

УДК 517.91

Стабников Павел А., канд. хим. наук, с.н.с., ИНХ СО РАН, Новосибирск.*

Сухомлинова Алина А., преподаватель, ВГПУ, Воронеж.

НОВЫЙ ПОДХОД РЕШЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

A NEW APPROACH TO SOLVING DIFFERENTIAL EQUATIONS BASED ON A NUMERICAL EXPERIMENT

Stabnikov Pavel A., senior Researcher, INC SB RAS, Novosibirsk.

Sukhomlinova Alina A., lecturer, Voronezh Pedagogical University

Аннотация. Численным методом показана симметричность оптимального алгоритма решения ОДУ относительно точки $(x+h/2)$. Установлено, что погрешность восстановления первообразной для периодических функций ($\text{Cos}(x)$, $\text{Sin}(x)$ и др.) периодически обнуляется в отличие от аperiodических функций (x^p , $\text{Exp}(x)$ и др.). Опираясь на симметричность составления среднего арифметического, разработаны формулы, которые позволяют увеличить точность расчетов в 100 раз по сравнению с методом Рунге-Кутты четвертого порядка.

Annotation. The symmetry of the optimal algorithm for solving the HDE with respect to the point $(x + h / 2)$ is shown by the numerical method. It was found that the error in recovering the antiderivative for periodic functions ($\text{Cos}(x)$, $\text{Sin}(x)$, etc.) is periodically zeroed in contrast to aperiodic functions (x^p , $\text{Exp}(x)$, etc.). Based on the symmetry of the arithmetic mean, formulas have been developed that make it possible to increase the accuracy of calculations by a factor of 100 in comparison with the fourth-order Runge-Kutta method.

Ключевые слова: численное решение ОДУ, улучшение метода Рунге-Кутты.

Key World: numerical solution of HDE, improvement of the Runge-Kutta method.

Введение

В становлении и совершенствовании методов решения ОДУ заметный вклад внесли такие математики как Эйлер, Гюн, Тейлор, Адамс, Рунге, Кутт, Фехлберг, Милн, Симпсон, Хемминг, Крылов, Чаплыгин и др. [1-4]. С появлением ЭВМ, созданием языков программирования и разработкой удобных прикладных программ численное решение многих математических задач существенно упростилось. В то же время открылась возможность проведения численного анализа решения ОДУ. В данной работе численные методы являлись основным подходом для развития представлений о возможных алгоритмах решения ОДУ. В качестве модельных функций использовались хорошо известные гладкие функции: $\text{Sin}(x)$, $\text{Cos}(x)$, $\text{Exp}(x)$, полиномы $P(x)$. Расчеты проводились на языке программирования Pascal и в программах Mathcad 15, Microsoft Excel, графики рисовались в программе Origin Pro 8-C.

Достижения аналитических подходов.

Задача решения дифференциального уравнения заключается в нахождении (вычислении) функции $F(x,y)$ исходя из набора (таблицы) значений производных $y'(x,y)$ в точках x , $x+h$, $x+h/2$, $x+2h$ и др. и начального значения $F(x_0,y_0) = S_0$. Это частное решение задачи Коши:

$$y'(x,y) + F(x_0,y_0) = S_0 \rightarrow F(x,y)$$

Однако в данной работе мы будем рассматривать более простую задачу, в которой производные и искомая функция зависят только от x :

$$y'(x) + F(x_0) = S_0 \rightarrow F(x)$$

Впервые алгоритм разрешения ОДУ предложил Л. Эйлер. Алгоритм Эйлера позволяет последовательно получать искомый набор $F(x_i)$, опираясь на начальное условие $F(x_0)$ и набор значений $y'(x_i)$.

$$F(x+h) \sim F(x) + hy'(x) \quad (\text{I})$$

Однако, алгоритм Эйлера на каждом шаге вычисления $F(x+h)$ вносит заметную погрешность, что в итоге приводит к отклонению по сравнению

с аналитически полученному решению. Для повышения точности вычисления предложены различные модификации алгоритма Эйлера. Более подробное описание этих методов можно найти в [1-4] и в списке литературы, приведенные в этих книгах. В данной работе мы будем использовать один из самых точных и наиболее распространенный метод Рунге-Кутты четвертого порядка:

$$F(x_i+h, y_i) = F(x_i, y_i) + (k_1+2k_2+2k_3+k_4)/6, \quad (\text{IIa})$$

$$k_1 = hy'(x_i, y_i), k_2 = hy'(x_i+h/2, y_i+k_1/2),$$

$$k_3 = hy'(x_i+h/2, y_i+k_2/2), k_4 = hy'(x_i+h, y_i+k_3).$$

Но поскольку мы в данной работе рассматриваем более простую задачу, в которой исходные значения производных $y'(x)$ и искомая функция $F(x)$ не зависят от y_i , то тогда данный метод Рунге-Кутты упрощается:

$$F(x_i+h) = F(x_i) + (k_1+4k_2+k_3)/6, \quad (\text{IIб})$$

$$k_1 = hy'(x_i), k_2 = hy'(x_i+h/2), k_3 = hy'(x_i+h).$$

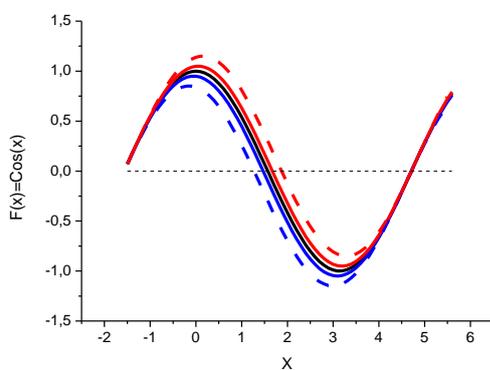
Этим упрощенным методом Рунге-Кутты мы будем пользоваться для сравнения с возможностями других подходов.

Численный анализ проблемы решения дифференциальных уравнений.

