НОВІ ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

Підківка Л. І., Грипинська Н. В., Цегелик Г. Г.
Львівський національний університет імені Івана Франка

Апарат некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій дійсної змінної, заданих аналітично чи таблично, має широке застосування у чисельному аналізі для побудови нових чисельних методів розв'язування різних класів задач алгебри, математичного аналізу, диференціальних рівнянь тощо. Зокрема, за допомогою цього апарату побудовано чисельний метод відшукання екстремуму негладких і розривних функцій, виведені формули мажорантного типу для наближеного обчислення визначених інтегралів. Його також використано для апроксимації функцій. У роботі розглядається використання апарату некласичних мажорант і діаграм Ньютона для побудови нових чисельних методів розв'язування задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь.

Розглянемо задачу Коші для звичайного диференціального рівняння

$$y' = f(x, y), \tag{1}$$

$$y(x_0) = y_0. \tag{2}$$

Припустимо, що розв'язок цієї задачі треба знайти на проміжку $[x_0, x_0 + a]$, де $a > 0$. Вважатимемо, що в області G, яка містить прямокутник $R = \{x_0 \le x \le x_0 + a, |y - y_0| \le b\}$, функція $f(x, y)$ є неперервною і задовольняє умову Ліпшиця за y зі сталою L.

Виберемо на проміжку $[x_0, x_0 + a]$ систему точок $x_0, x_1, \dots, x_n$, де $x_k = x_0 + kh$ $(k = 0, 1, \dots, n)$, $h > 0$, $x_n \le x_0 + a$. Використовуючи апарат некласичних мажорант і діаграм Ньютона функцій [1, 2], для чисельного розв'язування задачі (1), (2) нами побудовано три нових чисельних методи відшукання наближених значень $y_1, y_2, \dots, y_n$ точного розв'язку $y = y(x)$ в точках $x_1, x_2, \dots, x_n$. Розглянуто питання збіжності, точності і обчислювальної стійкості цих методів.

Нехай $y = y(x)$ – шуканий розв'язок задачі (1), (2). Підставимо його в рівняння (1), одержимо тотожність

$$y'(x) \equiv f(x, y(x)). \qquad (3)$$

Проінтегруємо тотожність (3) на кожному з проміжків $[x_i, x_{i+1}]$ $(i = 0,1,...,n-1)$. Дістанемо

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))\mathrm{d}x. \qquad (4)$$

Не зменшуючи загальності, будемо вважати, що $f(x, y(x)) > 0$ для всіх $x \in [x_0, x_0 + a]$.

1. Метод, який використовує заміну підінтегральної функції некласичною мажорантою Ньютона всередині заданого проміжку.

Замінимо підінтегральну функцію $f(x, y(x))$ мажорантою Ньютона $M_f(x)$, побудованою за двома точками $(x_i, f(x_i, y(x_i)))$ і $(x_{i+1}, f(x_{i+1}, y(x_{i+1})))$. Матимемо

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} M_f(x)\,\mathrm{d}x + R_{i+1},$$

де

$$M_f(x) = \left(A_i^{x_{i+1}-x} B_i^{x-x_i}\right)^{\frac{1}{h}},$$

$$A_i = f(x_i, y(x_i)), \quad B_i = f(x_{i+1}, y(x_{i+1})),$$

R_{i+1} – залишковий член.

Обчисливши при $A_i \neq B_i$ інтеграл, матимемо

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h\frac{f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) - f(x_i, y(x_i))}{\ln\left(f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))/f(x_i, y(x_i))\right)} + R_{i+1}.$$

Отже, для відшукання наближених значень $y_1, y_2, ..., y_n$ розв'язку $y = y(x)$ задачі (1), (2) одержуємо формулу

$$y_{i+1} = y_i + h\frac{f(x_{i+1}, y_{i+1}) - f(x_i, y_i)}{\ln\left(f(x_{i+1}, y_{i+1})/f(x_i, y_i)\right)} \quad (i = 0,1,...,n-1), \qquad (5)$$

де $y_0 = y(x_0)$.

Для відшукання наближеного значення y_{i+1} можна використати ітераційний процес

$$y_{i+1}^{(k+1)} = y_i + h\frac{f\left(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)}\right) - f(x_i, y_i)}{\ln\left(f\left(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)}\right)/f(x_i, y_i)\right)} \quad (k = 0,1,\ldots), \quad y_{i+1}^{(0)} = y_i . \quad (6)$$

2. Метод, який використовує заміну підінтегральної функції некласичною мажорантою Ньютона зовні заданого проміжку.

