

8. Обзор численных методов решения дифференциальных уравнений движения

Постановка задачи

Решение уравнений движения является классической задачей механики. В общем случае это система дифференциальных уравнений

$$\frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \frac{1}{m_i} \vec{F}_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots; \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots; t)$$

для произвольного набора частиц $i=1, \dots, N$. Для координат и скоростей одной частицы имеем $dx/dt=v_x$, $dv_x/dt=a_x=F_x/m$, и аналогично для остальных координат y и z . Сила F_x является в общем случае функцией координат и скоростей всех частиц, её явный вид определяется физическими условиями задачи.

Точно решить эти уравнения удастся только в ряде достаточно простых ситуаций, в общем случае приходится использовать один из методов приближенного (численного) решения дифференциальных уравнений.

Метод Эйлера для уравнения движения позволяет находить координаты и скорости в момент времени $t+\Delta t$, если известны параметры движения в момент времени t :

$$x(t+\Delta t) = x(t) + v_x(t) \cdot \Delta t, \quad v_x(t+\Delta t) = v_x(t) + a_x(t) \cdot \Delta t.$$

Повторяя эти действия N раз, можно рассчитать отрезок траектории за время $(N \Delta t)$. Метод Эйлера-Кромера является его улучшенной модификацией

$$v_x(t+\Delta t) = v_x(t) + a_x(t) \cdot \Delta t, \quad x(t+\Delta t) = x(t) + v_x(t+\Delta t) \cdot \Delta t.$$

Пример. Равноускоренное движение. Проверим, как работают оба эти метода. Сравним точные значения скорости и ускорения для равноускоренного движения с приближенными решениями и оценим погрешность. Точное решение имеет вид

$$v_x(t+\Delta t) = v_x(t) + a_x \cdot \Delta t, \quad x(t+\Delta t) = x(t) + v_x(t) \cdot \Delta t + (1/2) \cdot a_x \cdot (\Delta t)^2.$$

Решение по методу Эйлера

$$x(t+\Delta t) = x(t) + v_x(t) \cdot \Delta t, \quad v_x(t+\Delta t) = v_x(t) + a_x \cdot \Delta t.$$

Решение по методу Эйлера-Кромера

$$v_x(t+\Delta t) = v_x(t) + a_x \cdot \Delta t.$$

$$x(t+\Delta t) = x(t) + v_x(t+\Delta t) \cdot \Delta t = x(t) + v_x(t) \cdot \Delta t + a_x \cdot (\Delta t)^2.$$

Оба метода дают ошибку порядка $a_x(t) \cdot (\Delta t)^2$, поэтому во многих случаях приходится использовать более точные схемы расчета.

Основные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Обыкновенными дифференциальными уравнениями (ОДУ) называются уравнения, содержащие одну или несколько производных от искомой функции $y = y(t)$, где t – независимая переменная. Их можно записать в виде

$$F(t, y, \frac{dy}{dt}, \frac{d^2y}{dt^2}, \dots, \frac{d^ny}{dt^n}) = 0.$$

Наивысший порядок производной n , входящей в это уравнение, называется порядком ОДУ. Общее решение обыкновенного дифференциального уравнения n -го порядка содержит n произвольных постоянных. Единственность решения обеспечивают с помощью дополнительных условий. Например, такими условиями является набор начальных условий в задаче о движении частиц.

В математике такую задачу называют задачей Коши. Точка $t=t_0$, в которой задаются дополнительные условия, является начальной точкой. В данном случае эти условия могут быть заданы в виде:

$$y(t_0) = y_0, \quad y'(t_0) = y_{10}, \quad \dots, \quad y^{(n-1)}(t_0) = y_{n-1,0}.$$

Наиболее распространенным методом численного решения ОДУ является метод конечных разностей. Область непрерывного изменения независимой переменной (аргумента t) заменяется дискретным множеством точек. Исходное дифференциальное уравнение заменяется разностными соотношениями в этих точках. При этом входящие в уравнения производные заменяются разностными отношениями. Тогда решение ОДУ сводится к алгебраической задаче.