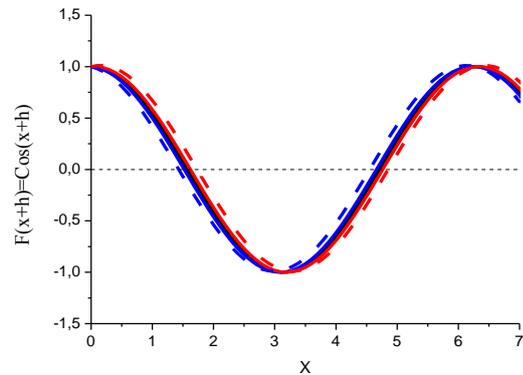
В уравнении (I) для вычисления последующего значения $F(x+h)$ необходимо предыдущее значение $F(x)$ и $y'(x)$. В книге [2] значения $y'(x)$ в предложено называть **функцией приращений (ФП)**. Но так как значения производных не сильно изменяются при малых значениях h , то возможно в уравнении (I) заменять $y'(x)$ на $y'(x+h)$ или $y'(x-h)$. А вот к каким изменениям в решении задачи приведут такие подмены ФП мы попытаемся экспериментально установить. Кроме того в уравнении (I) $y'(x)$ можно заменить на приведенную сумму из двух, или приведенную сумму из большего числа значений производных.

Восстановление первообразных функций $\text{Cos}(x)$, x^6 и $\text{Exp}(x)+\text{Exp}(-x)$ исходя из значений $y'(x_i)$ в точках x , $x+h$, $x+2h$, $x+3h$ и т.д. было решено

провести метода Эйлера, в которых ФП были $y'(x)$, $y'(x+h)$, $y'(x-h)$, $y'(x+2h)$.
 Результаты представлены на рис. 1.

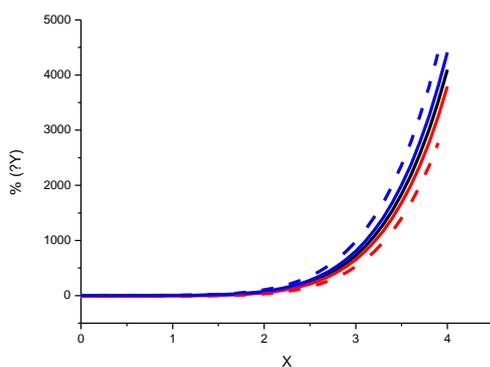


1а

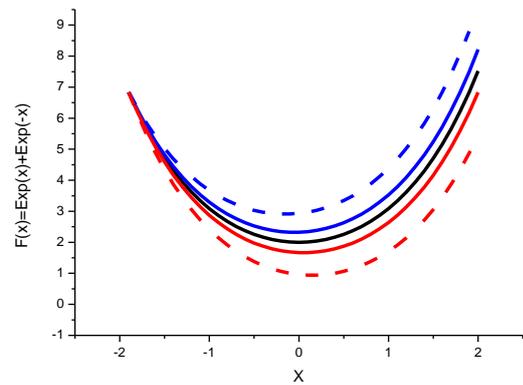


1б

Рис.1а и 1б. Результат решения дифференциального уравнения $y'(x) = -\sin(x)$, $F(x+h) = \cos(x+h)$. Для разных исходных значений $F(x_0) = S_0$ (1а – $S_0=0$; 1б – $S_0=1$). Точное значение $\cos(x+h)$ – черная линия, красная линия – результаты вычисления $F(x+h) = F(x)+hy'(x)$ (метод Эйлера), синяя линия – $F(x+h) = F(x)+hy'(x+h)$, красная пунктирная линия – $F(x+h) = F(x)+hy'(x-h)$, синяя пунктирная линия – $F(x+h) = F(x)+hy'(x+2h)$.



1в



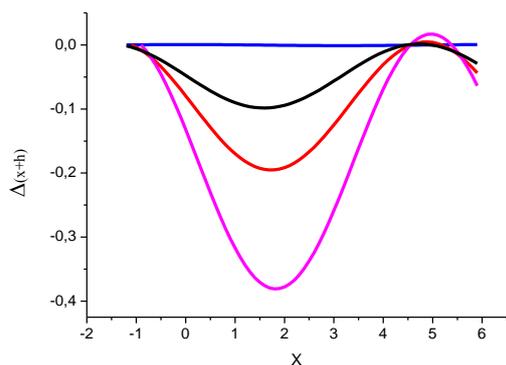
1г

Рис.1в. Результат решения дифференциального уравнения $y'(x) = 6x^5$, $F(x) = x^6$ Точное значение x^6 – черная линия. Формулы вычисления и цвета других линий соответствуют подписям к рис 1а.

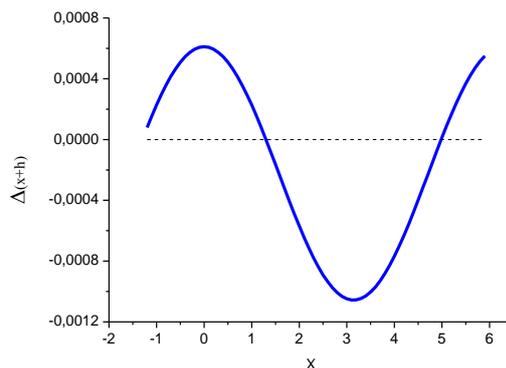
Рис.1г. Результат решения дифференциального уравнения $y'(x) = \text{Exp}(x) - \text{Exp}(-x)$, $F(x+h) = \text{Exp}(x+h) + \text{Exp}(-(x+h))$. Точное значение $\text{Exp}(x+h) + \text{Exp}(-(x+h))$ – черная линия. Формулы вычисления и цвета других линий соответствуют подписям к рис 1а.

