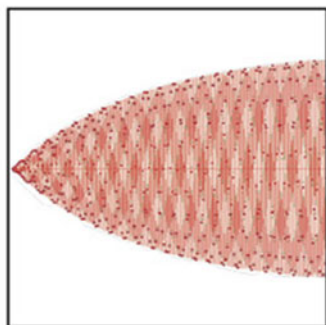


программирования

М.Ф. ГАРИФУЛЛИН

Численные методы
интегрирования
дифференциальных
уравнений



ТЕХНОСФЕРА

УДК 519.682

ББК 32.97

Г20

Рецензент: профессор, доктор технических наук О.А. Кузнецов

Г20 Гарифуллин М.Ф.

Численные методы интегрирования дифференциальных уравнений. — М.: ТЕХНОСФЕРА, 2020. — 192 с. Табл. 12. Ил. 46. Библиогр.: 66 назв. ISBN 978-5-94836-597-8

Рассмотрены вопросы интегрирования по времени дифференциальных уравнений, используемых при моделировании нестационарных явлений. Приведены численные методы, которые нашли применение при решении различных научных и технических задач, исследованиях технологических процессов. Представлены различные варианты численных методов прямого интегрирования уравнений первого и второго порядков шагами по времени (явные и неявные, одношаговые и многошаговые). Приведены тексты реализующих программ с подробными комментариями. На простых примерах продемонстрированы возможности и свойства методов. Уделено внимание вопросам тестирования программ и выбора рационального метода интегрирования, удовлетворяющего требованиям по точности и устойчивости вычислений.

Предназначено для специалистов, занятых решением нестационарных задач, а также преподавателей, студентов и аспирантов технических вузов.

УДК 519.682

ББК 32.97

© Гарифуллин М.Ф., 2020

© АО «РИЦ «ТЕХНОСФЕРА», оригинал-макет, оформление, 2020

ISBN 978-5-94836-597-8

Содержание

Введение	4
ГЛАВА 1. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ	11
1.1. Особенности применения численных методов	11
1.2. Численное интегрирование уравнений первого порядка	18
1.3. Численное интегрирование уравнений второго порядка	34
ГЛАВА 2. РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ	59
2.1. Решение уравнений первого порядка	63
2.2. Решение уравнений второго порядка	84
2.3. Моделирование систем с n степенями свободы	100
ГЛАВА 3. ТЕСТИРОВАНИЕ ПРОГРАММ	132
3.1. Интегрирование уравнений первого порядка	136
3.2. Интегрирование уравнений второго порядка	149
3.3. Интегрирование уравнений второго порядка с применением методов интегрирования уравнений первого порядка	159
3.4. Интегрирование уравнений второго порядка с применением неявных методов	177
Заключительные замечания	184
Литература	186

ГЛАВА I

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ

I.1. Особенности применения численных методов

В книге рассматривается группа численных методов, основанных на последовательном, пошаговом моделировании нестационарных явлений во временной области. Такие численные методы (методы прямого интегрирования) не требуют выполнения предварительных преобразований исходных уравнений, описывающих динамику процесса. В отличие от численных методов решения в частотной области, они обладают существенно более широкими возможностями моделирования рассматриваемых нестационарных явлений, с подробным учетом всевозможных деталей и различного рода особенностей. Это обусловлено применением локальных функций для аппроксимации законов изменений параметров задачи в малой окрестности решения на каждом шаге по времени. Но помимо преимуществ, имеются и определенные ограничения.

При численной реализации пошаговых методов моделирования нестационарных процессов следует учитывать ряд факторов, влияющих на точность, сходимость и устойчивость решения.

Выбор величины шага по времени

Методы решения нестационарных задач во временной области предполагают рассмотрение процессов в последовательные моменты времени с использованием сравнительно небольших шагов по времени Δt . Считается, что искомые параметры плавно меняются в пределах этого шага.

Это позволяет принимать простые законы их изменения в малой окрестности решения. Обычно используются локальные полиномы невысокого порядка. Существуют способы, в которых время является дополнительным измерением (четвертым, если решается трехмерная задача). Ввиду высоких требований к ресурсам ЭВМ, связанных с необходимостью решения задач очень большой размерности и наличием ряда других ограничений, такие подходы не получили большого распространения. Более успешными и экономичными оказались подходы, в которых решение последовательно формируется от предыдущего шага по времени к последующему. В начале расчета на первом шаге по времени используются задаваемые начальные условия. Если решение имеет разрывы, то оно рассматривается по отдельным гладким участкам, состыкованным между собой с учетом величин разрывов. В другом варианте разрыв моделируется коротким гладким участком с использованием дополнительного демпфирования решения и уменьшенного шага по времени.

Рассматриваемые методы имеют ограничения на величину шага по времени Δt . Эти ограничения связаны как с физикой моделируемого процесса, так и с требованиями обеспечения устойчивости применяемых вычислительных процедур.

Ограничения, связанные с характерным временем моделируемого процесса

При рассмотрении переходных режимов нагружения величина шага по времени Δt ограничена характерным временем моделируемого процесса T :

$$\Delta t_{\max} \leq (0.1 \div 0.05) T. \quad (1)$$

Эта оценка обусловлена использованием конечно-разностных аппроксимаций при численном решении задач. В этом случае реальные зависимости изменения параметров по времени заменяются отрезками парабол невысокого порядка. При увеличении шага Δt точность такой аппроксимации падает, получаемое решение искажается. При излишне большом шаге Δt результаты вычислений перестают соответствовать

действительности. Если сами параметры задачи (инерционные, жесткостные коэффициенты и др.) изменяются по времени, то чаще всего требуется дополнительное уменьшение величины шага Δt для обеспечения желаемой точности решения.

