9.4 Чисельні методи розв'язання диференціальних рівнянь

Переважна більшість об'єктів є нестаціонарними та працюють в динамічних режимах, тобто вони змінюються у часі під впливом внутрішніх і зовнішніх чинників. Як моделі динаміки таких об'єктів використовуються диференціальні рівняння. Постановка задачі розв'язання диференціальних рівнянь викладена в 8 розділі цієї книги. Там же наведено аналітичні методи розв'язання диференціальних рівнянь. Але аналітичні методи дозволяють знайти розв'язок невеликої кількості типів рівнянь, тому їх застосування є вельми обмеженим. На відміну від них чисельні методи дозволяють розв'язувати значно більшу кількість задач. В основі застосування чисельних методів лежить дискретизація відрізка $[a,b]$ з кроком h, в результаті чого формується послідовність вузлів $x_k=a+h\cdot k$, $k=\overline{0,n}$, $n=\dfrac{b-a}{h}$. Питома функція $y(x)$ знаходиться у вигляді таблично заданої функції, значення якої розраховуються у виділених вузлах.

9.4.1 Методи розв'язання задачі Коші

Нехай дано диференціальне рівняння першого порядку

$$\frac{dy}{dx}=f(x,y). \tag{9.20}$$

Потрібно знайти функцію на відрізку від $x=a$ до $x=b$, що задовольняє, як рівняння (9.20), так і початкову умову $y(a)=y_0$ (при цьому завжди припускається, що існує єдиний розв'язок на всьому відрізку).

Основою чисельних методів розв'язання диференціальних рівнянь є розкладання функції y в ряд Тейлора в околі початкової точки

$$y(x_0+h)=y(x_0)+hy'(x_0)+\frac{1}{2}h^2y''(x_0)+\ldots\frac{1}{k!}h^ky^{(k)}(x_0)\ldots,$$

де h – відстань (крок) між початковою точкою x_0 і точкою $x_1=x_0+h$, в якій відшукується розв'язок.

В різних методах враховується різна кількість членів розкладу (в багатокрокових методах в поєднанні з інтерполяційними формулами), що визначає точність обчислень. При використанні цих методів на комп'ютерах слід розрізняти похибки округлення через обмеженість кількості значущих цифр; похибка зрізання (обмеження) – методична похибка, що пов'язана з апроксимацією розв'язків скінченними рядами, замість нескінченних, наприклад, рядами Тейлора з обмеженою кількістю членів.

Внаслідок цих причин виникають два види похибок:

– локальна – сума похибок, що вносяться в обчислювальний процес на конкретному кроці;

– глобальна (сумарна) – різниця між точним і обчисленим значеннями, яка містить так звану похибку розповсюдження внаслідок накопичення помилок на попередніх етапах обчислення.

Порядок методу дорівнює p, якщо існує таке додатне число c

$$\Delta \leq ch^{p+1}, \tag{9.21}$$

де Δ – локальна помилка; h – крок дискретизації.

Число c не залежить від номера кроку і його величини, а визначається похідними і довжиною інтервалу. При апроксимації розв’язання рядами Тейлора воно зв’язане зі степенем членів ряду, які відкидаються.

Методи розв’язання задачі Коші поділяють на однокрокові та багатокрокові.

В однокрокових методах для знаходження наступної точки на кривій $y = f(x)$ потрібна інформація лише про один попередній крок (методи Ейлера і Рунге – Кутта).

В багатокрокових методах (прогнозу і корекції) для знаходження наступної точки на кривій $y = f(x)$ потрібна інформація більш ніж про одну з попередніх точок. Щоб отримати достатньо точне чисельне значення часто використовується ітераційна процедура (наприклад, в методах Мілна–Адамса, Башфорта, Хеммінга).

9.4.1.1 Однокрокові методи

Найбільш простим однокроковим методом, який потребує мінімальних витрат обчислювальних ресурсів, але дає змогу обчислювати результат із порівняно низькою точністю, є метод Ейлера.

В цьому методі для оцінювання наступної точки на кривій $y=f(x)$ використовується лише один лінійний член в формулі Тейлора,

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0),$$

де $y'(x_0)$ визначається з початкового рівняння.

Цей процес можна розповсюдити на наступні кроки:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n).$$

Метод Ейлера є методом першого порядку $(p = 1)$

$$\Delta \leq ch^2,$$

де $c = (M_1 + M_0 M_2)/2,$ M_1, M_2 – визначаються як

$$M_0 \geq |f(x, y)|,$$
$$M_1 \geq \left|\frac{\partial f(x, y)}{\partial x}\right|,$$
$$M_2 \geq \left|\frac{\partial f(x, y)}{\partial y}\right|$$

для всіх $x \in [a,\ b]$ і $y = y(x)$.

Метод Ейлера, крім значної похибки зрізання, часто буває нестійким (малі локальні помилки призводять до значного збільшення глобальної).