Из рисунка 1а и 1б следует, что для периодической функции $\text{Cos}(x)$ погрешность за один (если $x_0 = \pi/2 + \pi N$) или за пол (если $x_0 = \pi N$) периода обнуляется, что весьма удивительно. Именно это позволяет надежно оценить максимальную погрешность того или иного метода восстановления первообразной. Для непериодических функций с увеличением интервала по x погрешность постоянно накапливается (рис. 1в, 1г), что делает проблематичным оценку погрешности только по конечному значению согласно записи $h^2 * Q(x)$ [1-4]. Такая оценка погрешности не учитывает факта накопления ошибки. Следует отметить, что периодическое обнуление погрешности для восстановления периодических функций установлена численным методом. А из аналитических рассуждений погрешность должна постоянно накапливаться (увеличиваться), что справедливо для непериодических функций (рис. 1в и 1г). Именно поэтому сначала рассмотрим возможности численного решения дифференциальных уравнений для периодических функций [$\text{Cos}(x)$, $\text{Sin}(x)$, $x^p \text{Cos}(x)$, $\text{Exp}(x) \text{Sin}(x)$ и др.]

Из рис. 1 следует, что для повышения точности расчетов можно заменить $y'(x)$ на среднее арифметическое $[y'(x) + y'(x+h)]/2$ (Этот прием в литературе имеет название усовершенствованный метод Эйлера [1, 4]) Возможны также другие ФП, например: $[y'(x-h) + y'(x+2h)]/2$, $[y'(x-2h) + y'(x+3h)]/2$, и т.д. (т.н. расширенные методы Эйлера). Но какое среднее арифметическое точнее позволяет вычислять первообразную функцию. На рис. 2 представлены графики разности $\text{Cos}(x)$ и результаты решения ($\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - F(x+h)$) методом Эйлера и с различными вариантами ФП.



2а



2б

Рис. 2а. Черная линия – $\text{Cos}(x+h)$ минус первообразная, вычисленная согласно методу Эйлера: $\Delta(x+h)=\text{Cos}(x+h)-[F(x)+hy'(x)]$, синяя линия – $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h)-[F(x)+h[y'(x)+y'(x+h)]/2]$ (усовершенствованный метод Эйлера), красная линия – $\Delta(x+h)=\text{Cos}(x+h)-[F(x)+h[y'(x-h)+y'(x+2h)]/2]$, фиолетовая линия – $\Delta(x+h)=\text{Cos}(x+h)- [F(x)+h[y'(x-2h)+y'(x+3h)]/2]$.

Рис. 2б. Более подробно показана синяя линия (усовершенствованный метод Эйлера).

Опираясь на рис. 1 и 2 можно сделать заключение, что алгоритмы решения дифференциальных уравнений обладают симметрией относительно точки $x+h/2$, что показано на рис.3.

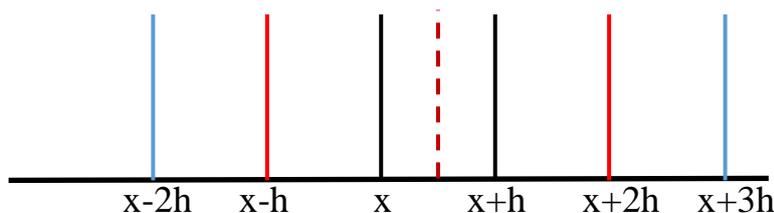


Рис. 3 Одинаковым цветом выделены точки для составления среднего арифметического из производных (для формирования ФП).

Симметричность, представленную на рис. 3, можно получить только на основе численного эксперимента. Вероятно поэтому, в литературе отсутствует какое-либо упоминание о такой симметрии. Из рис. 3 также следует, что при решении дифференциальных уравнений особым положением обладает точка $x+h/2$. Поэтому было решено провести

численное решение дифференциального уравнения, с ФП в точке $x+h/2$. В [2] такой алгоритм решения называют методом Эйлера-Коши.

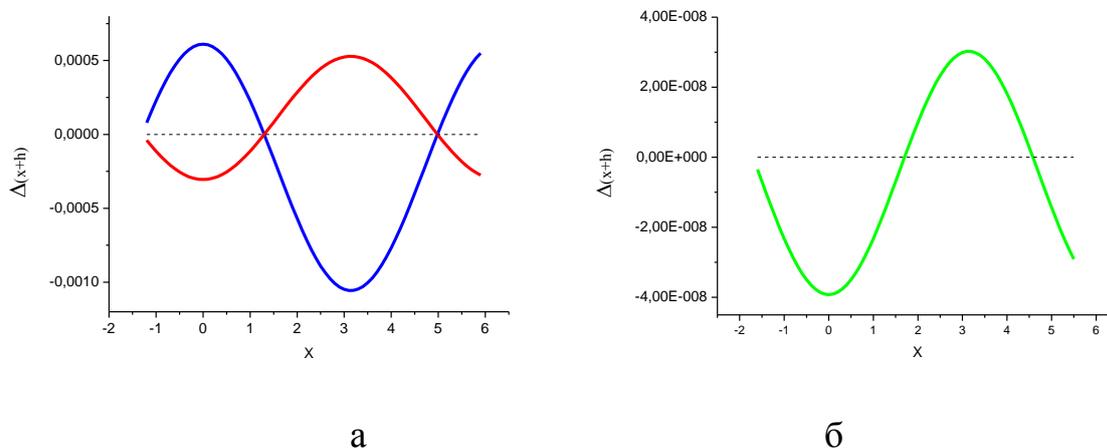


Рис. 4а. Синяя линия – $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - [F(x)+h[y'(x)+y'(x+h)]/2]$ (усовершенствованный метод Эйлера), красная линия – $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - [F(x)+hy'(x+h/2)]$.

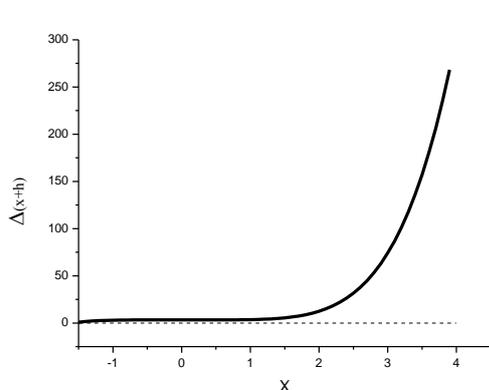
Рис. 4б. $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - [F(x)+h(4y'(x+h/2)+y'(x)+y'(x+h))/6]$ – зеленая линия (пояснения в тексте), пунктиром обозначена нулевая линия.

