Вводя в R_s энергетическую норму

$$\|y\|_D \equiv \sqrt{(Dy, y)},$$

где (\cdot, \cdot) - скалярное произведение, превратим это линейное пространство в нормированное пространство H_D .

Теорема. Если A - самосопряженная положительная матрица и существует обратная матрица B^{-1} , то для равномерной устойчивости (с постоянной $\rho = 1$) канонической схемы (32) по начальным данным в H_A :

$$\|y_n\|_A \leq \|y_0\|_A,$$

необходимо и достаточно, чтобы выполнялось неравенство

$$(By, y) - \frac{h}{2}(Ay, y) \geq 0 \quad \forall y \in R_s,$$

или

$$B \geq \frac{h}{2}A. \quad (39)$$

Таким образом, для исследования устойчивости конкретной двухслойной схемы достаточно записать ее в канонической форме (32), определить соответствующие операторы A, B и проверить для них выполнение условий данной теоремы.

В частности, для чисто явной схемы ($B = E$) условие устойчивости (39) можно записать в виде

$$h \leq \frac{2}{\|A\|}.$$

Схема с весами (35) устойчива для любых $h > 0$ (*безусловно устойчива*), если $\sigma \geq \frac{1}{2}$, и *условно устойчива* при $h(\frac{1}{2} - \sigma)\|A\| \leq 1$, если $\sigma < \frac{1}{2}$. Поэтому схемы (33) и (34) являются безусловно устойчивыми.

2.1 Погрешность аппроксимации и сходимость приближенного решения

Пусть $u(x)$ - точное решение задачи (31), y_n - решение, полученное с помощью канонической схемы (32). Величину $z_n \equiv y_n - u(x_n)$ назовем *погрешностью решения*. Подставляя y_n в (32) получим уравнения для погрешности решения

$$\begin{cases} B \frac{z_{n+1} - z_n}{h} + Az_n = \psi_n \\ n = 0, 1, 2, \dots, z_0 = 0, \end{cases} \quad (40)$$

где

$$\psi_n \equiv \varphi_n - Au(x_n) - B \frac{u(x_{n+1}) - u(x_n)}{h}$$

- величина, которую называют *погрешностью аппроксимации* для схемы (32) на решении $u(x)$ исходной задачи (31) (*невязкой*). При этом говорят, что схема (32) имеет *m -порядок аппроксимации* на решении задачи (31), если для невязки ψ_n выполняется оценка

$$\|\psi_n\|_{(2)} = O(h^m).$$

Далее, говорят, что схема (32) имеет m -ый порядок точности или сходится со скоростью $O(h^m)$, если

$$\|z_n\|_{(1)} = O(h^m),$$

т.е.

$$\|z_n\|_{(1)} \leq Mh^m,$$

где $M > 0$ - постоянная, не зависящая от h, n .

Найдем условия аппроксимации и сходимости приближенного решения полученного с помощью канонической схемы (32) задачи (31). Предполагая, что решение задачи (31) дважды дифференцируемо, имеем

$$u(x_{n+1}) = \left(u + \frac{h}{2} \frac{du}{dx} + \frac{h^2}{8} \frac{d^2u}{dx^2} \right) \Big|_{x=x_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^3), \quad (41)$$

$$u(x_n) = \left(u - \frac{h}{2} \frac{du}{dx} + \frac{h^2}{8} \frac{d^2u}{dx^2} \right) \Big|_{x=x_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^3), \quad (42)$$

где $x_{n+\frac{1}{2}} \equiv x_n + h/2$.

Вычитая из равенства (41) равенство (42), имеем

$$\frac{u(x_{n+1}) - u(x_n)}{h} = \frac{du}{dx} \Big|_{x=x_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^2). \quad (43)$$

Используя (42),(43), для погрешности аппроксимации будем иметь равенство

$$\begin{aligned} \psi_n &= \varphi_n - \left(Au + B \frac{du}{dx} \right) \Big|_{x=x_{n+\frac{1}{2}}} + \frac{h}{2} A \frac{du}{dx} \Big|_{x=x_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^2) = \\ &= \varphi_n - \varphi(x_{n+\frac{1}{2}}) + \left(\varphi - Au - \frac{du}{dx} \right) \Big|_{x=x_{n+\frac{1}{2}}} + \left(E - B + \frac{h}{2} A \right) \frac{du}{dx} \Big|_{x=x_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^2) = \\ &= \varphi_n - \varphi(x_{n+\frac{1}{2}}) + \left(E - B + \frac{h}{2} A \right) \frac{du}{dx} \Big|_{x=x_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^2). \end{aligned}$$

