

Интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений

Рассмотрим систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}),$$

в которой мы ввели вектор $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^N$ и вектор-функцию $\mathbf{f} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$. Численными методами получить истинное решение этой системы не получится, у нас нет возможности определить весь класс решений. Однако если искать частное решение при заданных начальных условиях (или граничных условиях), то численные методы позволяют построить приближенное решение либо в виде сеточной вектор-функции, либо в виде функции из заранее выбранного узко класса функций (чаще всего полиномов степени непревосходящей некоторого натурального числа).

Для начала поставим себе задачу по известному \mathbf{y}_0 в момент времени t_0 найти вектор \mathbf{y}_1 в момент времени $t_0 + h$:

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \int_0^h \mathbf{f}(t_0 + \tau, \mathbf{y}(t_0 + \tau)) d\tau.$$

Значение возникшего определённого интеграла можно оценить с помощью одной из квадратурных формул:

$$\int_0^h \mathbf{f}(t_0 + \tau, \mathbf{y}(t_0 + \tau)) d\tau \approx \sum_{k=0}^n b_k h \mathbf{f}(t_0 + c_k h, \mathbf{y}(t_0 + c_k h)),$$

где среди узлов квадратурной формулы c_k могут содержаться и повторяющиеся, b_k — весовые коэффициенты квадратурной формулы. Применение квадратурной формулы будет возможным, только если вектора $\mathbf{y}(t_0 + c_k h)$ заранее известны, чего на практике конечно же не случается. И главная задача различных методов каким-то образом найти приближения для векторов $\mathbf{y}(t_0 + c_k h) \approx \mathbf{u}_k$. Методы, позволяющие получить приближенное частное решение в виде сеточной функции, таким образом, определяются набором правил для расчёта векторов \mathbf{u}_k и наборами коэффициентов b_k, c_k .

Методы семейства Рунге–Кутты

Методы данного семейства предлагают рассчитывать вектора \mathbf{u}_k , используя заранее заданный набор коэффициентов a_{kj} , независящий от интегрируемой системы уравнений:

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{y}_0 + \sum_{j=0}^n a_{kj} h \mathbf{f}(t_0 + c_j h, \mathbf{u}_j).$$

В общем случае перед нам предстаёт система нелинейных уравнений относительно компонент неизвестных векторов \mathbf{u}_k . Количество скалярных уравнений в данной системе равно $N(n+1)$, таково же и количество неизвестных компонент. Разрешая эту систему каким-либо способом и найдя решение, мы можем записать результат одного шага метода:

$$\mathbf{y}_1 \approx \mathbf{y}_0 + \sum_{k=0}^n b_k h \mathbf{f}(t_0 + c_k h, \mathbf{u}_k).$$

Коэффициенты a_{kj} и c_k связаны простым соотношением. Если преобразовать систему обыкновенных дифференциальных уравнений в автономную расширением вектора \mathbf{y} и вектор-функции \mathbf{f} , а значит нужно добавить к системе уравнений ещё одно

$$\dot{t} = 1,$$

то простое сравнение автономного и неавтономного случаев показывает, что

$$t_0 + c_k h = t_0 + \sum_{j=0}^n a_{kj} h, \quad c_k = \sum_{j=0}^n a_{kj}.$$

Коэффициенты a_{kj} можно собрать в квадратную матрицу A размера $(n+1) \times (n+1)$, коэффициенты b_k, c_k — в матричные вектор-столбцы \mathbf{b}, \mathbf{c} размера $n+1$. Для представления различных методов из семейства Рунге-Кутты устоялось схематичное представление (справа).

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array}$$

Приведём несколько примеров. На пустых местах в матрицах A стоят нули.

Явный метод Эйлера:

$$\mathbf{y}_1 \approx \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)$$

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline & 1 \end{array}$$

Неявный метод Эйлера:

$$\mathbf{y}_1 \approx \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(t_0 + h, \mathbf{y}_1)$$

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Метод прямоугольников:

$$\mathbf{y}_1 \approx \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(t_0 + \frac{h}{2}, \frac{\mathbf{y}_0 + \mathbf{y}_1}{2})$$

$$\begin{array}{c|c} 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Метод трапеций:

$$\mathbf{y}_1 \approx \mathbf{y}_0 + \frac{h}{2}\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{h}{2}\mathbf{f}(t_0 + h, \mathbf{y}_1)$$

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \hline 1 & 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}$$

Методы Рунге:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \hline 1 & 1 & \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}$$

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \hline 1/2 & 1/2 & \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

Методы Кутты:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \hline 1/2 & 1/2 & & \\ \hline 1/2 & & 1/2 & \\ \hline 1 & & & 1 \\ \hline & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6 \end{array}$$

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \hline 1/3 & 1/3 & & \\ \hline 2/3 & -1/3 & 1 & \\ \hline 1 & 1 & -1 & 1 \\ \hline & 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8 \end{array}$$

Анализируя приведённые примеры, можно заметить, что при нижнетреугольной матрице A с нулями на главной диагонали вычисления векторов \mathbf{u}_k значительно упрощаются:

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{u}_k = \mathbf{y}_0 + \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} h \mathbf{f}(t_0 + c_j h, \mathbf{u}_j).$$

Весь набор векторов \mathbf{u}_k вычисляется с помощью рекуррентного соотношения, и больше не требуется решать систему нелинейных уравнений итеративными методами. Такие методы семейства Рунге–Кутты называются явными.