Величина характерного времени процесса T в большинстве случаев определяется исходя из заданных условий решаемой задачи. Это может быть длительность воздействия возмущающей нагрузки, длительность ее изменения по времени, по направлению, месту приложения; длительность периода колебаний упругой конструкции высшего учитываемого тона и т.п. При этом характерное время T предварительно оценивается по приближенным зависимостям. Если выбирать достаточно малое значение величины шага по времени $\Delta t = 0.05\Delta t_{\max}$ и менее, погрешности, связанные с неточностями в определении характерного времени T , мало влияют на получаемые результаты. При необходимости можно повторить расчет с уменьшенным (обычно вдвое) шагом по времени с целью проверки устойчивости и точности вычислений. В случае значительного расхождения полученных результатов шаг Δt вновь уменьшается, и проводятся повторные вычисления. При этом предполагается, что с уменьшением шага Δt результаты численного расчета сходятся к точному решению. Эти рассуждения связаны с повышением точности аппроксимации полиномами гладкой функции при уменьшении шага Δt . Заметим, что подобные теоретические оценки не учитывают наличие погрешностей округления, которые могут оказаться значительными при выборе слишком малого шага Δt , в случаях использования аппроксимирующих полиномов высокого порядка, при решении систем уравнений с большим количеством неизвестных и т.п. Нередки ситуации, когда с уменьшением шага Δt решение вначале уточняется, а при дальнейшем уменьшении точность ухудшается в связи с ростом влияния ошибок округления при выполнении большого объема вычислений в ЭВМ. Не все факторы вычислительного процесса поддаются правильному учету. Поэтому приближенные теоретические оценки точности и устойчивости метода следует использовать с осторожностью.

Ограничения, связанные со свойствами численного метода

Величина шага по времени Δt ограничена возможностями применяемого численного метода. В этой связи следует упомянуть, что если используется неявная схема, то жесткие ограничения на максимальную величину шага по времени теоретически могут отсутствовать, в отличие от явных схем. Однако и при использовании неявной схемы имеются свои ограничения на шаг Δt . Эти ограничения связаны с ошибками округления и конечностью представления мантиссы числа в ЭВМ.

При выборе очень мелкого шага Δt в случае использования неявной схемы элементы матрицы инерционных коэффициентов становятся слишком большими величинами по сравнению с элементами жесткостной матрицы, что ведет к заметному накоплению ошибок округления и потере точности вычислений. В таких ситуациях целесообразен переход к явным методам, которые становятся менее трудоемкими при выборе очень малых значений шага по времени Δt . Обычно такие ситуации возникают при моделировании удара, моделировании других, кратковременных, быстропротекающих процессов. И наоборот, при больших шагах Δt , когда рассматриваются процессы с характерным временем, сравнимым с периодами низших тонов собственных колебаний конструкции, целесообразно применение неявных методов.

При использовании явных методов максимальная величина шага по времени обусловлена устойчивостью процесса вычислений. Она обеспечивается, если шаг Δt меньше, чем оценка вида

$$\Delta t_{\max} \leq 2/\omega_{\max}, \quad (2)$$

где $\omega_{\max}$ — наивысшая собственная частота моделируемой системы (например, высшая частота собственных колебаний наименьшего из конечных элементов, используемых при расчете конструкции МКЭ). У различных вариантов явных методов числитель в формуле (2) может принимать другие, несколько более или менее высокие значения, например: 0.3, ..., 6, но эти отличия не являются принципиальными. В реальных вычислениях нередко используется шаг по времени, который на порядок меньше, чем (2). В любом случае явный метод для обеспече-

ния точности и устойчивости вычислений требует использования очень малой величины шага по времени Δt . Соответственно, возникает необходимость выполнения очень большого количества таких шагов для моделирования поведения системы на достаточно длительном интервале времени. Его применение оправдывают простота реализации и малая трудоемкость вычислений на каждом шаге по времени в сравнении с неявными методами.

В задачах, связанных с расчетами сжимаемых течений, для обеспечения устойчивости вычислений требуется выполнение условий Куранта — Фридрихса — Леви вида $\Delta l / \Delta t \geq V + a$, где Δl — минимальный шаг пространственной сетки в расчетной области, V — местная скорость потока, a — местная скорость звука. Или, в другом виде, ставится требование, что число Куранта $C = (V + a)\Delta t / \Delta l \leq 1$. Это означает, что область зависимостей разностных уравнений должна включать в себя область зависимостей решаемых дифференциальных уравнений. Скорость распространения информации в моделируемой непрерывной среде не должна превышать скорость распространения информации используемого численного метода. За один шаг по времени Δt звуковая (ударная) волна не должна выходить за границу расчетной ячейки. Таким образом, чем меньше размеры ячеек расчетной области течения, тем меньше должен быть задаваемый шаг по времени Δt [45—49].