Замінимо в (4) підінтегральну функцію мажорантою Ньютона $M_f(x)$, побудованою за двома точками $(x_{i-1}, f(x_{i-1}, y(x_{i-1})))$ і $(x_i, f(x_i, y(x_i)))$,

$$M_f(x) = f(x_{i-1}, y(x_{i-1}))R_i^{-(x-x_{i-1})},$$

де

$$R_i = \left(\frac{f(x_{i-1}, y(x_{i-1}))}{f(x_i, y(x_i))}\right)^{\frac{1}{h}}.$$

Тоді одержимо

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + f(x_{i-1}, y(x_{i-1}))\int_{x_i}^{x_{i+1}} R_i^{-(x-x_{i-1})}\,\mathrm{d}x .$$

Обчисливши інтеграл при $R_i \neq 1$, матимемо

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h\frac{f(x_i, y(x_i))}{f(x_{i-1}, y(x_{i-1}))}\frac{f(x_i, y(x_i)) - f(x_{i-1}, y(x_{i-1}))}{\ln(f(x_i, y(x_i))/f(x_{i-1}, y(x_{i-1})))}.$$

Тому для відшукання y_{i+1} одержуємо формулу

$$y_{i+1} = y_i + h\frac{f(x_i, y_i)}{f(x_{i-1}, y_{i-1})}\frac{f(x_{i-1}, y_{i-1}) - f(x_i, y_i)}{\ln(f(x_{i-1}, y_{i-1})/f(x_i, y_i))} \quad (i = 1,2,\ldots,n-1), \quad (7)$$

де значення y_1 повинно бути знайдене за допомогою іншого методу.

3. Метод, який використовує апроксимацію похідної некласичною мажорантою Ньютона.

Не зменшуючи загальності, будемо вважати, що $y(x) > 0$ для всіх $x \in [x_0, x_0 + a]$. На кожному з проміжків $[x_i, x_{i+1}]$ $(i = 0,1,\ldots,n-1)$ замінимо $y'(x)$ на похідну від мажоранти Ньютона $M_y(x)$, побудовану за двома точками $(x_i, y(x_i))$ і $(x_{i+1}, y(x_{i+1}))$,

$$M'_y(x) = \frac{\ln y(x_{i+1}) - \ln y(x_i)}{x_{i+1} - x_i} M_y(x).$$

Одержимо

$$\frac{\ln y(x_{i+1}) - \ln y(x_i)}{x_{i+1} - x_i} M_y(x) = f\big(x, y(x)\big) + R_{i+1},$$

де R_{i+1} – залишковий член. Оскільки $x_{i+1} - x_i = h$, то при $x = x_i$ одержуємо

$$\frac{\ln y(x_{i+1}) - \ln y(x_i)}{h} y(x_i) = f\big(x_i, y(x_i)\big) + R_{i+1}.$$

Тому для відшукання наближеного значення y_{i+1} розв'язку в точці $x = x_{i+1}$ дістаємо формулу

$$\frac{\ln y_{i+1} - \ln y_i}{h} y_i = f(x_i, y_i)$$

або

$$y_{i+1} = y_i \exp\left(\frac{h}{y_i} f(x_i, y_i)\right) \quad (i = 0, 1, \ldots, n-1). \tag{8}$$

Збіжність усіх трьох методів (5), (7), (8) визначається наступною теоремою.

Теорема. Якщо в області G, яка містить прямокутник $R = \{x_0 \le x \le x_0 + a, |y - y_0| \le b\}$, функція $f(x,y)$ неперервна, задовольняє умову Ліпшиця за y з сталою L і

$$\left|\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right| = \left|\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f\right| \le N < \infty,$$

де N – деяка стала, то наближені значення $y_1, y_2, \ldots, y_n$ при $h \to 0$ рівномірно відносно x збігаються до точного розв'язку $y = y(x)$ задачі (1), (2).

Доведення цієї теореми у випадку першого методу приведене в [3], у випадку другого методу – в [4]. Методика доведення теореми для третього методу аналогічна як і для перших двох. При цьому використовується розклад функції $\exp\big(h f(x_i, y_i)/y_i\big)$ в ряд Тейлора. В результаті чого одержуємо формулу

$$y_{k+1} = y_k + h f(x_k, y_k) + O\big(h^2\big).$$

Теореми про існування і єдиність розв'язку нелінійного рівняння (5) та збіжність ітераційного процесу (6) до розв'язку цього рівняння приведені в [5].

Усі три методи є обчислювально стійкими. Доведемо це твердження на прикладі другого методу.