Цей метод можна вдосконалити різними способами. Найбільш відомі два з них: виправлений метод Ейлера і модифікований метод Ейлера (в літературі зустрічаються інші назви цих методів, наприклад, модифікований метод Ейлера й удосконалений метод ламаних).

Ітераційні формули для цих методів мають вигляд, відповідно:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left[f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hy_n^*)\right],$$

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(x_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{h}{2} y_n^*\right),$$

де $y_n^* = f(x_n, y_n)$.

Геометрична інтерпретація зображена на рис. 9.12, 9.13.

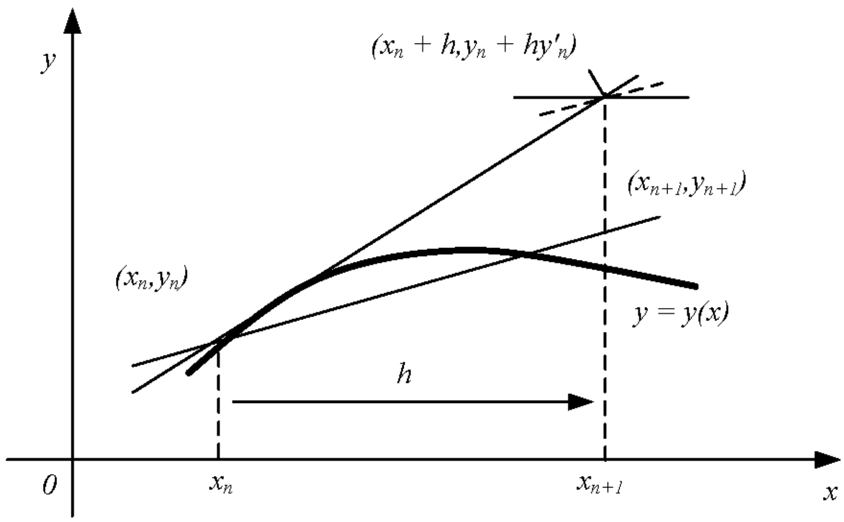

Рисунок 9.12 – Виправлений метод Ейлера

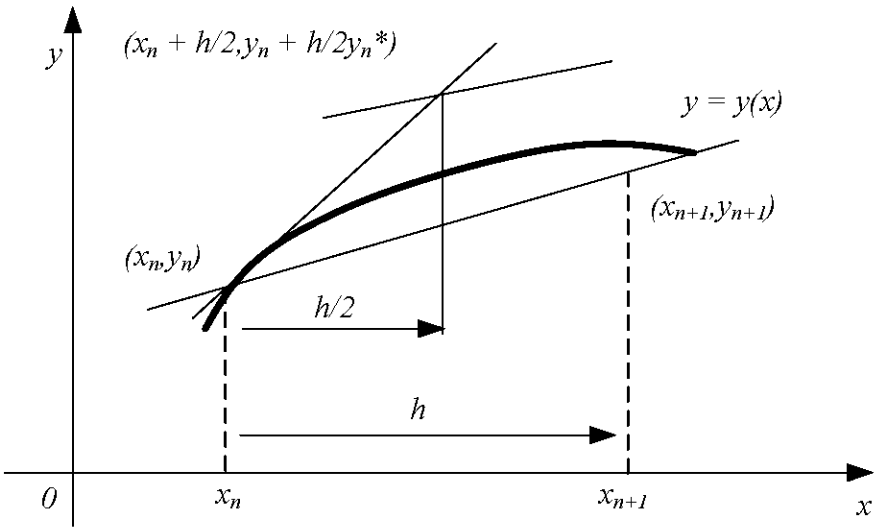

Рисунок 9.13 – Модифікований метод Ейлера

Це методи другого порядку, їх похибка має третій степінь, що досягається покращенням апроксимації похідної. Ідея полягає у спробі зберегти або оцінити член другого порядку у формулі Тейлора. Однак збільшення точності вимагає додаткових витрат машинного часу на обчислення y_n^*. Ще більш висока точність може бути досягнута при обчисленні вищих похідних і збереженні більшої кількості членів ряду Тейлора. Такими методами є методи Рунге – Кутта.

Принцип, на якому побудований модифікований метод Ейлера, можна пояснити, користуючись рядом Тейлора і зберігаючи в ньому член з h^2. Апроксимація другої похідної $y''(x_0)$ здійснюється кінцевою різницею

$$y''(x_0) = \frac{\Delta y'}{\Delta x} = \frac{y'(x_0 + h) - y'(x_0)}{h}.$$

Аналогічно обчисленню другої похідної в кінцево-різницевому вигляді можна обчислити більш високі похідні: значення n-ї за значеннями попередньої $(n$-1)-ї.

Метод Рунге–Кутта дає набір формул для обчислення координат внутрішніх точок, які потрібні для реалізації цієї ідеї. Оскільки існує ряд способів знаходження цих точок, то метод Рунге–Кутта об’єднує цілий клас методів для розв’язання диференціальних рівнянь першого порядку.