Обзор методов удобно начать с уравнения первого порядка

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad \text{где } a \leq t \leq b, \quad \text{причем } y(a) = y_0.$$

Основой рассматриваемых далее численных алгоритмов является дискретизация задачи. Введем в области расчета $a \leq t \leq b$ дискретный набор точек $t_i = a + h \cdot i$, где $i = 0, 1, \dots, N$, $h = (b - a) / N$, в которых будет

вычисляться приближенное решение. Точки t_i назовём точками интегрирования или точками решетки, расстояние h между ними – шагом интегрирования или шагом решетки, а набор всех t_i – решеткой. Численное решение ОДУ сводится к вычислению приближенных значений функции $y(t)$ в точках решетки, которые будем обозначать через y_i (см. рисунок П.1.).

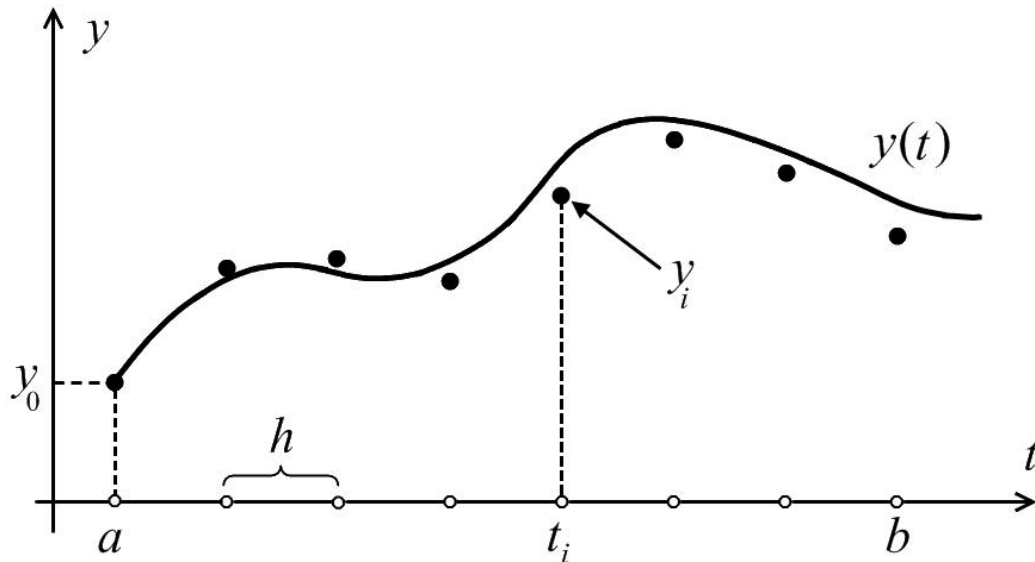


Рис. П.1. Точное и приближенное решения ОДУ

Таким образом, y_i – приближенное значение для $y(t_i)$, найденное в рамках одного из методов, а погрешностью метода является величина

$$\Delta y = \max_i |y_i - y(t_i)|.$$

Заметим, что при оценке погрешности рассматриваются отклонения во всех точках решетки. Говорят, что численное решение сходится к точному, если $\Delta y \rightarrow 0$ при $h \rightarrow 0$. Если $\Delta y \leq A \cdot h^p$, то этот метод называют методом p -го порядка точности (A – константа).

Метод Эйлера. Эта схема соответствует замене в дифференциальном уравнении производной в окрестности i -той точки решетки правым разностным отношением:

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(t_i, y_i), \quad \text{где } i = 0, 1, \dots, N-1, \quad \text{причем } y_0 = y(a).$$

Алгебраические соотношения между компонентами дискретной функции, которыми заменяются исходные дифференциальные уравнения в окрестности каждой точки решетки, называют

разностными уравнениями. Последовательные значения y_i , очевидно, вычисляются по формуле

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i).$$

Можно также попробовать заменить производную в уравнении левым разностным отношением $\frac{y_i - y_{i-1}}{h} = f(t_i, y_i)$. Тогда значения y_i будут вычисляться по формуле $y_i = y_{i-1} + hf(x_i, y_i)$.

Видно, что искомая величина y_i входит в правую и левую части уравнения. Это усложняет задачу, так как y_i может входить в правую часть нелинейным образом. Для получения явного выражения для y_i необходимо использовать методы решения нелинейных уравнений. Например, можно предложить следующий итерационный процесс, для вычисления приближенного решения в очередном i -ом узле:

$$y_i^{(k)} = y_{i-1} + hf(x_k, y_i^{(k-1)}), \quad y_i^{(0)} = y_{i-1}.$$

Методы, в которых для вычисления решения в i -той точке необходимо дополнительно решать некоторые уравнения (линейные или нелинейные), называются неявными методами.

