Введение

Пособие посвящено изложению численных методов решения двухточечных задач, которые встречаются во всех областях науки и техники. Для таких задач граничные условия задаются в двух точках, а дифференциальные уравнения часто нелинейны, так что получить аналитическое решение не возможно и поэтому для получения решения необходимо использовать численные методы.

Численные методы решения таких задач делятся на два типа – итерационные и неитерационные. Для линейных задач решение можно получить без использования итераций, при решении нелинейных задач без итерационных методов не обойтись. Однако следует отметить, что существует несколько способов, позволяющих исключить итерации, в результате чего существенно сокращается время счета. В пособии изложены как итерационные методы – метод Эйлера, метод линейной интерполяции, метод конечных разностей, так и безитерационные методы – метод прогонки, метод суперпозиции.

1 Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Математическое моделирование задач механики, физики и других отраслей науки и техники сводятся к дифференциальным уравнениям. В связи с этим решение дифференциальных уравнений является одной из важнейших математических задач. В вычислительной математике изучаются численные методы решения дифференциальных уравнений, которые особенно эффективны в сочетании с использованием вычислительной техники. Прежде чем обсуждать методы решения дифференциальных уравнений, напомним некоторые сведения из курса дифференциальных уравнений [1], и в особенности те, которые понадобятся при дальнейшем изложении.

Дифференциальные уравнения делятся на две категории в зависимости от числа переменных: обыкновенные дифференциальные уравнения, содержащие одну независимую переменную, и уравнения с частными производными, содержащие несколько независимых переменных. Данный раздел посвящен методам решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Обыкновенными дифференциальными уравнениями называются такие уравнения, которые содержат одну или несколько производных от искомой функции $y = y(x)$. Их можно записать в виде

$$F\left(x, y, y', \ldots, y^{(n)}\right) = 0, \tag{1.1}$$

где x – независимая переменная.

Наивысший порядок n входящей в уравнение (1.1) производной называется порядком дифференциального уравнения. В частности, запишем уравнения первого и второго порядков:

$$F\left(x, y, y'\right) = 0, \qquad F\left(x, y, y', y''\right) = 0.$$

Линейным дифференциальным уравнением называется уравнение, линейное относительно искомой функции $y(x)$ и ее производных. Например, $y' - x^2 y = \sin x$ – линейное дифференциальное уравнение первого порядка.

Решением дифференциального уравнения (1.1) называется всякая n раз дифференцируемая функция $y = \varphi(x)$, которая после ее подстановки в исходное дифференциальное уравнение превращает его в тождество.

Общее решение обыкновенного дифференциального уравнения n-го порядка (1.1) содержит n произвольных постоянных $C_1, C_2, \ldots C_n$:

$$y = \varphi\left(x, C_1, C_2, \ldots, C_n\right) \tag{1.2}$$

где (1.2) является решением уравнения (1.1) при любых значениях C_1, $C_2, \ldots C_n$, а любое решение уравнения (1.1) можно представить в виде (1.2) при некоторых $C_1, C_2, \ldots C_n$.

Частное решение дифференциального уравнения получается из общего, если произвольным постоянным придать определенные значения. Для уравнения первого порядка общее решение зависит от одной произвольной постоянной:

$$y = \varphi\left(x, C\right). \tag{1.3}$$

Для заданного значения постоянной, $C = C_0$, частное решение уравнения (1.3) имеет вид: $y = \varphi(x, C_0)$.

Для выделения частного решения из общего нужно задавать столько дополнительных условий, сколько произвольных постоянных в общем решении, т. е. каков порядок уравнения. В качестве дополнительных условий могут задаваться значения искомой функции и ее производных при некоторых значениях независимой переменной, т. е. в некоторых точках.

Если дополнительные условия задаются в одной точке, $t = t_0$, то такая задача называется задачей Коши. Дополнительные условия называются начальными условиями, а точка, в которой они задаются, – начальной точкой. Для уравнения первого порядка дополнительное условие одно, поэтому в этом случае может быть сформулирована только задача Коши.

Если же для уравнения порядка $n > 1$ дополнительные условия задаются в более чем одной точке, т. е. при разных значениях независимой переменной, то такая задача называется краевой. Сами дополнительные условия называются при этом граничными (или краевыми) условиями. На практике обычно граничные условия задаются в двух точках $x = a$ и $x = b$, являющихся границами отрезка, на котором рассматривается дифференциальное уравнение.

Методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений можно разбить на следующие группы: графические, аналитические, приближенные и численные.

Мы будем рассматривать численные методы решения дифференциальных уравнений, которые в настоящее время являются основным инструментом при исследовании научно-технических задач, описываемых дифференциальными уравнениями.

1.1 Метод Эйлера

Простейшим численным методом решения задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения является метод Эйлера. Рассмотрим уравнение

$$y' = f\left(x, y\right) \tag{1.4}$$

в окрестностях узлов $x = x_i, \left(i = 0, 1, \ldots\right)$ и заменим в левой части производную y' правой разностью. При этом значения функции y в узлах x_i заменим значениями сеточной функции $y\left(x_i\right) = y_i$:

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} = f\left(x_i, y_i\right). \tag{1.5}$$

Говорят, что уравнение (1.5) аппроксимирует исходное уравнение (1.4) с первым порядком, так как погрешность аппроксимации определяется, как $O\ (h_i)$.

Рассмотрим равномерную сетку, с узлами, равноотстоящими друг от друга, $h_i = x_{i+1}$-$x_i = h = const$, (i = 0, 1, …). Тогда из равенства (1.5) получаем

$$y_{i+1} = y_i + hf\left(x_i, y_i\right), \quad i = 0, 1, \ldots . \tag{1.6}$$

Заметим, что из уравнения (1.5) при $h \to 0$ следует

$$y'\left(x_i\right) = f\left(x_i, y\left(x_i\right)\right) = f\left(x_i, y_i\right).$$

Уравнение (1.6) позволяет приближенно определить значение функции y в точке x_{i+1} при помощи разложения в ряд Тейлора с отбрасыванием членов второго и более высоких порядков. Другими словами, приращение функции полагается равным ее дифференциалу.

Полагая i = 0, с помощью соотношения (1.6) можно определить значение сеточной функции y при $x = x_1$, y_1:

$$y_1 = y_0 + hf\left(x_0, y_0\right).$$

Требуемое здесь значение y_0 задано начальным условием $y\ (x_0) = y_0$.Аналогично могут быть определены значения сеточной функции в других узлах:

$$\begin{aligned} & y_2 = y_1 + hf\left(x_1, y_1\right), \\ & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ & y_n = y_{n-1} + hf\left(x_{n-1}, y_{n-1}\right), \\ & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{1.7}$$

Построенный алгоритм называется методом Эйлера. Разностная схема этого метода представлена соотношениями (1.6), (1.7). Они имеют вид реккурентных формул, с помощью которых значение сеточной функции y_{i+1} в любом узле x_{i+1} вычисляется по ее значению y_i в предыдущем узле x_i. В связи с этим метод Эйлера относится к одношаговым методам.

Рассмотрим вопрос о погрешности метода Эйлера. Погрешность δ_i в точке x_i равна разности между точным значением искомой функции $y\,(x_i)$ и значением сеточной функции y_i: $\delta_i = y\left(x_i\right) - y_i$. Подставим $\delta_i = y\left(x_i\right) - y_i$ и $\delta_{i+1} = y\left(x_{i+1}\right) - y_{i+1}$. в (1.6). Имеем

$$y_{i+1} - \delta_{i+1} = y\left(x_i\right) - \delta_i + hf\left(x_i, y\left(x_i\right) - \delta_i\right). \qquad (1.8)$$

Разложим функцию f в ряд в окрестности точки $\left(x_i, y\left(x_i\right)\right)$:

$$f\left(x_i, y\left(x_i\right) - \delta_i\right) = f\left(x_i, y\left(x_i\right)\right) - \frac{\partial f}{\partial y}\delta_i + O\left(\delta_i^2\right) =$$
$$= f\left(x_i, y\left(x_i\right)\right) + O\left(\delta_i\right).$$

Используя полученное разложение, выразим δ_{i+1} из (1.8):

$$\delta_{i+1} = \delta_i + y\left(x_{i+1}\right) - y\left(x_i\right) - hf\left(x_i, y\left(x_i\right)\right) + hO\left(\delta_i\right).$$

Учитывая, что $y\left(x_{i+1}\right) = y\left(x_i\right) + hf\left(x_i, y\left(x_i\right)\right) + O\left(h^2\right)$, получаем

$$\delta_{i+1} = \delta_i + O\left(h^2\right) + hO\left(\delta_i\right). \qquad (1.9)$$

Таким образом, погрешность δ_{i+1} отличается от погрешности δ_i на два слагаемых: $O\,(h^2)$ есть следствие погрешности аппроксимации (1.5), а $hO\,(\delta_i)$ есть следствие неточности значения y_i.