Найбільш розповсюджений класичний метод четвертого порядку точності:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3}{6},$$

де

$$k_0 = hf(x_n, y_n), \quad k_1 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{k_0}{2}\right);$$
$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{k_1}{2}\right); \quad k_3 = hf(x_n + h; y_n + k_2).$$

Метод Ейлера і його модифікації ще називають методами Рунге–Кутта першого і другого порядку. Метод Рунге–Кутта має значно більшу точність, що дозволяє збільшити крок розв'язання. Його максимальну величину визначає припустима похибка. Такий вибір часто здійснюється автоматично і входить як складова частина в алгоритм, побудований за методом Рунге–Кутта.

Будь-яку з формул однокрокових методів можна використовувати для розв'язання систем диференціальних рівнянь і диференціальних рівнянь вищих порядків, які часто використовуються для опису складних динамічних процесів. Найбільше розповсюдження отримали системи диференціальних рівнянь першого порядку:

$$\begin{cases} y_1'(x) = f_1(x, y_1, ..., y_n) \\ y_2'(x) = f_2(x, y_1, ..., y_n) \\ ... \\ y_n'(x) = f_n(x, y_1, ..., y_n) \end{cases}.$$

Для отримання однозначного розв'язку цієї системи задають початкові умови:

$$\begin{cases} y_1(a) = y_1^0 \\ y_2(a) = y_2^0 \\ ... \\ y_n(a) = y_n^0 \end{cases}.$$

У векторному вигляді ця система записується так:

$$\begin{cases} \bar{y}'(x) = \bar{f}(x, \bar{y}) \\ \bar{y}(a) = \bar{y}^0 \end{cases}.$$

У формулах однокрокових методів для розв'язання такої задачі Коші потрібно лише перейти до векторної форми. Наприклад, формули методу Рунге–Кутта 4-го порядку розв'язання задачі Коші для системи *n* диференціальних рівнянь першого порядку мають вигляд:

$$y_k(x_{i+1}) = y_k(x_i) + \frac{1}{6}\left(\eta_{1k}{}^i + 2\eta_{2k}{}^i + 2\eta_{3k}{}^i + \eta_{4k}{}^i\right),$$

де $\eta_{1k}^i = h \cdot f_k(x_i, y_1(x_i),..., y_n(x_i))$,

$$\eta_{2k}^i = h \cdot f_k(x_i + \frac{h}{2}, y_1(x_i) + \frac{\eta_{11}^i}{2},..., y_n(x_i) + \frac{\eta_{1n}^i}{2}),$$

$$\eta_{3k}^i = h \cdot f_k(x_i + \frac{h}{2}, y_1(x_i) + \frac{\eta_{21}^i}{2},..., y_n(x_i) + \frac{\eta_{2n}^i}{2}),$$

$$\eta_{4k}^i = h \cdot f_k(x_i + h, y_1(x_i) + \eta_{31}^i,..., y_n(x_i) + \eta_{31}^i),$$

$k = \overline{1,n}$ – номер рівняння,

$i = \overline{0,m}$ – номер вузла, $x_0 = a$.

Задачу Коші для диференціального рівняння порядку *n* можна звести до задачі Коші для системи *n* диференціальних рівнянь першого порядку.

Нехай задача Коші має вигляд:

$$\begin{cases} y^{(n)}(x) = f(x, y, y',..., y^{(n-1)}) \\ y(a) = y_0 \\ ... \\ y^{(n-1)}(a) = y_{n-1} \end{cases}.$$

Зробимо заміну:

$$\begin{cases} z_1(x) = y'(x) \\ z_2(x) = y^{(2)}(x) \\ ... \\ z_{n-1}(x) = y^{(n-1)}(x) \end{cases}.$$

Як результат отримаємо систему диференціальних рівнянь першого порядку:

$$\begin{cases} y'(x) = z_1(x) \\ z_1{}'(x) = z_2(x) \\ ... \\ z_{n-2}{}'(x) = z_{n-1}(x) \\ z_{n-1}{}'(x) = f(x, y(x), z_1(x),..., z_{n-1}(x)) \end{cases}.$$

Початкові умови приймуть вигляд:

$$\begin{cases} y(x_0) = y_0 \\ z_1(x_0) = y_1 \\ \dots \\ z_{n-1}(x_0) = y_{n-1} \end{cases}.$$

Як приклад розглянемо розв'язання звичайного диференціального рівняння другого порядку:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = g\left(x, y\frac{dy}{dx}\right).$$

Нехай $z = \frac{dy}{dx}$, тоді $\frac{dz}{dx} = \frac{d^2y}{dx^2}$; і система набуває вигляду

$$\begin{cases} \frac{dz}{dx} = g(x, y, z), \\ \frac{dy}{dx} = f(x, y, z), \end{cases}$$

де $f(x, y, z,) = z$.