Из рис. 4а следует, что если на «глазок» взять ФП усовершенствованного метода Эйлера $[y'(x)+y'(x+h)]$ и удвоенное значение $[y'(x+h/2)]$, то результат численного решения дифференциального уравнения будет более точным. Среднее арифметическое трех значений $h[y'(x)+y'(x+h)]/2$ и $2hy'(x+h/2)$ равно $h[y'(x)+4y'(x+h/2)+y'(x+h)]/6$. В итоге получим выражение $F(x+h) = F(x)+h[4y'(x+h/2)+y'(x)+y'(x+h)]/6$, которое совпадает с упрощенным методом Рунге-Кутты (IIб). Результат восстановления $\text{Cos}(x)$ по формуле (IIб) представлен на рис.4б. Из рис. 4 следует, что точность решения усовершенствованным методом Эйлера $y'(x)=-\text{Sin}(x)$ не превышает $1 \cdot 10^{-3}$, а исходя из точек в центре симметрии $h/2 - 5 \cdot 10^{-4}$, тогда как упрощенный метод Рунге-Кутты – $1 \cdot 10^{-8}$.

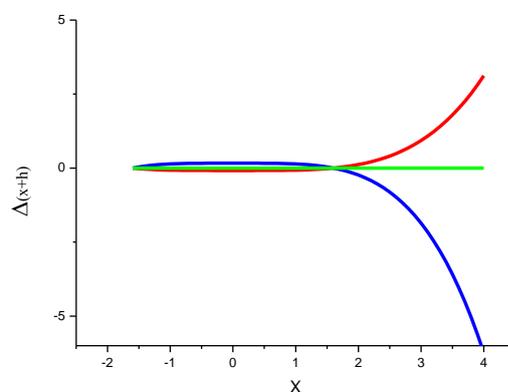
Уравнение Рунге-Кутты (IIб) мы получили графически, опираясь на результаты всестороннего численного анализа решения дифференциальных уравнений. Но почему в методе Рунге-Кутты

четвертого порядка значение $y'(x+h/2)$ нужно брать в четыре раза больше, чем $y'(x)$ и $y'(x+h)$? Можно предложить множество различных вариантов, в которых используются значения $y'(x)$, $y'(x+h/2)$ и $y'(x+h)$ и которые приводят к ФП вида: $(My'(x+h/2)+Ny'(x)+Ny'(x+h))/(M+2N)$. Но какой из них самый лучший? Бесспорных аналитических или геометрических доказательств (построений) нет. (См. ПРИЛОЖЕНИЕ 1) Весовые значения вкладов каждой производной можно оценить методом наименьших квадратов, используя функции x^4 и x^6 и их производные (См. ПРИЛОЖЕНИЕ 2).

Восстановление первообразных функций, состоящих из произведения периодических функций ($\text{Cos}(x)$ и $\text{Sin}(x)$) и показательной или степенной также периодически обнуляется. Рассмотрим теперь восстановление первообразных непериодических функций: x^p , $\text{Exp}(x)$. Экспериментально было установлено, что метод Эйлера точно восстанавливает только $F(x)=x$. Усовершенствованный метод Эйлера и метод с ФП равным $y'(x+h/2)$ хорошо восстанавливают $F(x)=x^2$. Метод Рунге-Кутты Пб хорошо восстанавливает первообразную до $F(x)=x^5$. Для функций с большими показателями погрешность возрастает. На рис. 5 представлены результаты восстановления первообразной $F(x) = x^6$ различными методами.



а



б

Рис.5а. Ченная линия– $\Delta(x+h) = (x+h)^6 - [F(x)+ h(y'(x))]$ (метод Эйлера).

Рис. 5б. Синяя линия – $\Delta(x+h) = (x+h)^6 - [F(x)+h[y'(x)+y'(x+h)]/2]$ (усовершенствованный метод Эйлера), красная линия – $\Delta(x+h) = (x+h)^6 - [F(x)+h[y'(x+h/2)]]$, зеленая линия – $\Delta(x+h) = (x+h)^6 - [F(x)+h[4y'(x+h/2)+y'(x)+y'(x+h)]/6]$ – метод Рунге-Кутты (Пб).

Как следует из рис. 5 наиболее точно восстанавливает первообразную x^6 метод Рунге-Кутты.

Точка $h/2$ как центр симметрии при решении ОДУ.

Рассмотрим теперь поиск оптимального значения N для решения ОДУ из значения производной в центре симметрии $x+h/2$ и двух значений в точках $x+h/2-hd$, $x+h/2+hd$. Или для ФП: $(Ny'(x+h/2)+y'(x+h/2-hd)+y'(x+h/2+hd))/(N+2)$. Оценку оптимального значения N проводили методом наименьших квадратов согласно выражению: $\delta = (x+h)^6 - (x)^6 - h[W_1y'(x+h/2)+W_2[y'(x+h/2-hd)+y'(x+h/2+hd)]]/(W_1+2W_2)$. $N=W_1/W_2$.

Результаты расчета N представлены на рис. 6.

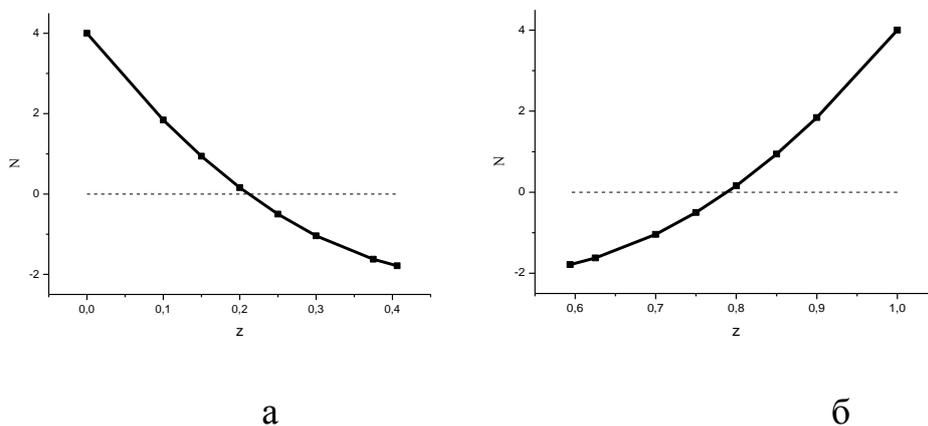


Рис. 6. Результаты расчетов оптимального значения N в зависимости от z , где $z = (h/2-hd)/h$, или $z=(h/2+hd)/h$, hd – расстояния двух производных от центра симметрии. а– для координат точек $-hd$, б – для координат точек $+hd$.