Сдвиг по времени

При решении задачи во временной области могут накапливаться ошибки не только в получаемых амплитудах колебаний, но и в фазах колебаний. Может возникать сдвиг параметров по времени. Во многих случаях эти ошибки не столь важны, и особое внимание им не уделяется. Однако существуют задачи, в которых требуется правильно учитывать сдвиг фаз между нагрузкой и перемещениями, входным и выходным сигналами системы регулирования, при анализе устойчивости системы управления и др. В этих ситуациях целесообразно осуществлять дополнительный контроль и коррекцию решения, использовать один и тот же шаг по времени, один и тот же метод решения связанных задач. При наличии достаточных вычислительных ресурсов возможно рассмотрение объеди-

ненной системы уравнений суммарной размерности (например, совместное решение задач аэродинамики и прочности). Однако в последнем случае существенно увеличивается трудоемкость, усложняется алгоритм решения и реализующее его программное обеспечение.

Выбор расчетного интервала времени

Выбор расчетного интервала времени является важным звеном подготовки исходных данных. Он должен быть по возможности небольшим, так как трудоемкость решения напрямую связана с величиной этого интервала. С увеличением интервала времени почти пропорционально растут вычислительные затраты, поэтому существует тенденция к его сокращению. Однако это сокращение не может быть осуществлено произвольным образом. Интервал времени ограничен реальной длительностью моделируемых процессов. Слишком короткий интервал не позволяет в должной мере изучить поведение конструкции. В частности, при моделировании удара рассматриваемый интервал времени не может быть короче длительности самого удара; при исследовании динамики нагружения его значение не может быть меньше, чем период изменения нагрузки или период собственных колебаний низшего тона конструкции. При исследованиях динамической устойчивости, когда рассматриваемая система находится вблизи зоны потери устойчивости, амплитуды колебаний нарастают или затухают достаточно медленно. В таких случаях возникает необходимость рассмотрения больших интервалов времени с длительностью порядка многих сотен периодов колебаний. Нередко имеют место переходные процессы с колебаниями типа «биений», когда периодически рост амплитуд колебаний сменяется их последующим падением. Существуют режимы, которые физически реализуются лишь по окончании длительного переходного процесса. Моделирование и анализ подобного рода процессов требуют повышенных вычислительных затрат в связи с необходимостью проведения вычислений с очень большим количеством шагов по времени. Кроме того, ставятся жесткие требования к самому методу. Он должен обеспечивать устойчивость решения при отсутствии дополнительного демпфирования, которое искажает результаты. Не каждый численный метод интегрирования удовлетворяет этим противоречивым требованиям.

Выбор начальных значений

Выбор начальных значений параметров задачи, особенно при решении в нелинейной постановке, является ответственным этапом работы, так как конечные результаты могут существенно зависеть от этого выбора. Устойчивость системы может смениться неустойчивостью, отрывное обтекание безотрывным, трение покоя между контактирующими элементами смениться трением скольжения и наоборот. Точки бифуркации, гистерезис, наличие нескольких зон устойчивости или неустойчивости и т.п. — все это требует конкретизации исходной информации. В противном случае могут быть получены совершенно непредсказуемые результаты. Даже если получено абсолютно точное решение исходных уравнений, это решение может не соответствовать реальности при существенном влиянии нелинейных факторов и задании неверных начальных условий. Хотя все перечисленное несколько усложняет подготовку исходных данных и затрудняет проведение расчетов, следует заметить, что данная особенность решения нелинейных задач приближает вычислительный эксперимент к реальному эксперименту. Например, при решении задачи в линейной постановке нет особой разницы, чему равен угол атаки крыла: 2° или 20° . Можно даже решать задачу в безразмерном виде. В реальности параметры течения, характер течения при обтекании крыла при малых и больших углах атаки существенно отличаются, что, собственно, и моделируют нелинейные методы расчета с той или иной степенью достоверности. Таким образом, при решении нелинейных задач, с одной стороны, имеют место повышенная сложность и трудоемкость подготовки исходных данных, повышенные требования к квалификации расчетчика, с другой стороны, эти методы вынуждают более точно следовать реальной картине нагружения, конкретизировать параметры исследуемого процесса, что является преимуществом данного подхода.

Выбор численного метода

Выбор численного метода обусловлен объективными и субъективными факторами.

Объективными факторами являются реальные преимущества метода в трудоемкости вычислений, в требуемых ресурсах ЭВМ, в устойчивости

решения, в точности получаемых результатов. Эти параметры можно оценить численно при проведении сравнений результатов решений тестовых примеров, получаемых альтернативными вариантами численных методов.

Субъективными факторами являются различного рода публикации, рекламные материалы к коммерческим программам, которые навязывают продавцы этих программ потребителю. Сюда же могут быть отнесены собственный опыт использования метода, наличие многократно протестированных собственных программ, применение освоенных пользователем коммерческих программ, в которых не предусмотрены другие варианты решения задачи. Субъективные факторы сложно оценить численно, хотя для рассмотрения таких ситуаций существует метод экспертных оценок.

В научных и технических публикациях предлагается достаточно большой выбор численных методов интегрирования уравнений по времени. На практике получили распространение методы, которые уже подтвердили свои положительные качества при решении многих реальных задач. Опыт их использования может быть перенесен на новые задачи. Однако поиск более рациональных вариантов численных методов продолжается, так как каждому методу присущи свои недостатки. Об этом свидетельствует сам факт существования альтернативных вариантов этих методов. Вопросы снижения трудоемкости и повышения точности и устойчивости решения по-прежнему остаются актуальными.

1.2. Численное интегрирование уравнений первого порядка

Рассмотрение приемов численного решения удобно начать с более простых задач интегрирования уравнений первого порядка.