Задача Коші в цьому випадку містить дві початкових умови:

$$y(x_0) = y_0; \quad z(x_o) = y'(x_0) = z_0.$$

Формули Рунге – Кутта для цього випадку мають вигляд:

$$y_{n+1} = y_n + k \quad \text{і} \quad z_{n+1} = z_n + l,$$

де $\quad k = \frac{k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3}{6}, \qquad l = \frac{l_0 + 2l_1 + 2l_2 + l_3}{6},$

$$k_0 = hz_n, \qquad l_0 = hg(x_n, y_n, z_n),$$

$$k_1 = h\left(z_n + \frac{l_0}{2}\right), \qquad l_1 = hg\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_0}{2}, z_n + \frac{l_0}{2}\right),$$

$$k_2 = h\left(z_n + \frac{l_1}{2}\right), \qquad l_2 = hg\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}, z_n + \frac{l_1}{2}\right),$$

$$k_3 = h(z_n + l_2), \qquad l_3 = hg(x_n + h, y_n + k_2, z_n + l_2).$$

Раніше було відзначено, що помилка зрізання при використанні методу Рунге–Кутта n-го порядку $\Delta \le ch^{n+1}$. Обчислення верхніх границь для коефіцієнта c є складною задачею, пов’язаною з необхідністю оцінювання ряду додаткових параметрів. Існує декілька способів для оперативного обчислення c. Найбільшого поширення набув екстраполяційний метод Річардсона (ще його називають методом Рунге), коли послідовно знаходять значення y_n з кроком h і з кроком $\frac{h}{2}$, а після цього прирівнюють отримані величини та визначають c з рівняння:

$$y_n^{(h)} + ch^{n+1} = y_n^{\left(\frac{h}{2}\right)} + c\left(\frac{h}{2}\right)^{n+1},$$

що відповідає точному значенню y_n.

Отримаємо оціночне співвідношення:

$$c = \frac{2^{n+1}}{2^{n+1}-1}\frac{\left[y_n^{\left(\frac{h}{2}\right)} - y_n^{(h)}\right]}{h^{n+1}}.$$

Можна виділити загальні риси однокрокових методів.

1. Щоб отримати інформацію у новій точці, потрібно мати дані лише в одній попередній точці. Цю властивість називають “самостартуванням” (*selfstarting*).

2. В основі всіх однокрокових методів лежить розкладання функції в ряд Тейлора, в якому зберігаються члени, що містять степені до k включно. Ціле число k називається порядком методу. Локальна похибка на одному кроці має порядок k+1. Для обчислення глобальної(повної) похибки треба додавати похибки на всіх попередніх кроках.

3. Всі однокрокові методи не вимагають обчислення похідних – обчислюється лише сама функція, але можуть вимагатися її значення в декількох проміжних точках.

4. Властивість “самостартуванням” дозволяє легко змінювати розмір кроку обчислення.

9.4.1.2 Багатокрокові методи

В цих методах для обчислення значення нової точки використовується інформація про декілька значень, що отримані раніше. Для цього використовуються дві формули: прогнозу і корекції. Алгоритм обчислення для всіх методів прогнозу і корекції однаковий та зображений на рис. 9.14. Вказані методи відрізняються лише формулами і не мають властивості “самостартуванням”, оскільки вимагають знання попередніх значень. Перш ніж використовувати метод прогнозу і корекції, обчислюють початкові дані за допомогою будь-якого однокрокового методу. Часто для цього використовують метод Рунге–Кутта.

Обчислення виконують таким чином. Спочатку за формулою прогнозу та початковим значенням змінних знаходять значення $y_{n+1}^{(0)}$. Індекс (0) означає, що значення, яке прогнозується, є одним із послідовності значень y_{n+1} в міру їх уточнення. За значенням $y_{n+1}^{(0)}$ за допомогою початкового диференціального рівняння (9.20) знаходять похідну $y'^{(0)}_{n+1} = f\left(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}\right)$, яка після цього підставляється у формулу корекції для обчислення уточненого значення $y_{n+1}^{(j+1)}$. В свою чергу, за $y_{n+1}^{(j+1)}$ знаходять похідну $y'^{(j+1)}_{n+1} = f\left(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j+1)}\right)$. Якщо це значення не достатньо близьке до попереднього, то воно вводиться у формулу корекції і ітераційний процес продовжується. У випадку близькості значень похідних визначається y_{n+1}, яке і є остаточним. Після цього процес повторюється на наступному кроці, на якому обчислюється y_{n+2}.

Зазвичай при виведенні формул прогнозу і корекції розв'язання рівняння розглядають як процес наближеного інтегрування, а самі формули отримують за допомогою методів чисельного інтегрування.