Результаты фитирования кривых, представленных на рис. 6а и 6б, приводят к тождественному выражению:

$$N = 4 - 24z + 24(z)^2 \quad (\text{III})$$

Опираясь на полученное выражение, потенциально возможно, составлять ФП, включающие производные и за интервалами, приведенными на рис.6. Такие ФП будут в полном согласии с симметрией составления алгоритма решения ОДУ.

Возможные пути улучшения метода Рунге-Кутты

В методе Рунге-Кутты (Пб) в интервале $[x - x+h]$ используется три исходных значения $y'(x)$, $y'(x+h/2)$ и $y'(x+h)$. Этот интервал можно разбить на большее число частей. В литературе такие подходы известны, например, в методе Рунге-Кутты-Мерсена используются значения производных в точках x , $x+h/3$, $x+h/2$, $x+2h/3$, $x+h$ [3], а в методе Рунге-Кутты-Фельберга в точках x , $x+2h/9$, $x+h/3$, $x+3h/4$, $5h/6$, $x+h$ [3]. Однако, обоснования рабочих формул не совсем ясны. Поэтому мы решили разработать формулы, учитывающие симметричность интервала относительно точки $(x+h/2)$. Для задачи из трех значений y' в точках $x+h/3$, $x+h/2$, $x+2h/3$ можно предложить несколько формул ФП: $[Ny'(x+h/2)+y'(x+h/3)+y'(x+2h/3)]/(N+2)$. Установить значение N можно используя выражение (III). Для этого случая значение $z=1/3$ поэтому по (III) $N= -1,3333 = -4/3$. Точно такое же значение N получим, если подставить в (III) $z=+2/3$. Таким образом, ФП будет: $[-4/3*y'(x+h/2)+y'(x+h/3)+y'(x+2h/3)]/(-4/3+2)$, после упрощения получим: $[-4*y'(x+h/2)+3[y'(x+h/3)+y'(x+2h/3)]]/2$, из чего следует формула:

$$F(x+h) = F(x)+h[-4y'(x+h/2)+3[y'(x+h/3)+y'(x+2h/3)]]/2 \quad (\text{IV})$$

Точно также для значения $z=1/4$ и $z=3/4$ получим: $N=-0,5=-1/2$. После несложных упрощений ФП получим $[-y'(x+h/2)+2[y'(x+h/4)+y'(x+3h/4)]]/3$:

$$F(x+h) = F(x)+h[-y'(x+h/2)+2[y'(x+h/4)+y'(x+3h/4)]]/3 \quad (\text{V})$$

А для значения $z=0$ и $z=1$ получим формулу Рунге-Кутты IIб. Для значения $z=-1/2$ и $z=3/2$ получим $N=22$, что приводит к:

$$F(x+h) = F(x)+h[22y'(x+h/2)+y'(x-h/2))+y'(x+3h/2)]/24 \quad (VI)$$

Для значения $z=-1$ и $z=2$ получим: $N=52$, что приводит к:

$$F(x+h) = F(x)+h[52y'(x+h/2)+y'(x-h))+y'(x+2h)]/54 \quad (VII)$$

На рис. 7 представлено сравнение результатов восстановления функции $\text{Cos}(x+h)$ методом Рунге-Кутты IIб и по формулам IV, V, VI, VII.

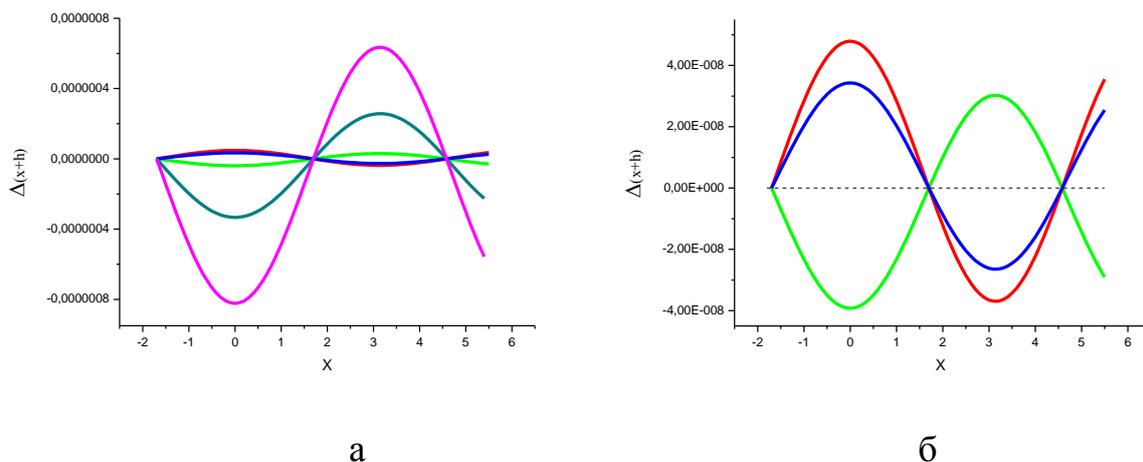


Рис. 7а. Зеленая линия – $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - F(x+h)$ (расчет методом Рунге-Кутты, по IIб). Красная линия – $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - F(x+h)$ (расчет по IV), синяя линия – расчет по V, темно-зеленая линия – расчет по VI, фиолетовая линия – расчет по VII.