Нехай $\widetilde{y}_0$ – наближення точного початкового значення y_0, ε'_0 – абсолютна похибка початкового наближення, $\widetilde{y}_1$ – наближене значення до y_1, а ε'_1 – абсолютна похибка наближення на першому кроці, тобто

$$\varepsilon'_0 = \left| \widetilde{y}_0 - y_0 \right|,\ \varepsilon'_1 = \left| \widetilde{y}_1 - y_1 \right|.$$

Тоді замість формули (7) для обчислення наближених значень розв'язку $y = y(x)$ в точках $\left(x_{i-1}, f\left(x_{i-1}, y(x_{i-1})\right)\right)$ одержимо

$$\widetilde{y}_{i+1} = \widetilde{y}_i + h\frac{f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right)}{f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)}\frac{f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right) - f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)}{\ln\left(f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right) / f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)\right)}\ (k = 1, 2, ..., n-1).$$

Якщо позначити

$$\varepsilon'_i = \left| \widetilde{y}_i - y_i \right| \quad (i = 2, 3, ..., n),$$

то

$$\varepsilon'_{i+1} = \left| \widetilde{y}_{i+1} - y_{i+1} \right| =$$

$$= \left| (\widetilde{y}_i - y_i) + h\left(\frac{f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right)}{f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)}\frac{f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right) - f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)}{\ln\left(f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right) / f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)\right)} - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \frac{f\left(x_i, y_i\right)}{f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)}\frac{f\left(x_i, y_i\right) - f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)}{\ln\left(f\left(x_i, y_i\right) / f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)\right)} \right) \right| \le$$

$$\le \varepsilon'_i + h\left| \frac{f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right)}{f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)}\frac{f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right) - f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)}{\ln\left(f\left(x_i, \widetilde{y}_i\right) / f\left(x_{i-1}, \widetilde{y}_{i-1}\right)\right)} - \right.$$

$$\left. - \frac{f\left(x_i, y_i\right)}{f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)}\frac{f\left(x_i, y_i\right) - f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)}{\ln\left(f\left(x_i, y_i\right) / f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)\right)} \right|.$$

Оскільки на основі границі

$$\lim_{x \to 0} (1 + x)^{\frac{1}{x}} = e$$

одержуємо

$$\lim_{h\to 0}\frac{f(x_i,\widetilde{y}_i)-f(x_{i-1},\widetilde{y}_{i-1})}{\ln\left(f(x_i,\widetilde{y}_i)\ f(x_{i-1},\widetilde{y}_{i-1})\right)}=f(x_{i-1},\widetilde{y}_{i-1}),$$

$$\lim_{h\to 0}\frac{f(x_i,y_i)-f(x_{i-1},y_{i-1})}{\ln\left(f(x_i,y_i)\ f(x_{i-1},y_{i-1})\right)}=f(x_{i-1},y_{i-1}),$$

то

$$\frac{f(x_i,\widetilde{y}_i)}{f(x_{i-1},\widetilde{y}_{i-1})}\frac{f(x_i,\widetilde{y}_i)-f(x_{i-1},\widetilde{y}_{i-1})}{\ln\left(f(x_i,\widetilde{y}_i)\ f(x_{i-1},\widetilde{y}_{i-1})\right)}=f(x_i,\widetilde{y}_i)+\widetilde{\delta}_i(h),$$

$$\frac{f(x_i,y_i)}{f(x_{i-1},y_{i-1})}\frac{f(x_i,y_i)-f(x_{i-1},y_{i-1})}{\ln\left(f(x_i,y_i)\ f(x_{i-1},y_{i-1})\right)}=f(x_i,y_i)+\delta_i(h),$$

де $\widetilde{\delta}_i(h)\to 0$ і $\delta_i(h)\to 0$ при $h\to 0$. Тому

$$\varepsilon'_{i+1}\le\varepsilon'_i+h\left|\left(f(x_i,\widetilde{y}_i)-f(x_i,y_i)\right)+\left(\widetilde{\delta}_i(h)-\delta_i(h)\right)\right|.$$

Функція $f(x,y)$ задовольняє умову Ліпшиця за y з сталою L, тому

$$\varepsilon'_{i+1}\le\varepsilon'_i+Lh\left|\widetilde{y}_i-y_i\right|+h\left|\widetilde{\delta}_i(h)-\delta_i(h)\right|,$$

або

$$\varepsilon'_{i+1}\le(1+Lh)\varepsilon'_i+h\overline{\delta}_i(h), \tag{9}$$

де $\overline{\delta}_i(h)=\left|\widetilde{\delta}_i(h)-\delta_i(h)\right|$. При цьому $\overline{\delta}_i(h)\to 0$ при $h\to 0$. Із (9) при $i=1,2,...,n-1$ одержуємо

$$\varepsilon'_2\le(1+Lh)\varepsilon'_1+h\overline{\delta}_1(h);$$

$$\varepsilon'_3\le(1+Lh)\varepsilon'_2+h\overline{\delta}_2(h)\le(1+Lh)^2\varepsilon'_1+h\left((1+Lh)\overline{\delta}_1(h)+\overline{\delta}_2(h)\right);$$

. . . .

$$\varepsilon'_n\le(1+Lh)^{n-1}\varepsilon'_1+h\left((1+Lh)^{n-2}\overline{\delta}_1(h)+(1+Lh)^{n-3}\overline{\delta}_2(h)+...+\overline{\delta}_{n-1}(h)\right).$$