Существует большая группа численных методов, позволяющих осуществлять интегрирование уравнений первого порядка. Приведем некоторые варианты таких методов.

Пусть решается уравнение вида

$$\dot{x} = f(x, \tau), \quad (3)$$

к которому могут быть приведены уравнения движения, уравнения газовой динамики, термодинамики и др.

Пошаговые методы решения дифференциального уравнения (разностные методы, методы дискретного переменного) используют локальные аппроксимации искомой функции. Для последовательных расчетных моментов времени τ_i , выбранных с шагом по времени $\Delta\tau = \tau_{i+1} - \tau_i$, который в некоторых случаях может быть переменным, вычисляются дискретные значения искомой функции x_i по ее k значениям, вычисленным ранее на предыдущих k последовательных шагах. Если $k = 1$, то метод называется одношаговым, при $k > 1$ метод относят к многошаговым.

В рассматриваемых соотношениях обозначено: i — номер шага по времени. Если вычисления проводятся с постоянным шагом по времени $\Delta\tau$, что обычно имеет место, то номерам шагов по времени $i + 1, i, i - 1, i - 2, i - 3$ соответствуют моменты времени $\tau + \Delta\tau, \tau, \tau - \Delta\tau, \tau - 2\Delta\tau, \tau - 3\Delta\tau$. Индексам $i + 1/2$ и $i - 1/2$ в формулах соответствуют моменты времени $\tau + \Delta\tau/2$ и $\tau - \Delta\tau/2$.

Как правило, при использовании неявных методов вычисления проводятся с постоянным шагом по времени $\Delta\tau$, так как в противном случае возникает необходимость применения трудоемкой процедуры повторного формирования разрешающей матрицы системы уравнений. При использовании явных методов максимальная величина шага по времени $\Delta\tau$ ограничена условием устойчивости решения. Обычно эта величина очень мала, поэтому часто выбирается шаг, близкий к максимально допустимому значению. Соответственно, увеличить шаг $\Delta\tau$ нельзя по условиям устойчивости, а его существенное уменьшение ведет к дополнительному повышению вычислительных затрат. Поэтому и явные методы в большинстве случаев используют фиксированный шаг по времени.

Одношаговые методы

Явный метод Эйлера

Самым простым (и самым первым) одношаговым методом является метод Эйлера, в котором учитываются только первые два члена ряда Тейлора:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i). \quad (4)$$

В (4) и в последующих выражениях приняты обозначения: $\dot{x}_i = f(x_i, \tau_i)$ — вектор первой производной по времени, x_i — известный вектор решения, вычисленный на предыдущем шаге по времени, x_{i+1} — искомый вектор решения для следующего шага по времени. На первом шаге по времени используются заданные начальные условия для определения вектора x_1 .

При наличии возможности вычисления старших производных по времени ($\ddot{x}_i, \dddot{x}_i, \dots$) они могут быть использованы для уточнения решения подстановкой в ряд Тейлора:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i) + \frac{\Delta\tau^2}{2!} \ddot{x}_i + \frac{\Delta\tau^3}{3!} \dddot{x}_i + \dots \quad (5)$$

Метод Эйлера является явным, так как при рассмотрении систем уравнений в правой части не присутствуют взаимосвязанные компоненты вектора неизвестных x_{i+1} и нет необходимости на каждом шаге решать систему уравнений для их определения. В этом случае каждая компонента искомого вектора x_{i+1} может быть вычислена для следующего шага по времени независимо от других компонент этого вектора по правой части уравнения (4), в которой отсутствуют компоненты x_{i+1} .

Неявный метод Эйлера

Неявный метод Эйлера предполагает рассмотрение уравнений следующего вида:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta\tau \cdot f(x_{i+1}, \tau_{i+1}). \quad (6)$$

В этом уравнении искомые компоненты вектора неизвестных x_{i+1} присутствуют и в левой, и в правой частях. При рассмотрении систем с большим количеством взаимосвязанных неизвестных они не могут быть выделены непосредственно из уравнения (6) в явном виде. Для их вычисления на каждом шаге по времени требуется решение уравнения (6), учитывающего взаимные связи между компонентами искомого вектора x_{i+1} .

Неявный метод Эйлера обеспечивает более устойчивые к ошибкам вычисления, однако он более трудоемкий, сложнее организовать параллельные вычисления на многопроцессорных ЭВМ. При анализе нели-

нейных систем часто требуется итерационное уточнение решения, что дополнительно увеличивает трудоемкость.

Вариантами этого метода являются неявные методы, основанные на формулах численного дифференцирования с односторонними разностями более высокого порядка (многошаговые методы, $k = 2, 3, 4$):

$$x_{i+1} = \frac{1}{3}[4x_i - x_{i-1} + 2\Delta\tau \cdot f(x_{i+1}, \tau_{i+1})], k = 2; \quad (7)$$

$$x_{i+1} = \frac{1}{11}[18x_i - 9x_{i-1} + 2x_{i-2} + 6\Delta\tau \cdot f(x_{i+1}, \tau_{i+1})], k = 3; \quad (8)$$

$$x_{i+1} = \frac{1}{25}[48x_i - 36x_{i-1} + 16x_{i-2} - 3x_{i-3} + 12\Delta\tau \cdot f(x_{i+1}, \tau_{i+1})], k = 4. \quad (9)$$

Схема (7) сравнительно простая и менее затратная, чем (8) или (9). Поэтому она чаще применяется при расчете нестационарных течений и решении задач термодинамики.