Рис. 7б. Более подробно показаны зеленая, красная и синяя линии.

Из рис. 7б следует, что результаты, полученные по IV и по V близки по величине к расчету по формуле Рунге-Кутты, но противоположны по знаку. Это потенциально позволяет получить более точные формулы. Особенно интересна формула, в которой ФП IIб сложить с ФП V. В результате получим:

$$Y(x+h) = Y(x)+h[2y'(x+h/2)+4(y'(x+h/4)+y'(x+3h/4))+ y'(x)+y'(x+h)]/12 \quad (VIII)$$

Эта формула интересна тем, что используются производные, которые располагаются на оси x с равным шагом $h/4$ внутри интервала $[x - x+h]$.

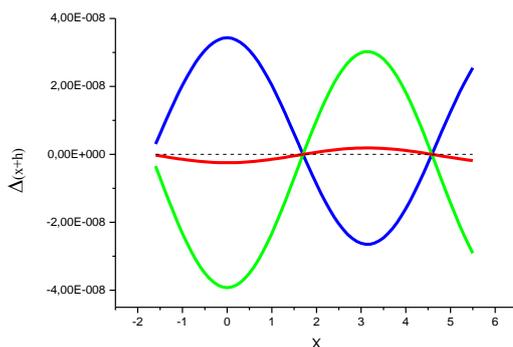


Рис. 8. Зеленая линия – $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - F(x+h)$ (расчет методом Рунге-Кутты, по IIб), синяя линия $\Delta(x+h)$ – расчет по V, красная линия – $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - F(x+h)$ (расчет по VIII).

Из рис. 8 следует, что при использовании в расчете 5 значений производных (формула VIII) достигается расхождение до 10^{-9} , которое на порядок лучше, чем при использовании в расчетах 3 значения производных (формулы IIб и V). Что вполне согласуется с общим представлением: чем больше точек, тем точнее результат. Потенциально возможно понижение погрешности восстановления первообразной путем более частого разбиения интервала $[x - x+h]$, но такая работа представляет интерес скорее для теоретического исследования. Так как большинство экспериментальных данных обычно получают с точностью не выше 10^{-3} .

Еще одним недостатком метода Рунге-Кутты является то, что в расчетах каждого значения первообразной используются только три значения внутри интервала $[x - x+h]$. В то время, как экспериментальные значения производных обычно имеются и вне интервала $[x - x+h]$. Поэтому желательно разработать методику, позволяющую проводить расчеты со значениями производных в более широком интервале. В данной работе предложены формулы для расчета первообразных, используя 5 значений в интервале от $[x-h/2$ до $x+3h/2]$ (точки $x-h/2, x, x+h/2, x+h, x+3h/2$) и в интервале от $[x-h$ до $x+2h]$ (точки $x-h, x, x+h/2, x+h, x+2h$).

Из рис. 7а следует, что если умножить ФП зеленой линии (расчет по Пб) в ~8 раз, то она станет близкой к темно-зеленой линии (расчет по VI). Для зеленой и фиолетовой линий оптимальное значение $k \sim 23$. Это позволяет найти аналитические выражения для оптимального вычисления первообразной $\text{Cos}(x)$ исходя из значений в 5 точках:

$$F(x+h) = F(x) + h[106y'(x+h/2) + 32[y'(x) + y'(x+h)] - y'(x-h/2) - y'(x+3h/2)]/168 \quad (\text{IX})$$

$$F(x+h) = F(x) + h[768y'(x+h/2) + 205[y'(x) + y'(x+h)] - y'(x-h) - y'(x+2h)]/1176 \quad (\text{X})$$

и 7 точках: (XI)

$$F(x+h) = F(x) + h[1510y'(x+h/2) + 429[y'(x) + y'(x+h)] - 7[y'(x-h/2) + y'(x+3h/2)] - y'(x-h) - y'(x+2h)]/2352$$

Результаты вычислений по формулам (IX), (X), (XI) представлены на рис 9.

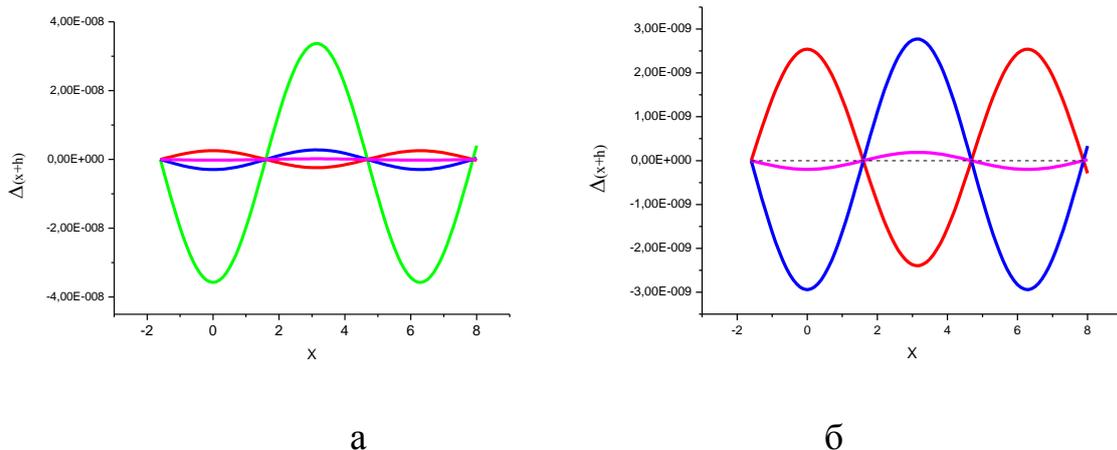
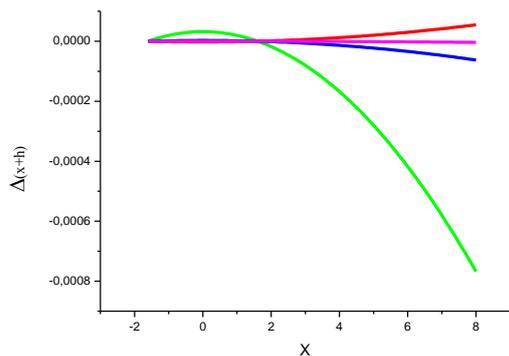
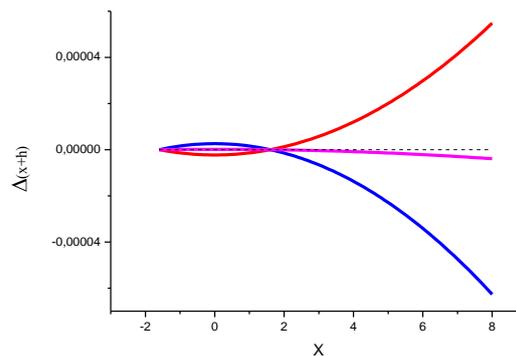


