Глава 4

Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений (продолжение)

Данный семинар посвящен методам численного интегрирования ОДУ с использованием разложения в ряд Тейлора и т.н. методам Рунге–Кутты.

4.1 Методы с использованием ряда Тейлора

Основная идея этих методов была изложена нами ранее, при рассмотрении метода Эйлера. Предположим, что $y(x)$ — достаточно гладкая функция, тогда

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hy'(t_n) + \frac{h^2}{2}y''(t_n) + \cdots .$$

Если мы обрежем ряд Тейлора в определенной точке и заменим $y(t_n)$ значением y_n, мы получим т.н. метод численного интегрирования ОДУ с использованием разложения в ряд Тейлора.

Простейшим случаем этих методов является уже рассмотренный нами метод Эйлера. Метод, использующий следующий член в разложении записывается как:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2}y''_n + O(h^3) \\ &= y_n + hf(y_n, t_n) + \frac{h^2}{2}\frac{df(y_n, t_n)}{dt} + O(h^3). \end{aligned} \tag{4.1}$$

Пример. Рассмотрим, как и раньше, пример ОДУ первого порядка с $f(y,t) = -2ty^2$ и начальным условием $y(0) = 0$, так что

$$\begin{aligned} y''(t) &= \frac{d}{dt}y'(t) = \frac{d}{dt}(-2ty^2) = -2y^2 - 4tyy' \\ &= -2y^2 - 4ty(-2ty^2) = -2y^2 + 8t^2y^3. \end{aligned}$$

Численная схема интегрирования, соответственно, имеет вид:

$$y_{n+1} = y_n + h\left[-2t_n y_n^2\right] + \frac{h^2}{2}\left[-2y_n^2 + 8t_n^2 y_n^3\right].$$

Для шага $h = 0,5$ мы получим следующие значения:

$$\begin{aligned} y_0 &= 1 \\ y_1 &= 0,75 \\ y_2 &= 0,43359375 \\ y_3 &= 0,280106485 \\ y_4 &= 0,192250483 \end{aligned}$$

и глобальная ошибка вычислений составит $E_4 = 0,007749517$.

Для шага $h = 0,25$ та же схема дает:

$$\begin{aligned} y_0 &= 1 \\ \ldots & \quad \ldots \\ y_4 &= 0,487213029 \\ \ldots & \quad \ldots \\ y_8 &= 0,199720953 \end{aligned}$$

и глобальная ошибка вычислений составит уже $E_8 = 0,000279047$.

Для шага $h = 0,125$ получим:

$$\begin{aligned} y_0 &= 1 \\ \ldots & \quad \ldots \\ y_8 &= 0,4972455756 \\ \ldots & \quad \ldots \\ y_{16} &= 0,199994786 \end{aligned}$$

с глобальной ошибкой $E_{16} = 0,000005214$ □

Очевидно, что мы можем формально улучшать метод Эйлера и дальше, беря все больше и больше членов разложения функции в ряд Тейлора. На практике, однако, такой подход не является перспективным из-за быстро возникающих сложностей с вычислением производных высокого порядка (см. семинар по численному дифференцированию). Именно по этой причине широкое распространение получили другие методы численного интегрирования ОДУ, которые дают ту же точность, что и методы с использованием высших членов разложения в ряд Тейлора, но не требуют вычисления производных. Мы начнем их рассмотрение с улучшенного метода Эйлера.

4.2 Улучшенный метод Эйлера

Из приведенного выше примера видно, что данная численная схема является более точной, чем схема Эйлера. Сформулируем улучшенную схему, которая называется *улучшенным методом Эйлера* или *методом Эйлера–Коши*. Для этого подставим определения для y_n и y'_n

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_n, t_n) + O(h^2),$$
$$f'_n = \frac{f(y_{n+1}, t_{n+1}) - f(y_n, t_n)}{h} + O(h)$$

в (4.1) и получим

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left[f(y_n + hf(y_n, t_n), t_{n+1}) + f(y_n, t_n)\right] + O(h^3).$$