Схема с весами

Схема с весами имеет вид:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta\tau \cdot [\sigma f(x_{i+1}, \tau_{i+1}) + (1 - \sigma)f(x_i, \tau_i)], \quad (10)$$

где σ — весовой коэффициент — «вес».

При $\sigma = 0$ схема соответствует явному методу Эйлера,

при $\sigma = 1$ — неявному методу Эйлера,

при $\sigma = 0.5$ — неявная симметричная схема (схема Кранка — Николсона).

При $\sigma \geq 0.5$ схема безусловно устойчива.

Для меньших значений σ требуется выполнение условия устойчивости. В частности, при использовании разностных выражений в системе с постоянными коэффициентами условие устойчивости решения имеет вид:

$$\Delta\tau \leq \frac{h^2}{4(0.5 - \sigma)}, \quad (11)$$

где h — шаг сетки по пространственной координате.

Схема Кранка — Николсона (схема с центральной разностью)

Применительно к решению уравнения

$$Gx + D\dot{x} = P \quad (12)$$

разностная схема имеет вид:

$$\left(\frac{1}{2}G + \frac{1}{\Delta\tau}D\right)x_{i+1} + \left(\frac{1}{2}G - \frac{1}{\Delta\tau}D\right)x_i = \frac{1}{2}(P_{i+1} + P_i). \quad (13)$$

Схема с разностью назад

$$\left(G + \frac{1}{\Delta\tau}D\right)x_{i+1} - \left(\frac{1}{\Delta\tau}D\right)x_i = P_{i+1}. \quad (14)$$

Этот вариант обладает более высоким схемным демпфированием по сравнению с предыдущим вариантом.

Трехслойная разностная схема

Трехслойная схема использует значения функций на трех последовательных временных слоях (x_{i-1} , x_i , x_{i+1}):

$$\left(\frac{1}{6}G + \frac{1}{2\Delta\tau}D\right)x_{i+1} + \frac{2}{3}Gx_i + \left(\frac{1}{6}G - \frac{1}{2\Delta\tau}D\right)x_{i-1} = \frac{1}{6}(P_{i+1} + 4P_i + P_{i-1}). \quad (15)$$

Вариантом схемы является разностная схема с использованием в правой части значения P_i , без применения процедуры сглаживания нагрузки P по времени.

Методы Рунге — Кутты

При использовании метода Рунге — Кутты на каждом шаге по времени требуется последовательно вычислять несколько значений функции $f(x, \tau)$ — производных в расчетных точках. Поэтому они считаются многоэтапными. Одним из преимуществ метода является возможность изменения шага по времени на любом этапе вычислений. Однако чаще всего расчеты выполняются с постоянным шагом по времени.

При выборе постоянного значения шага по времени и задании n шагов величина шага определяется как $\Delta\tau = \frac{(b-a)}{(n-1)}$, где a и b — начальное и конечное время. Для каждого нового шага ($i = 2, \dots, n$) вычисляется время $\tau_i = \tau_{i-1} + \Delta\tau$, находится решение $x_i = x_{i-1} + \Delta x_{i-1}$. Приращение решения Δx_{i-1} в методе Рунге — Кутты порядка p ($j = 1, 2, \dots, p$) определяется выражением $\Delta x_{i-1} = \sum_{j=1}^p d_j k_j$, где $k_i = \Delta\tau \cdot f(x_{i-1} + c_j k_j, \Delta\tau_{i-1} + c_j \Delta\tau)$.

Коэффициент $c_1 = 0$, другие коэффициенты (c_j и d_j) определяются из условия равенства подобных членов при одинаковых степенях $\Delta\tau$ при разложении решения в ряд Тейлора до слагаемого порядка $\Delta\tau^{p+1}$.

Метод Рунге — Кутты является самостартующим, так как для вычислений достаточно иметь информацию о решении на одном, предыдущем шаге по времени x_{i-1} . Решение на первом шаге определяется заданными начальными условиями. Ниже приведены некоторые варианты метода Рунге — Кутты.

Метод Рунге — Кутты первого порядка совпадает с методом Эйлера.

Метод Рунге — Кутты второго порядка (вариант)

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \quad (16)$$

где $k_1 = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$k_2 = \Delta\tau \cdot f(x_i + k_1, \tau_i + \Delta\tau)$.

Метод Рунге — Кутты второго порядка (вариант)

$$x_{i+1} = x_i + \left(\frac{1}{4}k_1 + \frac{3}{4}k_2 \right), \quad (17)$$

где $k_1 = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$k_2 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{2}{3}k_1, \tau_i + \frac{2}{3}\Delta\tau\right)$.