Рис. 9а Результаты восстановления функции $\text{Cos}(x)$. Зеленая линия – $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - F(x+h)$ (метод Рунге-Кутты), красная линия — $\Delta(x+h) = \text{Cos}(x+h) - F(x+h)$, восстановление по 5 точкам согласно формуле (IX), синяя линия восстановление по 5 точкам согласно формуле (X), фиолетовая линия восстановление по 7 точкам согласно формуле (XI).

Рис. 9б. Более подробно показана разность между $\text{Cos}(x+h)$ и расчетом первообразной по пяти и семи точкам, согласно формулам (IX), (X), (XI).



В



Г

Рис. 9в и 9г. Результаты восстановления первообразной функции x^6 . Расчет и цветовое выделение, как и на рис. 9а и 9б.

Формулы (IX), (X), (XI) восстанавливают первообразную $\text{Cos}(x)$, x^6 и $\text{Exp}(x)$ лучше, чем формула Рунге-Кутты, погрешность которой для восстановления $\text{Cos}(x) - 4 \cdot 10^{-8}$. Погрешность формул (X) и (X) для восстановления $\text{Cos}(x)$ не превышает $\sim 2 \cdot 10^{-9}$, а (XI) – $4 \cdot 10^{-10}$. Это вполне согласуется с правилом, согласно которому чем больше значений задействовано, тем точнее результат.

Заключение

В данной работе показано, что решение ОДУ, исходя из массива производных разделенных постоянным шагом h , обладает симметричностью относительно точки $h/2$. Также показано, что погрешность для периодических функций (например, $\text{Cos}(x)$) при вычислении первообразной через определенные интервалы обнуляется. На основе численного анализа предложена формула (VIII), которая восстанавливает первообразную функцию точнее, чем формула Рунге-Кутты и большинство других известных в литературе формул. Расширение интервала значений производных позволяет повысить точность расчета первообразной, по сравнению с методом Рунге-Кутты до 100 раз. Кроме

того формулы (IX), (X), (XI) обладают преимуществом перед формулой Рунге-Кутты так как используется более широкий интервал экспериментальных значений.

В истории математики аналитические и геометрические построения всегда являлись основой для вывода формул и формирования общих представлений о решении различных задач. Численный эксперимент обычно являлся рабочей лошадкой, с помощью которой подтверждались выводы, полученные аналитическими или геометрическими подходами. Сто лет назад проводить численное моделирование было весьма трудной задачей. Спустя 30-40 лет стали появляться первые компьютеры. К началу XXI века возможности ЭВМ многократно возросли. Также были разработаны и получили широкое распространение такие языки программирования, как Fortran, Paskal, Cu, Delphi и др. Кроме того были созданы удобные программы Microsoft Excel, Origin, Mathcad и др. Благодаря всему этому стало возможным проводить всестороннее численное моделирование многих математических задач и сопоставлять результаты решения, полученные разными методами. В данной работе проведен численный анализ проблемы восстановления первообразной, который развивает общие представления о решении дифференциальных уравнений. В данной области математики численный метод является определяющим при выборе наиболее точного выражения из некоторого числа вариантов, которые могут быть предложены аналитическими или геометрическими подходами. Таким образом, численный эксперимент в задаче восстановления первообразной становится необходимым элементом, без которого невозможно установить оптимальную формулу решения ОДУ.

Цель данной работы разрушить представления о том, что только аналитическими или геометрическими методами возможно построить оптимальные представления о решении ОДУ. В фундаменте основ

решения ОДУ должны быть положены также данные численного эксперимента и симметричности составления ФП.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Обсуждение различных подходов для вывода ФП.

Для улучшения формулы Эйлера $F(x+h)=F(x)+hy'(x)$ с привлечением производной еще в точке $x+h$ проблемы не возникает, так как на основе интуитивных рассуждений проще всего вместо $y'(x)$ взять среднее арифметическое $(y'(x)+y'(x+h))/2$. В книге [1] в качестве доказательства того, что среднее арифметическое из двух значений лучше, чем каждое из них основываются на том, что трапеция лучше восстанавливает интеграл, чем прямоугольник с ординатой из одного значения.

Но как быть с формулой восстановления первообразной из значений производных в трех точках: x , $x+h/2$, $x+h$. Потенциально возможно множество выражений ФП: $(y'(x)+N(y'(x+h/2))+y'(x+h))/(N+2)$. Прямых бесспорных аналитических или геометрических доказательств оптимальности ФП $= (y'(x)+4y'(x+h/2)+y'(x+h))/6$ нет. В некоторых учебниках и пособиях предлагаются запутанные и сложные рассуждения, основывающиеся на неоднозначных и спорных утверждениях. В некоторых учебниках эту проблему обходят, например в [2] записано: «Мы не приводим полного обоснования уравнения Рунге-Кутты, его можно найти в книгах повышенной сложности. Но ссылки не приводятся. В учебнике [1, стр. 365] относительно различных вариантов метода Рунге-Кутты записано «...критерий практики часто несет в себе определенную положительную информацию, которая зачастую на данном этапе развития науки не может быть формализована или обоснована.» В книгах [1,3] отмечается, что оценка весовых значений k_1, k_2, k_3, k_4 формулы Рунге-Кутты неоднозначна.