Методы, в которых решения в i -той точке явно выражается через предыдущие значения y_{i-1}, y_{i-2}, \dots , называются явными методами. При этом, если для вычисления y_i используется только одно предыдущее значение y_{i-1} , то метод называется одношаговым, а если несколько предыдущих значений – многошаговым.

Таким образом, метод Эйлера является явным одношаговым методом. В курсе численных методов доказывается, что рассмотренный метод Эйлера обладает первым порядком точности, т.е. $\Delta y \sim h$. Поясним смысл этого утверждения. Чтобы вычислить значение функции в точке b необходимо сделать N шагов, причем очевидно $N = \frac{b-a}{h}$. Погрешность метода Эйлера на одном шаге пропорциональна h^2 , а в точке b , после N шагов, $\Delta y \sim (N \cdot h^2) \sim h$.

Для того чтобы понять, как повысить точность метода Эйлера, используем его геометрическую интерпретацию, представленную на рис. П2. Точная кривая $y(t)$ на отрезке $[a, b]$ приближается ломаной (рис. П.2(а)). Наклон отрезка ломаной на элементарном интервале $[t_i, t_{i+1}]$ определяется наклоном интегральной кривой в точке (t_i, y_i) , то есть в начальной точке этого интервала.

Рассмотрим подробно один шаг метода Эйлера в пределах интервала $[t_i, t_{i+1}]$, здесь y_A – приближенное значение функции при $t = t_{i+1}$ (рис. П2(б)).

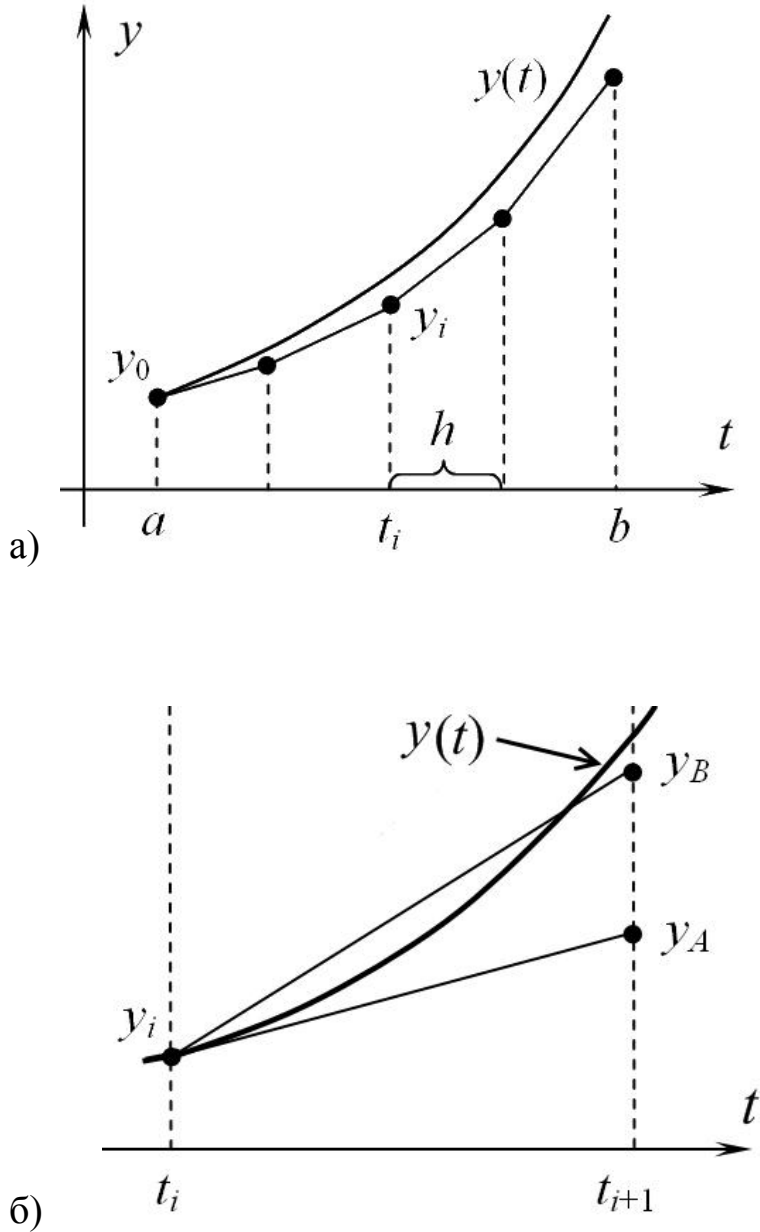


Рис. П.2. Геометрическая интерпретация метода Эйлера

Очевидно, основной вклад в погрешность связан с тем, что наклон отрезка, аппроксимирующего функцию $y(t)$, определяется касательной (то есть производной) в начальной точке интервала. Если выбрать наклон, отвечающий производной в конечной точке t_{i+1} , результат также не будет удовлетворительным.