Якщо диференціальне рівняння $y' = f(x, y)$ проінтегрувати в інтервалі значень від x_n до x_{n+k}, то результат матиме вигляд

$$y(x_{n+k}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+k}} f(x, y)dx.$$

Цей інтеграл не можна обчислити безпосередньо, тому що $y(x)$ – невідома функція. Вибір методу наближеного інтегрування і буде визначати метод розв'язання диференціальних рівнянь. На етапі прогнозу можна використовувати будь-яку формулу чисельного інтегрування, якщо до неї не входить попереднє значення $y'(x_{n+1})$.

В таблицю 9.3 зведені найбільш розповсюджені формули прогнозу і корекції. Для більшості методів прогнозу і корекції оцінюють похибку, користуючись таким співвідношенням:

$$\Delta \le \frac{1}{5}\left[y_n^{(0)} - y_n^{(j)}\right]$$

Мірою похибки є $y_n^{(j)}$, що входить до алгоритму рис. 9.14.

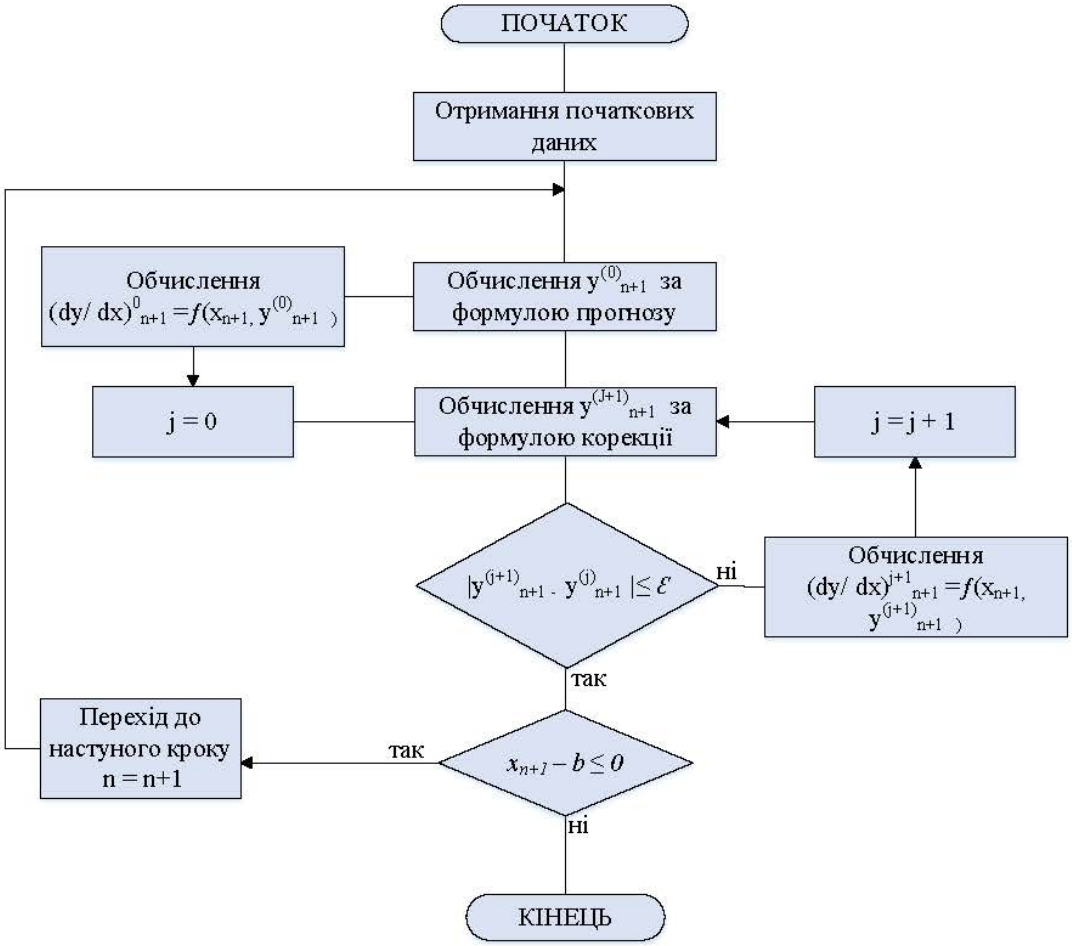

Рисунок 9.14 – Алгоритм методів прогнозу та корекції

Часто в довідниках наводяться більш точні формули для оцінювання похибки багатокрокових методів.

При виборі величини кроку можна скористатися умовою:

$$h < \frac{2}{M_2},$$

де $M_2 = \left|\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{\max}$.

Виконання цієї умови необхідно для збіжності ітераційного процесу відшукання розв'язку.