Отсюда видно, что при выполнении условий

$$\|\varphi_n - \varphi(x_{n+\frac{1}{2}})\|_{(2)} = O(h^m), \quad m = \overline{1, 2},$$

$$\left\| \left(E - B + \frac{h}{2} A \right) \frac{du}{dx} \right\|_{(2)} = O(h^m), \quad m = \overline{1, 2},$$

схема (32) имеет m -ый порядок аппроксимации.

В частности, для чисто явной схемы ($B = E$)

$$\left\| \left(E - B + \frac{h}{2} A \right) \frac{du}{dx} \right\|_{(2)} = O(h).$$

Поэтому, если

$$\|\varphi_n - \varphi(x_{n+\frac{1}{2}})\|_{(2)} = O(h),$$

то чисто явная схема имеет 1-ый порядок аппроксимации.

Для симметрической схемы ($B = E + \frac{h}{2} A$)

$$\left\| \left(E - B + \frac{h}{2} A \right) \frac{du}{dx} \right\|_{(2)} = 0$$

и поэтому при

$$\|\varphi_n - \varphi(x_{n+\frac{1}{2}})\|_{(2)} = O(h^2)$$

порядок аппроксимации - 2-ой.

Рассмотрим далее вопрос о сходимости приближенного решения, полученного с помощью канонической схемы (32) к точному решению исходной задачи (31). Предполагая, что схема (32) устойчива из (36) имеем

$$\|z_n\|_{(1)} \leq M \max_{0 \leq k \leq n-1} \|\psi_k\|_{(2)}.$$

Считая, что схема (32) имеет некоторый порядок аппроксимации, получаем, что $\|z_n\|_{(1)} \rightarrow 0$ при $h \rightarrow 0$.

Из сказанного следует, что исследование сходимости решения и порядка его точности сводится к изучению порядка аппроксимации и устойчивости разностной схемы.

3 Практическая часть

3.1 Вопросы для самопроверки

1. Метод разложения в ряд Тейлора построения разностных схем для задачи Коши.
2. Явные методы Рунге-Кутты.
3. Неявные методы Рунге-Кутты.
4. Многошаговые методы Адамса.
5. Метод Эйлера для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений.
6. Каноническая двухслойная схема для задачи Коши; схема с весами.
7. Понятие устойчивости разностной схемы по начальным данным и правым частям; равномерная устойчивость по начальным данным.
8. Критерии устойчивости канонической схемы.
9. Порядок аппроксимации и скорость сходимости разностной схемы.

3.2 Варианты заданий лабораторной работы

В лабораторной работе требуется найти решение задачи Коши. Варианты заданий приведены в таблице 1. В каждом задании необходимо:

- a) для заданного уравнения провести теоретическое исследование устойчивости и порядка аппроксимации заданного метода численного решения;
- b) написать программу для решения заданной задачи Коши;
- c) решить заданную задачу Коши с помощью подпрограммы RKF45, приведенной в приложении и найти точное решение;
- d) провести сравнение, полученных решений в табличной и графической форме.

$y'' + y = \sin(x)$	$y(0) = 1, y'(0) = 0$	(0, 5)	0.01	Рунге-Кутты
---------------------	-----------------------	--------	------	-------------

Таблица 1:

3.3 Требования к программам

Подпрограмму, реализующую алгоритм решения задачи Коши, следует сделать независимой от конкретного вида уравнения и начальных данных. Этого можно достичь выносом вычисления правых частей в отдельную подпрограмму. Так, например, как это сделано в подпрограмме RKF45, представленной в приложении.