Интуитивно ясно, что в качестве наклона этого отрезка следует выбрать наклон касательной к функции $y(t)$ в промежуточной точке, например в середине интервала $[t_i, t_{i+1}]$. Из рисунка видно, что в этом случае приближенное значение функции y_B при $t = t_{i+1}$ будет гораздо ближе к точному.

Модифицированный метод Эйлера. Запишем уравнение прямой выходящей из точки (t_i, y_i) с наклоном, равным наклону интегральной кривой в середине отрезка $[t_i, t_{i+1}]$:

$$y = y_i + f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_{i+1/2}\right) \cdot (t - t_i).$$

При $t = t_{i+1}$ эта прямая проходит через точку (t_{i+1}, y_B) на рис. П.2.

Для точки $t = t_{i+1}$ получаем

$$y_{i+1} = y_i + f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_{i+1/2}\right)h,$$

Значение функции в середине отрезка, то есть $y_{i+1/2} = y\left(t_i + \frac{h}{2}\right)$, можно приближенно вычислить по методу Эйлера

$$y_{i+1/2} \approx y_i + \frac{h}{2} f(t_i, y_i).$$

Окончательно получаем модифицированную схему Эйлера в виде

$$y_{i+1} = y_i + f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} f(t_i, y_i)\right) \cdot h.$$

Данный алгоритм представляет собой явную одношаговую разностную схему решения ОДУ. Доказано, что она имеет второй порядок точности $\Delta y \sim h^2$.

Этот метод легко обобщается на ОДУ произвольного порядка, которое сводится к решению системы линейных дифференциальных уравнений. В частности, для уравнений движения

$$\frac{dx}{dt} = v(t), \quad \frac{dv}{dt} = a(t, x(t), v(t)),$$

модифицированный метод Эйлера (с учетом $\Delta t = h$) выглядит следующим образом;

$$x(t+h) = x(t) + v\left(t + \frac{h}{2}\right) \cdot h$$

$$v(t+h) = v(t) + a\left(t + \frac{h}{2}, x(t + \frac{h}{2}), v(t + \frac{h}{2})\right) \cdot \Delta t,$$

где

$$x(t + \frac{h}{2}) = x(t) + v(t) \cdot \frac{h}{2} \quad v(t + \frac{h}{2}) = v(t) + a(t, x(t), v(t)) \cdot \frac{h}{2}.$$

Убедимся, что для равноускоренного движения этот метод дает точное решение. Действительно, имеем

$$x(t+h) = x(t) + \left(v(t) + a \cdot \frac{h}{2}\right) \cdot h = x(t) + v(t) \cdot h + \frac{1}{2} a \cdot h^2.$$

Методы Рунге-Кутты. Модифицированный метод Эйлера является частным случаем однопараметрического семейства схем Рунге-Кутты (РК) различного порядка точности. Например, метод РК второго порядка точности можно записать в виде:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot [(1-\alpha)p_1 + \alpha p_2],$$

где α – свободный параметр, а p_1 и p_2 определены формулами

$$p_1 = f(t_i, y_i), \quad p_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2\alpha}, y_i + \frac{h}{2\alpha} p_1\right).$$

При $\alpha = 1$ эта формула совпадает с модифицированным методом Эйлера, рассмотренным выше, а при $\alpha = 1/2$ дает формулу так называемого «метода Эйлера с пересчетом» (см. ниже).

Наиболее популярным является метод Рунге-Кутты четвертого порядка точности, определяемый формулой

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6} \cdot (p_1 + 2p_2 + 2p_3 + p_4),$$

где параметры p_i имеют вид:

$$\begin{aligned} p_1 &= f(t_i, y_i), & p_3 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} p_2\right), \\ p_2 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} p_1\right), & p_4 &= f(t_i + h, y_i + hp_3). \end{aligned}$$

Метод РК четвертого порядка требует существенно большего объема вычислений по сравнению с методом Эйлера и его модификациями, но обеспечивает повышенную точность, что дает возможность проводить вычисления с более крупным шагом.