Можно выделить класс полуявных методов семейства Рунге–Кутты. Их также характеризует нижнетреугольная матрица A , но на главной диагонали размещаются уже не только нули. В таком случае начальную большую систему нелинейных уравнений можно разбить на ряд подсистем для каждого вектора \mathbf{u}_k , которые можно решать итеративными методами последовательно увеличивая k от 0 до n :

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{y}_0 + \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} h \mathbf{f}(t_0 + c_j h, \mathbf{u}_j) + a_{kk} h \mathbf{f}(t_0 + c_k h, \mathbf{u}_k).$$

Оставшиеся случаи называют неявными методами семейства Рунге–Кутты.

Обсудим точность, которую могут гарантировать представленные методы. Для простоты следующие выводы будем проводить для одного скалярного автономного дифференциального уравнения $\dot{y} = f(y)$ (вместо вектора \mathbf{u} скалярная величина y). Выводы, которые мы получим останутся справедливыми в общем случае, но доказательство значительно усложнится.

Воспользуемся формулой Тейлора и представим y_1 в окрестности y_0 :

$$y_1 = y_0 + \sum_{q=1}^p \frac{h^q}{q!} \left. \frac{d^q y}{dt^q} \right|_{t=t_0} + O(h^{p+1}).$$

С другой стороны оценку y_1 , которую дают методы семейства Рунге–Кутты, также можно разложить с помощью формулы Тейлора:

$$y_1 \approx y_0 + \sum_{k=0}^n b_k h f(u_k) = y_0 + \sum_{q=1}^p \frac{h^q}{q!} \left[\left. \frac{d^q}{dt^q} \left(\sum_{k=0}^n b_k h f(u_k) \right) \right]_{t=t_0} + O(h^{p+1}).$$

Сравнивая два выражения почленно и добиваясь их равенства подбором коэффициентов a_{kj} , b_k (коэффициенты a_{kj} входят в определение u_k) мы можем получить метод нужной точности, порядок которой показывает показатель старшей степени h в совпадающих слагаемых двух рядов p .

Посмотрим каким условиям должны удовлетворять коэффициенты для методов первого порядка точности. Нам нужно добиться равенства

$$\dot{y}|_{t=t_0} = \left[\frac{d}{dh} \left(\sum_{k=0}^n b_k h f(u_k) \right) \right]_{h=0},$$

где справа мы заменили дифференцирование по t на дифференцирование по h . Найдём производные и запишем

$$f(y_0) = \sum_{k=0}^n \left[b_k f(u_k) + b_k h f'(u_k) \frac{du_k}{dh} \right]_{h=0} = \sum_{k=0}^n b_k f(y_0),$$

где штрих означает дифференцирование f по аргументу (либо y , либо u_k). Отсюда сразу возникает условие для коэффициентов b_k , чтобы гарантировать первый порядок точности метода:

$$\sum_{k=0}^n b_k = 1.$$

Рассмотрим второй порядок точности (далее будем опускать аргумент у f и её производных, если это y_0):

$$\begin{aligned} \ddot{y}|_{t=t_0} &= f'f, & \left[\frac{d^2}{dh^2} \left(\sum_{k=0}^n b_k h f(u_k) \right) \right]_{h=0} &= \sum_{k=0}^n 2b_k f' \left[\frac{du_k}{dh} \right]_{h=0}, \\ \left[\frac{du_k}{dh} \right]_{h=0} &= \left[\sum_{j=0}^n a_{kj} f(u_j) + a_{kj} h f'(u_j) \frac{du_j}{dh} \right]_{h=0} &= \sum_{j=0}^n a_{kj} f. \end{aligned}$$

И получим дополнительное условие

$$\sum_{k,j=0}^n b_k a_{kj} = \frac{1}{2} \quad \text{или} \quad \sum_k b_k c_k = \frac{1}{2},$$

которое вместе с первым гарантирует нам второй порядок точности метода.

Последующие сравнения слагаемых двух рядов принесут ещё множество условий: для третьего порядка точности два условия, для четвёртого порядка десять условий и так далее. Количество условий быстро нарастает с ростом порядка, но их не хватает для однозначного определения всех коэффициентов. Потому теоретически возможно множество методов семейства Рунге–Кутты определённого порядка.

Среди приведённых примеров методы Эйлера относятся к методам первого порядка точности, методы прямоугольников, трапеций и оба метода Рунге — к методам второго порядка точности, а методы Кутты — к четвёртому.

Методы Гаусса, Радо и Лобатто

Эти методы относятся к семейству Рунге–Кутты, но выделяются на общем фоне повышенной точностью. Они основаны на квадратурных формулах Гаусса, Радо и Лобатто. Коэффициенты c_k — это узлы соответствующих квадратур, b_k — их весовые коэффициенты. Для вычисления коэффициентов a_{kj} используется следующая система линейных уравнений:

$$\sum_{j=0}^n a_{kj} c_j^q = \frac{c_k^{q+1}}{q+1}, \quad q = 0, \dots, n.$$

Порядок точности метода Гаусса $2n + 2$, метода Радо — $2n + 1$, метода Лобатто — $2n$. В качестве примера приведём два метода Гаусса. Самостоятельно получите коэффициенты двух- и трехэтапных методов Радо и Лобатто.

Метод Гаусса четвёртого порядка:

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

Метод Гаусса шестого порядка:

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30}$	$\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{5}{18}$