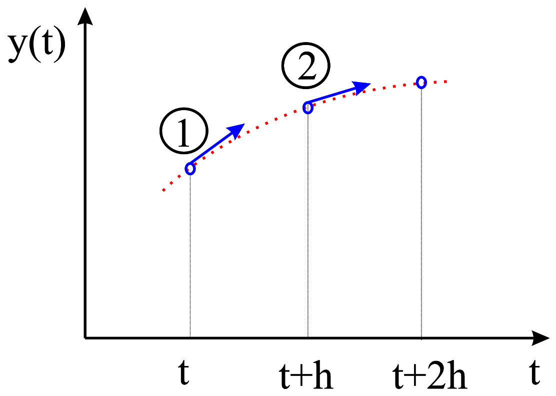
Обозначая,

$$k_1 = f(y_n, t_n), \quad k_2 = f(y_n + hk_1, t_{n+1}),$$

получим:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) + O(h^3). \tag{4.2}$$

Это и есть улучшенный метод Эйлера или метод Эйлера–Коши. Отметим, что по сравнению с методом Эйлера (см. предыдущий семинар), улучшенный метод Эйлера использует для вычисления следующего значения y_{n+1} не одну точку, а две. Это показано на рис. 4.1.



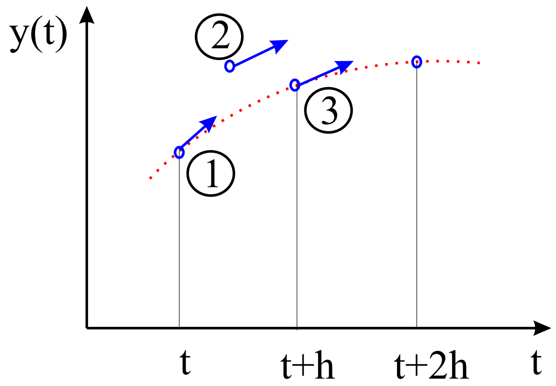


Рис. 4.1: Графическая интерпретация метода Эйлера (слева) и улучшенного метода Эйлера или метода Эйлера–Коши (справа).

4.3 Методы Рунге–Кутты

Методы Рунге–Кутты (РК) были разработаны в попытке получить такую же точность как и в методах, использующих разложение в ряд Тейлора, но без вычисления всех необходимых производных. Как и в улучшенном методе Эйлера, это достигается за счет включения дополнительных точек между узлами расчетной сетки t_n и t_{n+1}. *Метод РК m-го порядка* определяется как

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(t_n, y_n) \\
k_2 &= hf(t_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} k_1) \\
k_3 &= hf(t_n + \alpha_3 h, y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2) \\
\dots &\quad \dots \\
k_m &= hf(t_n + \alpha_m h, y_n + \beta_{m1} k_1 + \dots + \beta_{m,m-1} k_{m-1}) \\
y_{n+1} &= y_n + \gamma_1 k_1 + \gamma_2 k_2 + \dots + \gamma_m k_m,
\end{aligned}$$

где k_j соответствуют промежуточным точкам, которые мы разместили между t_n и t_{n+1}, а α_j, β_{ij} и γ_j подобраны таким образом, чтобы метод максимально совпадал с разложением в ряд Тейлора истинного решения уравнения.

Формулы для методов РК в порядке возрастания порядка методов приведены ниже:

РК 1-го порядка:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x, y) \\ y_{n+1} &= y_n + k_1 \end{aligned} \tag{4.3}$$

РК 2-го порядка:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x, y) \\ k_2 &= hf(x + h, y + k_1) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned} \tag{4.4}$$

РК 3-го порядка:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x, y) \\ k_2 &= hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 &= hf(x + h, y + 2k_2 - k_1) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \end{aligned} \tag{4.5}$$

РК 4-го порядка:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x, y) \\ k_2 &= hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 &= hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_2}{2}) \\ k_4 &= hf(x + h, y + k_3) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned} \tag{4.6}$$

РК 6-го порядка:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x, y) \\ k_2 &= hf(x + \frac{h}{4}, y + \frac{k_1}{4}) \\ k_3 &= hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2}) \\ k_4 &= hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{7} + \frac{2k_2}{7} + \frac{k_3}{14}) \\ k_5 &= hf(x + \frac{3h}{4}, y + \frac{3k_1}{8} - \frac{k_3}{2} + \frac{7k_4}{8}) \\ k_6 &= hf(x + h, y - \frac{4k_1}{7} + \frac{12k_2}{7} - \frac{2k_3}{7} - k_4 + \frac{8k_5}{7}) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{7}{90}(k_1 + k_6) + \frac{16}{45}(k_2 + k_5) - \frac{k_3}{3} + \frac{7k_4}{15}. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Легко заметить, что метод РК первого порядка ($n = 1$) совпадает с уже рассмотренным нами ранее методом Эйлера, а метод РК второго порядка ($n = 2$) — с улучшенным методом Эйлера. Таким образом, эти методы являются частными случаями более общего метода РК. Вывод схем РК более высокого порядка можно продолжить, хотя они становятся все менее практичными. Такие схемы порядка $n = 10$ даже занесены в книгу рекордов Гинеса.