Метод Рунге–Кутта можно обобщить на систему линейных ОДУ первого порядка и на ОДУ высших порядков (сводя их к системе уравнений первого порядка). Рассмотрим уравнение движения вида

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f\left(t, x, \frac{dx}{dt}\right),$$

Введем, как обычно, скорость $v(t) = \frac{dx}{dt}$. Метод РК в этом случае дает

$$x(t+h) = x(t) + v(t) \cdot h + \frac{1}{6}(f_1 + f_2 + f_3) \cdot h^2$$

$$v(t+h) = v(t) + \frac{1}{6}(f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4) \cdot h$$

В этих формулах использованы следующие обозначения

$$f_1 = f\left(t, x(t), v(t)\right) \quad f_2 = f\left(t + \frac{h}{2}, x(t) + v(t) \cdot \frac{h}{2}, v(t) + f_1 \cdot \frac{h}{2}\right)$$

$$f_3 = f\left(t + \frac{h}{2}, x(t) + v(t) \cdot \frac{h}{2} + f_1 \cdot \frac{h^2}{4}, v(t) + f_2 \cdot \frac{h}{2}\right)$$

$$f_4 = f\left(t + h, x(t) + v(t) \cdot h + f_2 \cdot \frac{h}{2}, v(t) + f_3 \cdot h\right)$$

Очевидно, для равноускоренного движения эти формулы – точные. Также они точны и для линейно ускоренного движения.

Методы типа «прогноз-коррекция». Суть этих методов состоит в том, что сначала грубо оценивается решение в некоторой точке отрезка интегрирования, а затем оно уточняется с учетом информации о поведении интегральной кривой.

В качестве примера рассмотрим так называемый метод Эйлера с пересчетом. В этой схеме сначала с помощью обычного метода Эйлера определяется точка (t_{i+1}, y_{i+1}^{np}) , т.е. прогнозирование результата,

Прогноз:
$$y_{i+1}^{np} = y_i + f(t_i, y_i) \cdot h$$

затем вычисляется уточненное значение y_{i+1} , по формуле:

Коррекция:
$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}[f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1}^{np})] \cdot h$$

Поясним формулу коррекции геометрически (рис. П.4.). С помощью простого метода Эйлера определим точку (t_{i+1}, y_{i+1}^{np}) и

проведем через нее прямую l_1 , которая отвечает наклону (производной) функции $y(t)$ в начальной точке. В полученной точке (t_{i+1}, y_{i+1}^{np}) снова вычислим наклон кривой $y(t)$, на рисунке этому соответствует прямая l_2 .

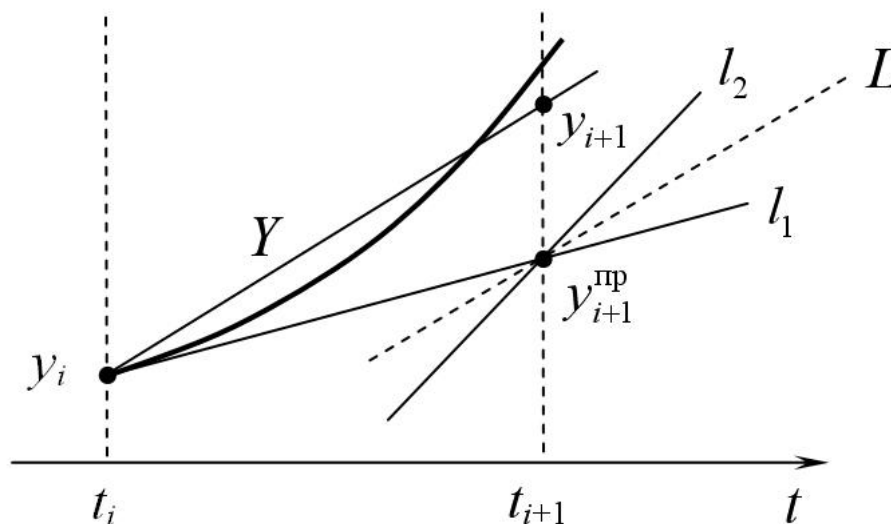


Рис. П.4. Метод прогноз-коррекция

Усреднение двух наклонов дает прямую L . Наконец через точку (t_i, y_i) проводим прямую Y , параллельную L . Точка, в которой прямая Y пересечется с ординатой при t_{i+1} , и будет искомым значением y_{i+1} и даст нам скорректированное значение y_{i+1} . Фактически в этой схеме мы приближенно определяем средний наклон (производную) на интервале $[t_i, t_{i+1}]$ по формуле $\bar{f}_i = \frac{1}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1}^{np})]$, и этот средний наклон используем для уточненного значения функции $y_{i+1} = y_i + \bar{f}_i \cdot h$.