Метод Рунге — Кутты третьего порядка (вариант)

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3), \quad (18)$$

где $k_1 = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$$k_2 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{1}{2}k_1, \tau_i + \frac{\Delta\tau}{2}\right),$$

$$k_3 = \Delta\tau \cdot f(x_i + 2k_2 - k_1, \tau_i + \Delta\tau).$$

Метод Рунге — Кутты третьего порядка (вариант)

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_3), \quad (19)$$

где $k_1 = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$$k_2 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{1}{3}k_1, \tau_i + \frac{\Delta\tau}{3}\right),$$

$$k_3 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{2}{3}k_2, \tau_i + \frac{2}{3}\Delta\tau\right).$$

Метод Рунге — Кутты четвертого порядка

(наиболее часто используемый вариант)

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (20)$$

где $k_1 = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$$k_2 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{1}{2}k_1, \tau_i + \frac{\Delta\tau}{2}\right),$$

$$k_3 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{1}{2}k_2, \tau_i + \frac{\Delta\tau}{2}\right),$$

$$k_4 = \Delta\tau \cdot f(x_i + k_3, \tau_i + \Delta\tau).$$

Метод Рунге — Кутты четвертого порядка (вариант)

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4), \quad (21)$$

где $k_1 = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$$k_2 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{1}{3}k_1, \tau_i + \frac{\Delta\tau}{3}\right),$$

$$k_3 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i - \frac{1}{3}k_1 + k_2, \tau_i + \frac{2}{3}\Delta\tau\right),$$

$$k_4 = \Delta\tau \cdot f(x_i + k_1 - k_2 + k_3, \tau_i + \Delta\tau).$$

Метод Рунге — Кутты четвертого порядка (вариант)

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6}\left[k_1 + (2 - \sqrt{2})k_2 + (2 + \sqrt{2})k_3 + k_4\right], \quad (22)$$

где $k_1 = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$$k_2 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{1}{2}k_1, \tau_i + \frac{\Delta\tau}{2}\right),$$

$$k_3 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)k_1 + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)k_2, \tau_i + \frac{\Delta\tau}{2}\right),$$

$$k_4 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i - \frac{1}{\sqrt{2}}k_2 + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)k_3, \tau_i + \Delta\tau\right).$$

Метод Рунге — Кутты четвертого порядка (вариант)

$$x_{i+1} = x_i + 0.174750k_1 - 0.551481k_2 + 1.205535k_3 + 0.171185k_4, \quad (23)$$

где $k_1 = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$$k_2 = \Delta\tau \cdot f(x_i + 0.4k_1, \tau_i + 0.4\Delta\tau),$$

$$k_3 = \Delta\tau \cdot f(x_i + 0.296978k_1 + 0.158760k_2, \tau_i + 0.455737\Delta\tau),$$

$$k_4 = \Delta\tau \cdot f(x_i + 0.218100k_1 - 3.050965k_2 + 3.832864k_3, \tau_i + \Delta\tau).$$

Варианты метода Рунге — Кутты более высоких порядков требуют повышенных вычислительных затрат и могут использоваться при рас-

смотреии задач, когда решение заведомо гладкое. В противном случае применение этих методов может быть ограничено устойчивостью получаемого решения.

Метод Рунге — Кутты — Мерсона

Метод Рунге — Кутты — Мерсона представляет собой модификацию метода Рунге — Кутты четвертого порядка с возможностью оценки погрешности на каждом шаге и автоматического принятия решения об изменении величины шага интегрирования:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2}(k_4 + k_5), \quad (24)$$

где $\Delta\tau_3 = \Delta\tau/3$,

$$k_1 = \Delta\tau_3 \cdot f(x_i, \tau_i),$$

$$k_2 = \Delta\tau_3 \cdot f(x_i + k_1, \tau_i + \Delta\tau_3),$$

$$k_3 = \Delta\tau \cdot f\left(x_i + \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \tau_i + \Delta\tau_3\right),$$

$$k_4 = k_1 + 4\Delta\tau_3 \cdot f\left(x_i + 0.375(k_1 + k_3), \tau_i + \frac{\Delta\tau}{2}\right),$$

$$k_5 = \Delta\tau_3 \cdot f(x_i + 1.5(k_4 - k_3), \tau_i + \Delta\tau).$$

На каждом шаге можно оценить погрешность $R = \frac{2k_4 - 3k_3 - k_5}{10}$.

Если это значение меньше заданной величины ϵ , то можно увеличить шаг интегрирования $\Delta\tau$ с целью ускорения вычислений.

Метод Штермера

Значение x_{i+1} вычисляется по одной из формул:

$$x_{i+1} = x_i + q_i + \frac{1}{2}\Delta q_{i-1}, \quad (25)$$

$$x_{i+1} = x_i + q_i + \frac{1}{2}\Delta q_{i-1} + \frac{5}{12}\Delta^2 q_{i-2}, \quad (26)$$

$$x_{i+1} = x_i + q_i + \frac{1}{2}\Delta q_{i-1} + \frac{5}{12}\Delta^2 q_{i-2} + \frac{3}{8}\Delta^3 q_{i-3}, \quad (27)$$

где $q_i = \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i)$,

$$\Delta q_{i-1} = q_i - q_{i-1},$$

$$\Delta^2 q_{i-2} = \Delta q_{i-1} - \Delta q_{i-2},$$

$$\Delta^3 q_{i-3} = \Delta^2 q_{i-2} - \Delta^2 q_{i-3}.$$

Для старта процесса интегрирования методом Штермера первые значения x_i могут быть вычислены другими методами, например методом Эйлера, Рунге — Кутты и др.

Многошаговые методы

Многошаговые методы при проведении вычислений используют информацию о поведении решения не на одном, а на нескольких предыдущих шагах по времени. При наличии гладких функций это позволяет несколько повысить точность решения. Эти методы представляют собой попытку сочетать скорость и простоту реализации явных методов с устойчивостью неявных.