Здесь мы приведем наши попытки установления оптимальной формулы, использующей производные в трех точках: $y'(x)$, $y'(x+h/2)$, $y'(x+h)$. Для первых двух значений составим среднее арифметическое: $[y'(x)+y'(x+h/2)]/2$ и припишем это значение к точке $x+h/2$. Затем для этого выражения и $y'(x+h)$ составим новое среднее арифметическое: $\{[y'(x)+y'(x+h/2)]/2+y'(x+h)\}/2 = [y'(x)+y'(x+h/2)+2y'(x+h)]/4$. Если исходить из точек $x+h$ и $x+h/2$, а затем добавить значение $y'(x)$, то получим другое выражение: $[2y'(x)+y'(x+h/2)+y'(x+h)]/4$. Обе эти формулы весьма далеки от формулы Рунге-Кутты. Если отдельно для точек x и $x+h/2$ и точек $x+h/2$ и $x+h$ получим два независимых средних арифметических, а потом из них составим новое среднее арифметическое, то получим: $[y'(x)+2y'(x+h/2)+y'(x+h)]/4$. Это выражение уже ближе к формуле Рунге-Кутты. Но если для каждого интервала дважды получим среднее арифметическое, дважды учитывая $y'(x+h/2)$, а затем их объединим в новое среднее арифметическое, то получим выражение: $[y'(x)+6y'(x+h/2)+y'(x+h)]/8$. Но это уже перебор. Делителем ФП Рунге-Кутты является 6 (сомножители 3 и 2). Опираясь на это, сначала найдем среднее арифметическое из значений производных в трех точках и получим $[y'(x)+y'(x+h/2)+y'(x+h)]/3$, а затем составим среднее арифметическое из этого значения и значения в точке $x+h/2$, то получим $(y'(x)+4y'(x+h/2)+y'(x+h))/6$ – ФП Рунге-Кутты. Другой вариант: сначала получим среднее арифметическое из значений в двух точках x и $x+h$, а затем из полученного значения и удвоенного значения производной в точке $x+h/2$ составим новое среднее арифметическое. И снова получим ФП Рунге-Кутты. Однако обосновать, что именно эти последние варианты приведут к самому оптимальному выражению весьма затруднительно.

В общем, опираясь на аналитические или геометрические методы, возможно предложить несколько ФП, использующие $y'(x+h/2)$, $y'(x)$ и $y'(x+h)$, или различные весовые значения для k_1 , k_2 , k_3 , k_4 (в формуле Па),

но установить наилучшую ФП можно только экспериментально. И здесь полная аналогия с химическими эквивалентами. Так один эквивалент натрия всегда соединяется с одним эквивалентом хлора с образованием обычной соли NaCl. Один эквивалент кислорода соединяется с двумя эквивалентами водорода с образованием воды H₂O. Один эквивалент углерода соединяется с четырьмя эквивалентами водорода и одним эквивалентом кислорода с образованием метилового спирта H₃COH. (Что очень напоминает ФП формулы Рунге-Кутты) Формула этилового спирта: C₂H₅OH. Эти простые формулы всем хорошо известны. Можно привести еще и множество других химических формул. В основании химии лежит именно эти экспериментально установленные эквиваленты. Все остальные понятия валентность, атом, электронные оболочки и др. базируются на экспериментальных эквивалентах. А в области численного решения ОДУ ФП в методе Рунге-Кутты является суммой эквивалентов $y'(x)$, $y'(x+h)$ и четырех эквивалентов $y'(x+h/2)$, деленных на 6. Понятие эквивалента является фундаментальной основой химии, а вот в области экспериментальной математики это понятие также может быть полезным.

Таким образом, различными построениями или рассуждениями можно получить формулу, близкую к формуле Рунге-Кутты, но показать, что это самая оптимальная – невозможно. Попытки обоснования формулы Рунге-Кутты различными теоретическими подходами с нашей точки зрения являются всего лишь прикрытиями фиговым листочком проблемы восстановления первообразной. В некоторых областях, например в живописи допустимо маскировать проблемные места. А в науке, наоборот, важно отмечать проблемные места, так как затруднения и проблемы часто приводят к коррекции существующих представлений.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Применение метода наименьших квадратов

Запишем погрешность восстановления первообразной в виде:

$$\delta = F_{\text{теор}} - F(x+h) = F_{\text{теор}} - [F(x)+h(W_1(y'(x)+y'(x+h))+W_2(y'(x+h/2)))/(2W_1+W_2)].$$
 Нас будут интересовать не абсолютные значения $W_1/(2W_1+W_2)$ и $W_2/(2W_1+W_2)$, а их отношение. Далее δ возводим в квадрат, суммируем для всех выбранных точек x , дифференцируем по W_1 и W_2 , приравниваем результаты к 0 и получаем два основных уравнения, из которых составляем три матрицы 2×2 , вычисляем ранг матрицы, а затем отношение W_1/W_2 .

Расчеты показали, что для четырех произвольных точек $F(x)$ функции x^4 или x^6 для трех значений $(y'(x)+y'(x+h))$ и $y'(x+h/2)$, отношение W_2/W_1 близко к 4, независимо от выбора точек. Это является численным доказательством оптимальности формулы Рунге-Кутты. Однако, для таких функций, как $\text{Cos}(x)$ и $\text{Exp}(x)$ ранг матрицы 2×2 , в большинстве случаев близок к нулю, что не позволяет корректно вычислить W_1 и W_2 .

Используемые источники

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.; СПб.: Лаборатория базовых знаний, 2002, 632с.
2. Мэтьюз Дж.Г., Финк К.Д. Численные методы. Под ред. Козаченко Ю.В. М. - СПб. – Киев «Вильямс». 2001, 702с.
3. Вержбицкий В.М. Основы численных методов.- М. «Высшая школа». 2009, 840с.
4. Демидович Б.П., Марон И.А., Шувалова Э.З. Численные методы анализа. СПб. – М. – Краснодар. 2010. 400с.