Наиболее практичной и распространенной является схема РК 4-го порядка. В ней используются 4 промежуточные точки для вычисления y_{n+1} (см. рис. 4.2). Часто, когда говорят о методе РК имеют в виду именно метод РК четвертого порядка. Здесь надо отметить, что метод РК называется методом n-го порядка, если его локальная ошибка есть $O(h^{n+1})$. Порядок метода не совпадает в общем случае с числом коэффициентов k_i (или дополнительных точек внутри интервала $[t_n, t_{n+1}]$, используемых для вычисления y_{n+1}), хотя это и так для $n = 2$, $n = 3$ и $n = 4$.

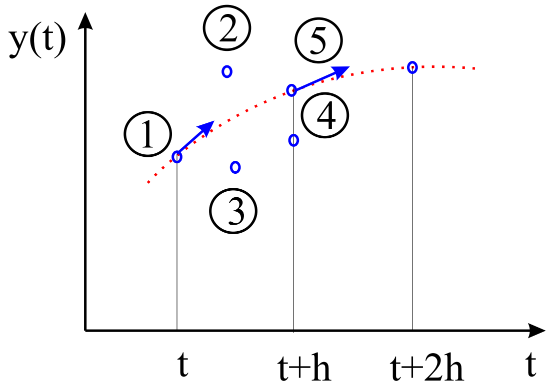


Рис. 4.2: Графическая интерпретация метода Рунге–Кутты 4-го порядка.

Пример. Рассмотрим опять задачу Коши

$$y'(t) = -2ty^2(t), \quad y(0) = 1.$$

Численное решение с использованием метода РК четвертого порядка с шагом $h = 0,5$ дает

$$\begin{aligned} k_1 &= 0 \\ k_2 &= -0,25 \\ k_3 &= -0,19140625 \\ k_4 &= -0,3269119263 \\ y_1 &= 0,7983792623 \end{aligned}$$

и последующие значения

$$\begin{aligned} y_2 &= 0,4997015229 \\ y_3 &= 0,3081669121 \\ y_4 &= 0,2004056722, \end{aligned}$$

так что глобальная ошибка $E_4 = 0,0004056722$.

Повторяя вычисления с шагом $h = 0,25$, получаем

$$\begin{aligned} y_0 &= 1 \\ y_1 &= 0,941154013 \\ \ldots & \quad \ldots \\ y_4 &= 0,5000135525 \\ \ldots & \quad \ldots \\ y_8 &= 0,2000271443 \end{aligned}$$

с глобальной ошибкой $E_8 = 0,0000271443$.

Заметим, что отношение глобальных ошибок есть $14,9 \approx 16$, что подтверждает тот факт, что используемый нами для расчета метод РК является методом *четвертого* порядка $\square$

4.4 Адаптация шага метода

Все обсуждаемые нами методы используют сетку с постоянным шагом, что, с очевидностью, делает их неэффективными, если решение задачи имеет особенность (например, быстрые осцилляции) только на ограниченном диапазоне изменения аргумента, а в остальной области является гладким. В этом случае имеет смысл использовать разный шаг сетки в этих областях. Конечно, если заранее известна область с особенностями, можно именно ее просчитать с меньшим шагом, а в остальной области использовать более крупный шаг. Зачастую, однако, это невозможно определить заранее и в общем виде предпочтительнее использовать какой-либо автоматический алгоритм выбора шага. Один из таких простых алгоритмов мы и обсудим в этом разделе.

Рассмотрим решение одномерного уравнения

$$\frac{dy}{dt} = f(y,t).$$

Пусть $y_h(t_1)$ является численным решением уравнения, расчитанным методом РК четвертого порядка с шагом h, а $y(t_1)$ — точное значение в точке t_1.

Как мы помним, локальная ошибка определяется как

$$e_h = |y_h(t_1) - y(t_1)|$$

и для метода РК 4-го порядка она имеет порядок $O(h^5)$:

$$e_h \approx 16 e_{h/2} \approx \frac{16}{15}(e_h - e_{h/2}) = \frac{16}{15}|y_h(t_1) - y_{h/2}(t_1)|.$$

4.4.1 Алгоритм адаптации

Зададим значение $e_{\max}$ и будем менять шаг h, чтобы $e_h \le e_{\max}$:

1. Возьмем начальную точку $t = t_0$ и начальный шаг $h = t_1 - t_0$.