При нахождении y_1 начальное значение y_0 задается, как правило, точно: $\delta_0 = 0$. Отсюда

$$\delta_1 = O\left(h^2\right),\ \delta_2 = \delta_1 + O\left(h^2\right) + hO\left(h^2\right) = O\left(h^2\right)\left(2 + h\right) \approx O\left(h^2\right).$$

Отсюда видно, что последнее слагаемое в (1.9) можно отбросить. Уравнение примет вид:

$$\delta_{i+1} = \delta_i + O\left(h^2\right),$$

т. е. погрешность на каждом шаге увеличивается на величину $O\,(h^2)$.

При нахождении решения в точке x_n, отстоящей на конечном расстоянии L от точки x_0, погрешность состоит из n слагаемых $O\,(h^2)$. Если учесть, что $h = L/n$, то для погрешности δ_n получаем окончательное выражение:

$$\delta_n = nO\left(h^2\right) = \frac{L}{h}O\left(h^2\right) = O\left(h\right). \tag{1.10}$$

Отсюда следует, что метод Эйлера имеет первый порядок точности.

1.2 Методы **Рунге-Кутта**

Рассмотренный метод Эйлера (1.5) является частным случаем методов первого и второго порядков, относящихся к классу методов Рунге-Кутта. Эти методы применяют для вычисления значения y_{i+1}, ($i = 0,\ 1,\ \ldots$) через y_i и $f\,(x,\ y)$, определенных при некоторых специальным образом выбираемых значениях $x \in \left[x_i, x_{i+1}\right]$ и $y\,(x)$. На их основе могут быть построены разностные схемы разного порядка точности. Одним из наиболее часто используемых методов является метод Рунге-Кутта четвертого порядка. Алгоритм метода записывается в виде

$$\begin{gathered}
y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}\left(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3\right),\ i = 0,1,..,\\
k_0 = hf\left(x_i, y_i\right),\\
k_1 = hf\left(x_i + \frac{h}{2},\ y_i + \frac{k_0}{2}\right),\\
k_2 = hf\left(x_i + \frac{h}{2},\ y_i + \frac{k_1}{2}\right),\\
k_3 = hf\left(x_i + h,\ y_i + k_2\right).
\end{gathered} \tag{1.11}$$

Данный метод требует на каждом шаге четырехкратного вычисления правой части $f\,(x,\ y)$ уравнения (1.4). Суммарная погрешность этого метода есть величина $O\,(h^4)$.

Метод Рунге-Кутта (1.11) требует большего объема вычислений по сравнению с методом Эйлера, однако это окупается повышенной точностью, что дает возможность проводить счет с большим шагом. Другими словами, для получения результатов с одинаковой точностью в методе

Эйлера потребуется значительно меньший шаг, чем в методе Рунге-Кутта (1.11).

Дополнительного повышения точности расчетов можно добиться, повысив порядок метода за счет увеличения количества операций на один шаг разностной сетки. Алгоритм расчета уравнения (1.4) для метода Рунге-Кутта-Мерсона 5-го порядка представлен уравнениями (1.12).

$$\begin{aligned}
&y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}\left(k_0 + 4k_3 + k_4\right),\ i = 0,1,..,\\
&k_0 = hf\left(x_i, y_i\right),\\
&k_1 = hf\left(x_i + \frac{h}{3},\ y_i + \frac{k_0}{3}\right),\\
&k_2 = hf\left(x_i + \frac{h}{3},\ y_i + \frac{k_0}{6} + \frac{k_1}{6}\right),\\
&k_3 = hf\left(x_i + \frac{h}{2},\ y_i + \frac{k_0}{8} + \frac{3k_2}{8}\right),\\
&k_4 = hf\left(x_i + h,\ y_i + \frac{k_0}{2} - \frac{3k_2}{2} + 2k_3\right).
\end{aligned} \tag{1.12}$$

Суммарная погрешность метода равна $O(h^5)$.