Таблиця 9.3 – Найбільш поширені формули прогнозу і корекції

Метод	**Формула прогнозу**	**Формула корекції**
Мілна	$y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4}{3}h*$ $*(2y'_n - y'_{n-1} + 2y'_{n-2}),$ $\Delta \le \frac{28}{90}h^5 y^{(v)},$ $\text{де } y^v - \text{п'ята похідна } f(x,y)$	$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{1}{3}h*$ $*(y'_{n+1} + 4y'_n + y'_{n-1}),$ $\Delta \le \frac{1}{90}h^5 y^{(v)}$
Адамса – Башфорта	$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{24}h*$ $*(55y'_n - 59y'_{n-1} + 37y'_{n-2} - 9y'_{n-3}),$ $\Delta \le \frac{251}{720}h^5 y^{(v)}$	$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{24}h*$ $*(9y'_{n+1} - 19y'_n - 5y'_{n-1} + y'_{n-2}),$ $\Delta \le \frac{19}{720}h^5 y^{(v)}$
Хеммінга	$y^{(0)}_{n+1} = y_{n-3} + \frac{3}{4}h*$ $*(2y'_n - y'_{n-1} + 2y'_{n-2})$ Уточнення прогнозу $\bar{y}^{(0)}_{n+1} = y^{(0)}_{n+1} +$ $+\frac{112}{121}\left(y_n - y^{(0)}_n\right)*$ $*\left[\bar{y}^{(0)}_{n+1}\right]' = f\left(x_{n+1}, \bar{y}^{(0)}_{n+1}\right)$	$y^{(j+1)}_{n+1} = \frac{1}{8}*(9y_n - y_{n-2}) +$ $+\frac{3}{8}h*\left(\left[\bar{y}^{(j)}_{n+1}\right]' + 2y'_n - y'_{n-1}\right)$
	$y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4}{3}h*$ $*(2y'_n - y'_{n-1} + 2y'_{n-2}),$ $\Delta \le \frac{28}{90}h^5 y^{(v)}$	$y_{n+1} = \frac{1}{8}*$ $*[9y_n - y_{n-2} + 3h(y'_{n+1} + 2y'_n - y_{n-1})],$ $\Delta \le \frac{1}{40}h^5 y^{(v)}$

Однак у багатьох практичних випадках складність оцінювання величини M_2 приводить до того, що найбільш зручним для вибору кроку є спосіб, побудований на оцінюванні Δ у процесі обчислень і зменшенні кроку, якщо похибка надто велика. При цьому необхідно враховувати, що оптимальне число ітерацій дорівнює двом.

Основні особливості, що притаманні багатокроковим методам:

1) за допомогою цих методів не можна розпочати розв'язання задачі, оскільки для їх використання необхідна інформація про значення функції в кількох точках;

2) можна отримати оцінку похибки зрізання, не звертаючись до обчислення додаткових величин;

3) методи прогнозу і корекції не дозволяють легко змінювати крок обчислень, для цього необхідно весь ітераційний процес починати спочатку.

9.4.1.3 “Жорсткі” задачі

Існують звичайні диференціальні рівняння, для яких складно отримати задовільний розв’язок з використанням описаних вище методів. Виникнення таких задач пов’язано з поняттям *сталої часу* диференціального рівняння, – проміжком часу, коли змінна частина розв’язку зменшується в *e* разів(історично склалося, що цей параметр називається “*сталою часу*”, хоча аргумент може бути і не часової природи). Рівняння порядку *n* має *n* складових і кожна з них має свою постійну часу. Якщо будь-які дві з них суттєво(на практиці в сто і більше разів) різняться за величиною або яка-небудь з них достатньо мала порівняно з інтервалом часу, на якому відшукується розв’язок, то задача називається “жорсткою”, і її практично неможливо якісно розв’язати звичайними чисельними методами. В таких випадках крок повинен бути достатньо малим, щоб можна було враховувати приріст складових розв’язку, які найбільш швидко змінюються, навіть після того, як їх внесок стане практично непомітним. Але зменшення кроку призводить до збільшення витрат часу обчислень і накопиченню помилок. Розроблені спеціальні методи для розв’язування таких задач, які часто зустрічаються в теорії автоматичного керування.

Найбільш простим є так званий обернений метод Ейлера, в якому розв’язок знаходиться з рівняння, яке містить y_{n+1} у неявному вигляді:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_{n+1}).$$

На практиці “жорсткими” можуть виявитися рівняння, у яких коефіцієнти при похідних суттєво (в сто і більше разів) відрізняються один від одного.

9.4.1.4 Загальні висновки щодо вибору методу чисельного розв’язання задачі Коші

Порівнюючи ефективність однокрокових і багатокрокових методів, виділяють такі особливості:

1. Однокрокові методи на відміну від багатокрокових дозволяють одразу почати розв’язання задачі (“самостартування”) і легко змінювати крок в процесі обчислень.

2. При використанні багатокрокових методів існує можливість оцінювання похибки на кроці, тому значення кроку обирається оптимальним, а в однокрокових – з деяким запасом, що знижує швидкодію.

3. При однаковій точності багатокрокові методи вимагають меншого обсягу обчислень. Наприклад, в методі Рунге–Кутта четвертого порядку точності доводиться обчислювати чотири значення функції на кожному кроці, а

для забезпечення збіжності методу прогнозу і корекції того ж порядку точності – достатньо двох.