2. Проинтегрируем уравнение с помощью метода РК 4-го порядка от t до $t + h$ с шагом h и затем с шагом $h/2$. Вычислим

   $$e_h = \frac{16}{15}|y_h(t_1) - y_{h/2}(t_1)|.$$

   Поскольку метод РК 4-го порядка имеет порядок точности $O(h^5)$, на каждом шаге мы можем оценить максимальный шаг, зная $e_{\max}$ и e_h:

   $$\left|\frac{e_{\max}}{e_h}\right| = \left(\frac{h_{\max}}{h}\right)^5.$$

3. Если $h_{\max} < h/2$, то поменять значение шага, $h := 2h_{\max}$, и перейти на шаг 2 алгоритма. В противном случае, $h_{\max} \ge h/2$, принять $y_{h/2}(t+h)$ за правильное значение $y(t+h)$. Если h не менялось, значит мы достигли точки t_1. Если же мы уменьшали шаг, значит мы должны сдвинуться в точку $t := t + h$ и перейти затем на шаг 2 алгоритма.

В описанном алгоритме *адаптации* шага на каждом шаге сетки мы начинаем снова с $h = t_{n+1} - t_n$. Кроме того, чтобы избежать зацикливания алгоритма необходимо также задать минимальный шаг $h_{\min}$, вплоть до которого мы можем уменьшать шаг.

4.5 Историческая справка

Метод Эйлера для решения задачи Коши был описан Эйлером в 1768 г. в его "Интегральном исчислении" (раздел II, глава VII). Рунге в 1895 г., а затем Хойн (1900) построили новые методы для решения задачи Коши, включив один или два дополнительных шага в схему Эйлера. Кутта сформулировал в 1901 г. общую схему методов, называемых теперь *методами Рунге–Кутты*.

4.6 Задание для практической работы

Чисто гармонические колебания практически не встречаются в природе — даже, если они напоминают гармонические, все равно небольшой ангармонизм (нелинейность) колебаний имеет место. Аналитический анализ ангармонических колебаний возможен, как правило, только для слабо нелинейных колебаний и даже в этом случае представляет определенную сложность. При моделировании же на компьютере анализ гармонического осциллятора не отличается от анализа ангармонического осциллятора, причем степень нелинейнойсти также не играет роли.

Для последующего анализа рассмотрим для простоты одномерные колебания осциллятора массы $m = 1$ и пренебрежем силой трения. Пусть движение осциллятора происходит в потенциале возвращающей силы вида

$$V(x) = A\frac{|x|^{B+1}}{(B+1)}, \tag{4.8}$$

который показан на рис. 4.3 для различных значений B. Возвращающая сила при этом имеет вид

$$K(x) = -A|x|^B \frac{x}{|x|}. \tag{4.9}$$

С учетом возвращающей силы и дополнительно действующей на осциллятор гармонической вынуждающей силы на частоте ω уравнение колебаний осциллятора будет иметь вид:

$$-m\frac{d^2x}{dt^2} - A|x|^B \frac{x}{|x|} + C\cos\omega t = 0. \tag{4.10}$$

Для численного интегрирования уравнения (4.10) необходимо свести его к двум ОДУ первого порядка:

$$\frac{dy_1(t)}{dt} = f_1\left(y_1(t), y_2(t); t\right), \tag{4.11}$$

$$\frac{dy_2(t)}{dt} = f_2\left(y_1(t), y_2(t); t\right), \tag{4.12}$$

где

$$f_1\left(y_1(t), y_2(t); t\right) = y_2(t), \tag{4.13}$$

$$f_2\left(y_1(t), y_2(t); t\right) = -\frac{A}{m}|y_1(t)|^B \frac{y_1(t)}{|y_1(t)|} + \frac{C}{m}\cos\omega t. \tag{4.14}$$