Метод Эйлера с пересчетом имеет второй порядок точности, однако для него необходимо дважды вычислять правую часть уравнения. Отметим, что рассмотренный выше модифицированный метод Эйлера также можно отнести к методам «прогноз-коррекция».

С помощью метода Эйлера с пересчетом можно проводить контроль точности решения путем сравнения значений y_{i+1}^{np} и y_{i+1} и выбора на основании этого соответствующего шага h в каждом узле. А именно, если величина $|y_{i+1} - y_{i+1}^{np}|$ сравнима с погрешностями вычислений, то шаг нужно увеличить; в противном случае, если эта

разность слишком велика (например, $|y_{i+1} - y_{i+1}^{mp}| > 0.1 \cdot y_{i+1}$), значение h следует уменьшить. Этот алгоритм называется методом Эйлера с пересчетом и автоматическим выбором шага. Такой подход позволяет менять величину шага на разных участках вычисления функции. Там, где функция меняется плавно, – шаг может быть большим, а на участках с резкими перепадами шаг должен быть существенно уменьшен.

Многошаговые методы. Для этих методов приближенное значение решения в i -той точке зависит от данных не только в одной предыдущей точке, но и от набора предшествующих. Построим простейший многошаговый метод. Заменяя в уравнении

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad \text{где } a \leq t \leq b, \quad y(a) = y_0$$

производную в окрестности каждой i -той точки сетки центральным разностным отношением, получим следующую разностную схему:

$$\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} = f(t_i, y_i), \quad \text{где } i = 0, 1, \dots, N-1, \quad y_0 = y(a).$$

Выразим отсюда значение y_{i+1} :

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2h f(t_i, y_i).$$

Видно, что искомое значение y_{i+1} зависит от двух предыдущих значений y_i и y_{i-1} . Для того чтобы начать вычисления по этой формуле при заданном значении y_0 , необходимо каким-то образом доопределить значение y_1 . Это можно сделать, например, воспользовавшись методом Эйлера: $y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0)$. Данная формула является простейшим многошаговым (двухточечным) методом решения задачи Коши и обладает вторым порядком точности.

Другие методы (схемы экстраполяции). Очевидно, что решение уравнения вида $\frac{dy}{dt} = f(t, y)$ удовлетворяет интегральному соотношению

$$y(t+h) = y(t) + \int_t^{t+h} f(\tau, y(\tau)) d\tau.$$

Перепишем его для i -того интервала, то есть обозначим $y_i = y(t)$, $y_{i+1} = y(t+h)$, $t_i = t$, $t_{i+1} = t+h$, а подынтегральную функцию будем экстраполировать полиномами различной степени. Коэффициенты

полиномов определяются по предварительно вычисленным значениям решения (t_k, y_k) , $k = 1, 2, \dots, i$ (обычно используют несколько предшествующих). Интегрирование выбранного полинома даёт различные расчетные схемы – так называемые «формулы Адамса».

Например, заменяя подынтегральную функцию ее значением в точке t_i (полиномом нулевой степени), опять получим метод Эйлера

$$y_{i+1} = y_i + \int f_i d\tau = y_i + f_i \cdot h.$$

Заменяя подынтегральную функцию полиномом третьей степени можно получить метод Адамса четвертого порядка:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{24} (55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}) \cdot h.$$

Критерии выбора одного из метода четвертого порядка точности зависят как от особенностей конкретной задачи, так и от других факторов. Например, метод Адамса требует меньшего количества арифметических действий при определении y_{i+1} , так как нужно лишь один раз вычислять значение функции $f_i = f(t_i, y_i)$. Предшествующие значения $(f_{i-1}, f_{i-2}, f_{i-3})$ к этому моменту уже вычислены и хранятся в памяти. Метод Рунге-Кутты требует в обязательном порядке вычислять четыре вспомогательных значения функции f . С другой стороны, чтобы начать вычисления по формулам Адамса, необходимо, помимо заданного значения y_0 , определить (например, по формулам Рунге-Кутты) значения y_1, y_2, y_3 в первых трех точках интегрирования.