4. Багатокрокові методи вимагають більшого обсягу пам'яті комп'ютерів, тому що оперують більшою кількістю початкових даних.

Перед початком розв'язання задачі необхідно провести перевірку на "жорсткість" і у випадку позитивного результату використати спеціальні методи. Якщо задача Коші дуже складна, то зазвичай перевага надається методу прогнозу і корекції, який має до того ж більшу швидкодію. Початок розв'язання задачі при цьому проводиться за допомогою однокрокових методів. Якщо для обчислення чергового значення y_i вимагається більш ніж дві ітерації або якщо помилка зрізання дуже велика, то необхідно зменшити крок h. З іншого боку, при дуже малій похибці зрізання можна збільшити крок, тим самим підвищити швидкодію, але при цьому весь процес розв'язання треба починати спочатку. Інколи на практиці вимагається мінімізувати час підготовки задачі до розв'язання. Тоді доцільно використовувати методи Рунге–Кутта.

На закінчення слід відзначити, що велике значення для ефективного розв'язання задачі мають досвід, інтуїція і кваліфікація користувача як при постановці задачі, так і в процесі вибору методу розробки алгоритму і програми для ЕОМ. При цьому часто зручно користуватись вже готовими програмними засобами, які є в наявності (наприклад, в пакетах MAPLE, MATHEMATIKA).

9.4.2 Методи розв'язання крайових задач

Методи розв'язання крайових задач розглянемо на прикладі звичайного диференціального рівняння другого порядку

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(x, y, \frac{dy}{dx})$$

при граничних умовах $y(a) = A$ $y(b) = B$. Методи розв'язання крайових задач розділяють на дві групи: методи, що побудовані на заміні розв'язання крайової задачі розв'язанням декількох задач Коші (методи "стрілянини") та різницеві методи.

9.4.2.1 Метод "стрілянини"

Якщо звичайне диференціальне рівняння другого порядку – лінійне, то воно має вигляд:

$$y'' = f_1(x)y' + f_2(x)y + f_3(x)$$

причому $y(a) = A$, $y(b) = B$.

Крайову задачу можна звести до задачі Коші введенням додаткової початкової умови, крім $y(a)=A$ вводиться $y'(a) = \alpha_1$.

Знайшовши розв'язок $y_1(x)$, можна поставити іншу початкову умову $y'(a)=\alpha_2$ і отримати інший розв'язок $y_2(x)$. Якщо $y_1(b)=\beta_1$ а $y_2(b)=\beta_2$, причому $\beta_1 \neq \beta_2$, то розв'язок

$$y(x)=\frac{1}{\beta_1-\beta_2}\left[(B-\beta_2)y_1(x)+(\beta_1-B)y_2(x)\right]$$

буде задовольняти обидві початкові умови.

При розв'язуванні нелінійного звичайного диференціального рівняння методами "стріляннини" крайова задача зводиться до розв'язування декількох задач Коші, послідовно вводячи в початкові умови значення α:

$$y(a)=A \ \text{ і } \ y'(a)=\alpha$$

і намагаючись знайти розв'язок, який задовольняє умову $y(b)=B$.

При цьому алгоритм досягнення мети будується на основі одного з методів оптимізації. Однак цей шлях розв'язання задачі пов'язаний з великими обчислювальними труднощами, і тому у випадку нелінійних диференціальних рівнянь перевага надається різницевим методам.

9.4.2.2 Різницеві методи

Апарат різницевих методів (*difference methods*) являє собою потужний засіб чисельного розв'язування звичайних диференціальних рівнянь і диференціальних рівнянь у частинних похідних. У його основі лежить подання незалежного аргументу на відрізку $[a, b]$ у вигляді дискретної множини точок x_i , $i=0,\ldots,n$, $x_0=a$, $x_n=b$, яка називається сіткою. В цій книзі вже розглядалося в 7 розділі застосування різницевих методів до розв'язання задачі інтерполяції.

Найбільше поширення отримала рівномірна сітка з кроком $x_i-x_{i-1}=h$. При цьому замість неперервної функції $f(x)$ розглядається сіткова функція $y_i=f(x_i)$. Аналогічно проводиться дискретизація функції багатьох змінних, наприклад, двох:

$$x_{ij}, \ i=0,\ldots,n, \ \ j=0,\ldots,m, \ \ y_{ij}=f(x_{ij}).$$

Крім найбільш розповсюдженої прямокутної сітки використовують полярну, трикутну, скошену та інші, зображені на рис. 9.15. Багатовимірні сітки знаходять застосування в задачах з частинними похідними за декількома незалежними змінними.