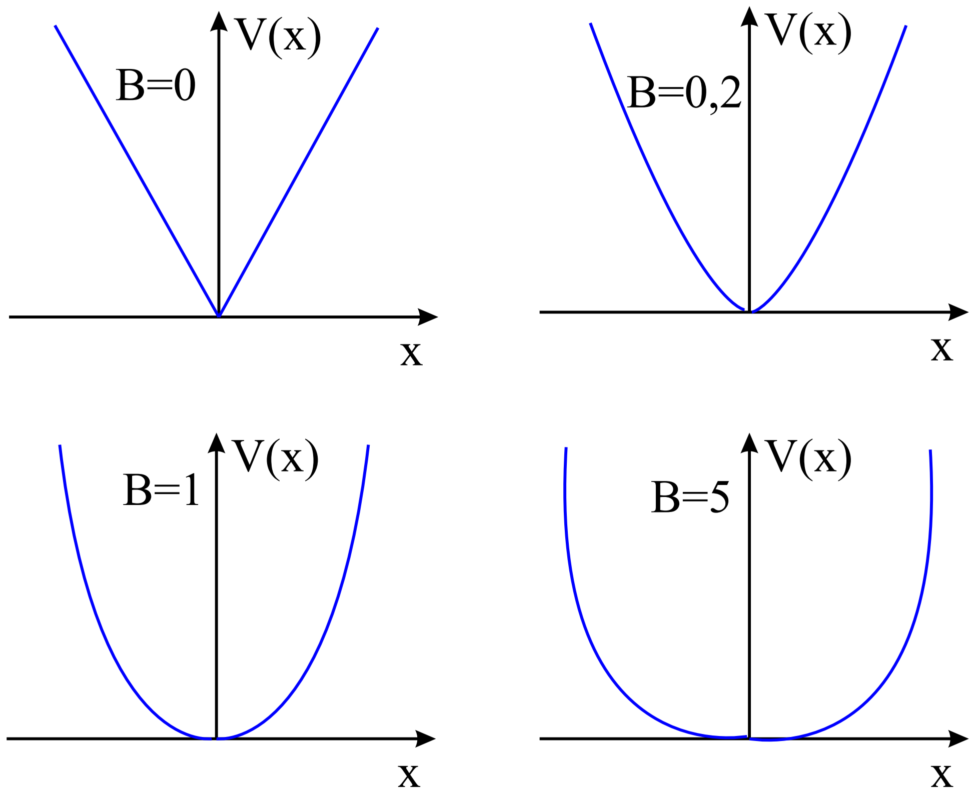


Рис. 4.3: Потенциал $V(x)$ при различных значения параметра B. Значение $B = 1$ соответствует случаю гармонического потенциала.

Задание состоит в том, чтобы исследовать численно с использованием метода РК четвертого порядка поведение осциллятора, описываемого уравнением (4.10) при различных параметрах A, B, C, ω и различных начальных условиях (задача Коши). Необходимо предусмотреть интерактивный ввод параметров задачи, ее начальных условий, временного диапазона интегрирования и требуемой точности вычислений. Программа должна выводить на экран наряду с потенциалом $V(x)$ график зависимости $x(t)$ и траекторию движения осциллятора на фазовой плоскости $\{p, x\}$.

Упражнение 1

Протестируйте точность метода РК четвертого порядка для свободных колебаний в отсутствие внешней вынуждающей силы ($C = 0$) при $B = 1$ (гармонические колебания) и $B = 5$ (сильно ангармонические колебания). Обратите внимание на то обстоятельство, что при большом шаге сетки можно получить затухающее решение. Почему?

Упражнение 2

Проанализируйте численные решения для ангармонических колебаний, рассчитанные для различных значений B. Как изменяется форма колебаний с увеличением B?

Упражнение 3

Включите вынуждающую силу ($C \neq 0$) и изучите явление резонанса для гармонического и ангармонического осциллятора.

Литература

[1] Р. П. Федоренко, *Введение в вычислительную физику*. — М.: Изд-во Моск. физ.-техн. ин-та, 1994.

[2] Х. Гулд, Я. Тоболчик, *Компьютерное моделирование в физике*. В 2-х частях. Пер. с англ. — М.: Мир, 1990.

[3] Д. В. Хеерман, *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике*. Пер. с англ. — М.: Наука, 1990.

[4] К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*. Пер. с англ. — М.: Наука, 1995.

[5] Н. С. Бахвалов, *Численные методы*. — М.: Наука, 1975.

[6] Н. Н. Калиткин, *Численные методы*. — М.: Наука, 1978.

[7] Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров*. — М.: Физматгиз, 1968.

[8] А. Н. Матвеев, *Механика и теория относительности*. — М.: Высш. шк. 1986.