Линейные многошаговые методы могут быть представлены в виде

$$x_{i+1} = \sum_{j=1}^k \alpha_j x_{i+1-j} + \Delta\tau \cdot \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_{i+1-j}, \tau_{i+1-j}). \quad (28)$$

Обычно на каждом шаге по времени используют два многошаговых метода: явный метод — предиктор (прогноз) для получения первого приближения x_{i+1} , после чего один или несколько раз используют шаг-корректор для получения уточненного решения x_{i+1} . Излишне большое количество этапов (итераций) коррекции на одном шаге по времени существенно не повышает точность решения, при этом увеличиваются вычислительные затраты. Для повышения точности при тех же затратах целесообразно просто выполнить расчет с малым количеством итераций, но с уменьшенной величиной шага по времени.

Метод Эйлера — Коши (метод Хьюна)

$$x_{i+1} = x_i + \frac{\Delta\tau}{2} \cdot [f(x_{i+1}, \tau_{i+1}) + f(x_i, \tau_i)]. \quad (29)$$

На первом этапе (предиктор) делается прогноз решения методом Эйлера (4), на последующих этапах используется уточнение (корректор) решения с помощью выражения (29).

Метод Эйлера с пересчетом

Метод Эйлера с пересчетом (метод срединных точек) состоит из двух этапов:

$$x_{i+1/2} = x_i + \frac{\Delta\tau}{2} f(x_i, \tau_i), \quad (30)$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta\tau \cdot f(x_{i+1/2}, \tau_{i+1/2}). \quad (31)$$

На первом этапе находится приближенное решение, соответствующее половине шага по времени, на втором — находится решение методом Эйлера с учетом прогноза решения и его производной, вычисленных в середине шага по времени. Схема имеет второй порядок аппроксимации по времени.

Можно предложить и другие многошаговые варианты, например на первом этапе делается прогноз по формуле (30), на втором этапе делается коррекция с использованием весового коэффициента σ , значение которого выбирается исходя из условий обеспечения устойчивости решения посредством выполнения серии пробных расчетов:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta\tau \cdot [(1 - \sigma)f(x_{i+1/2}, \tau_{i+1/2}) + \sigma f(x_i, \tau_i)].$$

Метод Димсдейла четвертого порядка

Предиктор (старт):

$$x_{i+1} = x_i + \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i), \quad (32)$$

$$x_{i+2} = x_i + 2\Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i).$$

Корректор (итерационно):

$$\begin{aligned}x_{i+1} &= \frac{1}{2}(x_i + x_{i+2}) + \frac{1}{4}\Delta\tau[f(x_i, \tau_i) - f(x_{i+2}, \tau_i + 2\Delta\tau)], \\x_{i+2} &= x_i + \frac{1}{3}\Delta\tau[f(x_i, \tau_i) + 4f(x_{i+1}, \tau_i + \Delta\tau) + f(x_{i+2}, \tau_i + 2\Delta\tau)].\end{aligned}\quad (33)$$

Многошаговые методы Адамса

Метод Адамса — Башфорта (p-го порядка точности)

$$\begin{aligned}x_{i+1} &= x_i + \frac{\Delta\tau}{2}[3f(x_i, \tau_i) - f(x_{i-1}, \tau_{i-1})], p = 2, \\x_{i+1} &= x_i + \frac{\Delta\tau}{12}[23f(x_i, \tau_i) - 16f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + 5f(x_{i-2}, \tau_{i-2})], p = 3, \\x_{i+1} &= \\&= x_i + \frac{\Delta\tau}{24}[55f(x_i, \tau_i) - 59f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + 37f(x_{i-2}, \tau_{i-2}) - 9f(x_{i-3}, \tau_{i-3})], \\p &= 4.\end{aligned}\quad (34)$$

Метод Адамса — Моултона (p-го порядка точности)

$$\begin{aligned}x_{i+1} &= x_i + \frac{\Delta\tau}{2}[f(x_{i+1}, \tau_{i+1}) + f(x_i, \tau_i)], p = 2, \\x_{i+1} &= x_i + \frac{\Delta\tau}{12}[5f(x_{i+1}, \tau_{i+1}) + 8f(x_i, \tau_i) - f(x_{i-1}, \tau_{i-1})], p = 3, \\x_{i+1} &= x_i + \\&+ \frac{\Delta\tau}{24}[9f(x_{i+1}, \tau_{i+1}) + 19f(x_i, \tau_i) - 5f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + f(x_{i-2}, \tau_{i-2})], p = 4.\end{aligned}\quad (35)$$

Многошаговый метод Адамса предиктор-корректор четвертого порядка

Предиктор:

$$\begin{aligned}x_{i+1} &= x_i + \\&+ \frac{\Delta\tau}{24}[55f(x_i, \tau_i) - 59f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + 37f(x_{i-2}, \tau_{i-2}) - 9f(x_{i-3}, \tau_{i-3})].\end{aligned}\quad (36)$$

Корректор:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{\Delta\tau}{24}[9f(x_{i+1}, \tau_{i+1}) + 19f(x_i, \tau_i) - 5f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + f(x_{i-2}, \tau_{i-2})]. \quad (37)$$