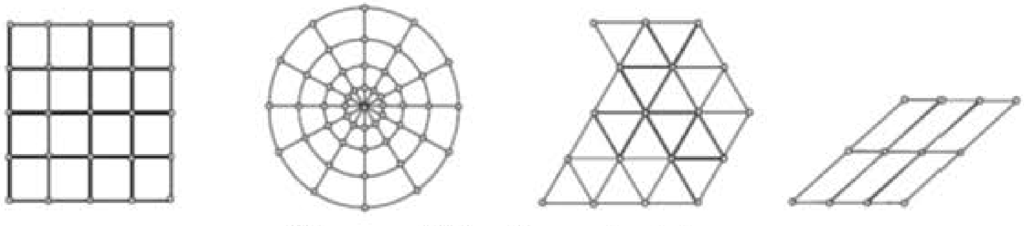

Рисунок 9.15 – Двовимірні сітки

Розв'язання задачі різницевими методами складається з двох етапів:

– отримання дискретної (різницевої) апроксимації диференціальних рівнянь і дослідження отриманих при цьому різницевих рівнянь;

– розв'язання різницевих рівнянь.

При отриманні різницевих схем важливу роль відіграє загальна вимога, щоб різницева схема якомога краще наближала основні властивості початкового диференціального рівняння. Такі різницеві схеми можна отримати за допомогою варіаційних принципів та інтегральних співвідношень. Оцінювання точності різницевої схеми зводиться до вивчення похибки апроксимації та стійкості. Сіткову функцію можна розглядати як функцію цілочислового аргументу

$$y(i)=y_i\ ,\quad i=0,\pm1,\pm2,\ \dots\ .$$

Для y_i можна ввести операції, які є дискретним (різницевим) аналогом операцій диференціювання та інтегрування.

Аналогом першої похідної є різниці першого порядку:

$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$ – права різниця;

$\nabla y_i = y_i - y_{i-1}$ – ліва різниця;

$\delta y_i = \dfrac{1}{2}(\Delta y_i + \nabla y_i) = \dfrac{1}{2}(y_{i+1} - y_{i-1})$ – центральна різниця.

Зауважимо, що $\Delta y_i = \nabla y_{i+1}$.

Далі можна записати різниці другого порядку

$$\Delta^2 y_i = \Delta(\Delta y_i) = \Delta(y_{i+1} - y_i) = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i,$$
$$\Delta\nabla y_i = \Delta(y_i - y_{i-1}) = (y_{i+1} - y_i) - (y_i - y_{i-1}) = y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1},$$

тобто $\Delta^2 y_i = \Delta\nabla y_{i+1}$.

Аналогічно визначається різниця m-го порядку:

$$\Delta^m y_i = \Delta\left(\Delta^{m-1} y_i\right).$$

Звідси виходить, що

$$\sum_{j=k}^{i} \Delta y_i = y_{i+1} - y_k\ ,\qquad \sum_{j=k}^{i} \nabla y_i = y_i - y_{k-1}.$$

На множині вузлів сітки, яка називається шаблоном замінимо неперервний диференціальний оператор Ly різницевим оператором $L_h y$.

Наприклад, різницеві оператори для першої похідної на трьох вузлах сітки $(x\text{-}h,\ x,\ x+h)$

$$L_h^+ y = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} = y_x^+,$$
$$L_h^- y = \frac{y(x) - y(x-h)}{h} = y_x^-,$$
$$L_h^0 y = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} = y_x^0$$

–це права, ліва і центральна, відповідно, різницеві похідні.

Аналогічно для другої похідної

$$L_h y = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} = \frac{y_x^+(x) - y_x^-(x)}{h} =$$
$$= \frac{y_x^-(x+h) - y_x^-(x)}{h} = y_{xx}^-(x).$$

При розв'язуванні крайової задачі записуються різницеві рівняння для всіх n вузлів області змінення $x \in [a,b]$. Враховуючи дві граничні умови $y_0=y(a)$ та $y_n=y(b)$, отримують систему з n-1 алгебраїчних рівнянь з n-1 невідомими y_i. Якщо початкове звичайне диференціальне рівняння лінійне, то задача зводиться до розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь, а якщо нелінійне – то нелінійних або трансцендентних алгебраїчних систем. Привести крайову задачу, яку можна розв'язати методом кінцевих різниць, до вигляду, зручного для розробки програми для ЕОМ, складно, оскільки формулювання кожної задачі залежить від вигляду диференціального рівняння, яке розглядають.

В цьому розділі поданий лише короткий опис різницевого підходу без деталізації методів побудови і дослідження різницевих схем. Взагалі різницеві методи є універсальними методами чисельного аналізу, хоча й розглядаються, в більшості випадків, у зв'язку з розв'язанням крайових задач і диференціальних рівнянь в частинних похідних. Наприклад, метод Ейлера розв'язання задачі Коші може бути інтерпретований як використання одновимірного різницевого оператора. Прикладом узагальненого підходу до розв'язання різноманітних задач обчислювальної математики різницевими методами можуть слугувати праці академіка А. А. Самарського, що містять детальний аналіз і дослідження питань теорії і практики використання різницевих схем.