Литература

- [1] Понтрягин Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.:Наука. 1970. -332 с.
- [2] Самарский А.А. Введение в численные методы. М.:Наука. 1982. -272 с.
- [3] Самарский А.А., Гулин А.В. численные методы. М.:Наука. 1989. -430 с.
- [4] Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Ред. Дж.Холл и Дж.Уагт. М.:Мир. 1979.-312 с.
- [5] Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений. М.:Наука, 1986. -288 с.
- [6] Дж.Форсайт, М.Малькольм, К.Моулер. Машинные методы математических вычислений. М.:Мир. 1980.-275 с.

А Подпрограмма RKF45

RKF45 - подпрограмма для решения задач Коши для систем первого порядка, основанная на формулах Рунге-Кутты. Подпрограмма требует 6 вычислений правых частей для продвижения на шаг интегрирования. Вычисления проводятся по формулам

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^6 \gamma_j k_j,$$

$$k_i = h_n f \left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j, t_n + \alpha_i h_n \right), \quad i = \overline{1, 6}.$$

Приведенные формулы дают 5-ый порядок точности.

Формулы

$$y_{n+1}^* = y_n + \sum_{j=1}^6 \gamma_j^* k_j$$

позволят найти решение с 4-ым порядком точности. Значения коэффициентов приведены в таблице 2.

Подпрограмма в действительности не вычисляет значения y_{n+1}^* , а находит оценку $\sum_{i=1}^6 (\gamma_i - \gamma_i^*) k_i$, используемую для контроля величины шага. В конце параграфа приводится иллюстрирующая программа с помощью которой рассчитывается движение двух тел под действием гравитационного притяжения.

Head	Head	Head
entry	entry	entry
entry	entry	entry
entry	entry	entry

Таблица 2: Table Caption

Пусть $x(t)$ и $y(t)$ координаты одного тела в системе начало отсчета которой зафиксировано в другом теле. Уравнения движения в этом случае записываются в виде

$$x''(t) = -\frac{\alpha^2 x(t)}{R(t)}, \quad y''(t) = -\frac{\alpha^2 y(t)}{R(t)},$$

$$R(t) \equiv [x^2(t) + y^2(t)]^{3/2}.$$

Здесь α - константа, зависящая от гравитационной постоянной, масс обоих тел и выбранных единиц измерения. Если начальные условия взять в виде

$$x(0) = 1 - e, \quad x'(0) = 0,$$

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = \alpha \sqrt{\frac{1+e}{1-e}},$$

где $e \in [0, 1]$ - параметр, то решение оказывается периодическим с периодом $2\pi/\alpha$. Орбита в этом случае будет эллипсом с эксцентриситетом e , один из фокусов которого находится в начале координат.

Для преобразования задачи к системе первого порядка, положим

$$y_1 = x, \quad y_2 = y, \quad y_3 = x', \quad y_4 = y'.$$

Эквивалентная задача для системы первого порядка имеет вид

$$\begin{cases} y_1'(t) = y_3(t), & y_1(0) = 1 - e \\ y_2'(t) = y_4(t), & y_2(0) = 0 \\ y_3'(t) = -\frac{y_1(t)}{R(t)}, & y_3(0) = 0 \\ y_4'(t) = -\frac{y_2(t)}{R(t)}, & y_4(0) = \alpha \sqrt{\frac{1+e}{1-e}} \\ R(t) \equiv \frac{\sqrt{(y_1^2 + y_2^2)^3}}{\alpha^2} \end{cases}$$

Описание подпрограммы приводится в ее тексте. Отметим лишь роль параметра IFLAG. При первом обращении к подпрограмме RKF45 параметру IFLAG присваивается значение равное единице. RKF45 изменяет его значение на 2 и при следующих обращениях необходимо сохранить это значение. Значения параметра IFLAG, не равные 2, сигнализируют о наличии различных нерегулярностей или ошибок. IFLAG=4 и IFLAG=7 - предупреждение, что программе трудно получить требуемую точность. Процесс можно продолжать, либо увеличить границы погрешностей. IFLAG=3 сигнализирует о слишком высокой затребованной относительной точности. IFLAG=5 или 6 означают, что для продолжения необходимо изменить допуски на ошибку. IFLAG=8 указывает на неправильность вызова RKF45. Отметим, что термины "число вычислений производных" или "число значений функции" в комментариях подпрограммы RKF45 следует понимать как число обращений к подпрограмме вычисления правых частей системы.