**Многошаговый метод с предсказанием по Адамсу — Башфарту,
с коррекцией по Адамсу — Мултону и модификацией**

Предиктор:

$$\begin{aligned} x_{i+1}^* &= \\ &= x_i + \frac{\Delta\tau}{24}[55f(x_i, \tau_i) - 59f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + 37f(x_{i-2}, \tau_{i-2}) - 9f(x_{i-3}, \tau_{i-3})], \\ x_{i+1}^{**} &= x_{i+1}^* + \frac{251}{270}(x_i^{***} - x_i^*). \end{aligned} \quad (38)$$

Корректор:

$$\begin{aligned} x_{i+1}^{***} &= x_i + \\ &+ \Delta\tau \cdot \frac{1}{24}[9f(x_{i+1}^{**}, \tau_{i+1}) + 19f(x_i, \tau_i) - 5f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + f(x_{i-2}, \tau_{i-2})], \\ x_{i+1} &= x_{i+1}^{***} - \frac{19}{270}(x_{i+1}^{***} - x_{i+1}^*). \end{aligned} \quad (39)$$

Метод Хемминга

Предиктор:

$$\begin{aligned} x_{i+1}^* &= x_{i-3} + \Delta\tau \cdot \frac{4}{3}[2f(x_i, \tau_i) - f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + 2f(x_{i-2}, \tau_{i-2})], \\ x_{i+1}^{**} &= x_{i+1}^* + \frac{112}{121}(x_i^{***} - x_i^*). \end{aligned} \quad (40)$$

Корректор:

$$\begin{aligned} x_{i+1}^{***} &= \frac{1}{8}(9x_i - x_{i-2}) + \Delta\tau \cdot \frac{3}{8}[f(x_{i+1}^{**}, \tau_{i+1}) + 2f(x_i, \tau_i) - f(x_{i-1}, \tau_{i-1})], \\ x_{i+1} &= x_{i+1}^{***} - \frac{9}{121}(x_{i+1}^{***} - x_{i+1}^*). \end{aligned} \quad (41)$$

Метод Милна

Предиктор:

$$\begin{aligned}
 x_{i+1}^* &= x_{i-3} + \Delta\tau \cdot \frac{4}{3} [2f(x_i, \tau_i) - f(x_{i-1}, \tau_{i-1}) + 2f(x_{i-2}, \tau_{i-2})], \\
 x_{i+1}^{**} &= x_{i+1}^* + \frac{28}{29} (x_i^{***} - x_i^*).
 \end{aligned}
 \tag{42}$$

Корректор:

$$\begin{aligned}
 x_{i+1}^{***} &= x_{i-1} + \Delta\tau \cdot \frac{1}{3} [f(x_{i+1}^{**}, \tau_{i+1}) + 4f(x_i, \tau_i) + f(x_{i-1}, \tau_{i-1})], \\
 x_{i+1} &= x_{i+1}^{***} - \frac{1}{29} (x_{i+1}^{***} - x_{i+1}^*).
 \end{aligned}
 \tag{43}$$

Метод Гира четвертого порядка

Предиктор:

$$x_{i+1} = 4\Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i) + \frac{x_{i-3} - 10x_i}{3} - 2x_{i-2} + 6x_{i-1}. \tag{44}$$

Корректор (итерационно):

$$x_{i+1} = \frac{12\Delta\tau \cdot f(x_{i+1}, \tau_{i+1}) - 3x_{i-3} + 16x_{i-2} - 36x_{i-1} + 48x_i}{25}. \tag{45}$$

Двухшаговая схема

Предиктор:

$$x_{i+1}^* = x_i + \Delta\tau \cdot f(x_i, \tau_i). \tag{46}$$

Корректор:

$$x_{i+1} = \frac{1}{2} [x_{i+1}^* + x_i + \Delta\tau \cdot f(x_{i+1}^*, \tau_{i+1})]. \tag{47}$$

Различные варианты схем интегрирования (явный метод Р.В. Мак-Кормака, схема Лакса — Вендроффа, П. Катлера, Г. Ломакса) нашли применение при решении задач газовой динамики. В частности, если имеется двумерное уравнение:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = - \left(\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} \right), \quad (48)$$

то численное решение может быть получено по одношаговой схеме Лакса:

$$\begin{aligned} \Phi_{i,j}^{n+1} = & \frac{1}{4} (\Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^n + \Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^n) - \\ & - \Delta \tau \left(\frac{F_{i+1,j}^n - F_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \frac{G_{i,j+1}^n - G_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) \end{aligned} \quad (49)$$

или по двухшаговой схеме Лакса — Вендроффа:

предиктор:

$$\begin{aligned} \Phi_{i,j}^{n+1/2} = & \frac{1}{4} (\Phi_{i-1,j}^n + \Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i,j-1}^n + \Phi_{i,j+1}^n) - \\ & - \frac{\Delta \tau}{2} \left(\frac{F_{i+1,j}^n - F_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \frac{G_{i,j+1}^n - G_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (50)$$

корректор:

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = \Phi_{i,j}^n - \Delta \tau \left(\frac{F_{i+1,j}^{n+1/2} - F_{i-1,j}^{n+1/2}}{2\Delta x} + \frac{G_{i,j+1}^{n+1/2} - G_{i,j-1}^{n+1/2}}{2\Delta y} \right). \quad (51)$$

В соотношениях (49—51) индексы i и j соответствуют узлам координатной сетки; индекс n соответствует номеру шага по времени; производные по пространственным координатам $\frac{\partial F}{\partial x}$ и $\frac{\partial G}{\partial y}$ вычисляются с помощью центральных разностей. Здесь обозначено: $\Delta \tau$ — величина шага