В случае длительных расчетов, требующих большого количества вычислений, можно сократить время расчета за счет использования переменного шага разностной сетки h. При использовании переменного шага в расчетах контролируется разность между соседними значениями сеточной функции $\Delta = (y_i - y_{i+1})$. В случае превышения Δ заданной погрешности ε шаг сетки уменьшается в два раза, при малых значениях Δ шаг увеличивается в два раза. Условия автоматического выбора шага сетки представлены уравнениями (1.13).

$$h_{i+1} = \begin{cases} 2 \cdot h_i, \Delta \le \dfrac{5}{32}\varepsilon; \\ 0.5 \cdot h_i, \Delta \ge 5\varepsilon; \\ h_i, \dfrac{5}{32}\varepsilon < \Delta < \varepsilon \cdot 5. \end{cases} \tag{1.12}$$

Условия (1.12) позволяют существенно сократить время расчета задачи, сохранив точность решения.

В таблице 1.1 приведены результаты расчета дифференциального уравнения

$$y' + y = 3\exp\left(2x\right),\ x \in \left[0,\ 1\right].$$

точное решение которого имеет вид:

$$y\left(x\right) = \exp\left(2x\right).$$

В таблице представлены результаты расчета на сетке, состоящей из 5 равноотстоящих узлов. Для сравнения решение выполнено методами Эйлера, Рунге-Кутта 4-го порядка и Рунге-Кутта-Мерсона 5-го порядка.

Таблица 1.1

x_i	$y_{ан}(x_i)$	y_i (метод Эйлера)	y_i (метод Рунге-Кутта)	y_i (метод Рунге-Кутта-Мерсона)
0	1	1	1	1
0.2	1.49183	1.4	1.49186	1.49184
0.4	2.22554	2.0151	2.22563	2.22557
0.6	3.32012	2.9474	3.32028	3.32017
0.8	4.95303	4.34999	4.95329	4.95313
1	7.38906	6.45181	7.38946	7.38921

Из таблицы видно, что методы Рунге-Кутта 4-го порядка и Рунге-Кутта-Мерсона 5-го порядка дают результаты, близкие аналитическому решению, даже на сетке, состоящей из 5 точек.

Стоит заметить, что результаты, полученные методом 5-го порядка точнее результатов, полученных с помощью метода 4-го порядка.

Контрольные вопросы.

1. Разностная схема метода Эйлера, определение погрешности этого метода. Каков порядок точности метода Эйлера.
2. Алгоритм метода Рунге-Кутта.
3. Перечислите частные случаи граничных условий.
4. Итерационная формула метода Ньютона

5. В чем состоит сущность метода суперпозиции. Реализация этого метода (пошагово).

6. Суть метода прогонки

7. Суть метода конечных разностей. Порядок точности этого метода.

8. Разностная схема метода квазилинеаризации.

9. Чем объясняется лучшая сходимость метода Ньютона для решения нелинейных краевых задач по сравнению с методом квазилинеаризации. Итерационная формула метода Ньютона.

Основная литература

1 *Понтрягин Л.С.* Обыкновенные дифференциальные уравнения М. Наука, 1974. 331 с.

2 *На Ц.* Вычислительные методы решения прикладных задач. М. Мир, 1982. 296 с.

3 *Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А.* Численное моделирование процессов тепло- массообмена. - М.: Наука. 1984. - 288 с.

4 *Исаченко В.П., Осипова В.А., Сукомел А.С.* Теплопередача. М.: Энергия. 1975. 488 с.

5 *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1971. – 552 с.

Дополнительная литература

1 *Марчук Г.И.* Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1989. – 536 с.

2 *Боглаев Ю.П.* Вычислительная математика и программирование. – М.: Высшая школа, 1990. – 534 с.

3 *Арушанян О.Б., Залеткин С.Ф.* Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений на Фортране. М.: Изд-во МГУ, 1990. – 336 с.

4 *Арушунян О.Б., Залеткин С.Ф.* Численное решение ОДУ на Фортране. Изд-во МГУ. 1990.

5 *Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г.* Решение ОДУ. Нежесткие задачи. Изд-во Мир. 1990.