Якщо позначити

$$\max_{1\le i\le n-1}\overline{\delta}_i(h)=\delta(h),$$

то

$$\varepsilon'_n\le(1+Lh)^{n-1}\varepsilon'_1+h\delta(h)\left((1+Lh)^{n-2}+(1+Lh)^{n-3}+...+1\right),$$

або

$$\varepsilon'_n\le(1+Lh)^{n-1}\varepsilon'_1+\frac{1}{L}\delta(h)\left((1+Lh)^{n-1}-1\right).$$

Оскільки при $u > 0$ виконується нерівність $e^u > 1 + u$, то

$$\varepsilon'_n \le e^{L h(n-1)} \varepsilon'_1 + \frac{1}{L} \delta(h) \left(e^{L h(n-1)} - 1\right),$$

або

$$\varepsilon'_n < e^{a L} \varepsilon'_1 + \frac{1}{L} \delta(h) \left(e^{a L} - 1\right).$$

Із одержаної нерівності випливає, що похибка початкових даних не нагромаджується, тобто метод має обчислювальну стійкість.

Оскільки некласична мажоранта Ньютона на кожному з проміжків $[x_i, x_{i+1}]$ є опуклою функцією, то перший метод дає найбільш точні результати, коли права частина диференціального рівняння $f(x, y(x))$ є опуклою функцією. Якщо права частина диференціального рівняння $f(x, y(x))$ є логарифмічно опуклою функцією, то шукані значення $y_1, y_2, \dots, y_n$ наближають точний розв'язок $y = y(x)$ задачі (1), (2) на вибраній сітці зверху і метод дає більш точні результати, ніж метод трапецій. У випадку, коли розв'язок диференціального рівняння має вигляд $y(x) = a + b\exp(c x + d)$, метод є точним.

Другий метод в загальному випадку менш точний, ніж перший. Однак він вимагає значно меншої обчислювальної роботи. У випадку, коли права частина диференціального рівняння $f(x, y(x))$ є опуклою функцією, цей метод конкурує з першим і є точним, якщо розв'язок диференціального рівняння має вигляд $y(x) = a + b\exp(c x + d)$.

Третій метод є найбільш точним у випадку, коли розв'язок диференціального рівняння є опуклою функцією і точним, якщо цей розв'язок має вигляд $y(x) = a\exp(b x + c)$.

Список джерел

1. Цегелик Г. Г. Теория мажорант и диаграмм Ньютона функций, заданных таблично, и ее приложение // Укр. матем. журн.– 1989.– Т.41.– №9.– С.1273-1276.

2. Цегелик Г. Г. Мажоранты и диаграммы Ньютона функций действительной переменной, заданных в промежутке // Докл. АН УССР. Сер. А.– 1987.– №6.– С.18-19.

3. Цегелик Г. Г., Федчишин Н. В. Інтерполяційний метод мажорантного типу розв'язування задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь // Доп. НАН України. Математика, природознавство, технічні науки.–2002.– №2.– С.37-43.

4. Г. Цегелик, Л. Підківка, Н. Федчишин. Екстраполяційний метод мажорантного типу розв'язування задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформатика.–2002.– Вип. №4.– С.76-82.

5. Н. Грипинська. Нелінійний, неявний, однокроковий чисельний метод розв'язування задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь першого порядку // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформатика.–2002.– Вип. №4.– С.23-29.

МОДЕЛЮВАННЯ КЛАСТЕРОУТВОРЕННЯ В ГЕТЕРОГЕННИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Становський О.Л., Герганов М.Л., Оніщенко О.Г.
Одеський національний політехнічний університет

Проблема моделювання процесів переносу крізь пористі матеріали є актуальною для багатьох галузей промисловості. Зокрема, така проблема виникає при виборі причини – структури і складу пористих середовищ, які забезпечують необхідний наслідок – задані параметри переносу. Рішення зворотної задачі (пошук причини по заданому наслідку) подібного типу зводиться до численних рішень прямих задач. Тому зниження часової складності прямих рішень є важливим чинником реальної здійсненності зворотного.

Останнім часом одержали розвиток перколяційні моделі, у яких структурні перетворення здійснюються за рахунок змін характеристик зв'язків між окремими фіксованими точками усередині об'єкта моделювання. Це дозволяє моделювати такі явища, як зміна проникності при зростанні пористості початково суцільного середовища, тощо [1].

У процесі такого моделювання, зв'язки, які довільно додаються, (елементи) з'єднуються в кластери – групи, потужність яких (кількість елементів, об'єднаних у кластер) росте. Важливим якісним моментом в процесі моделювання є такий, коли один з кластерів стає нескінченним, тобто одержує виходи на протилежні поверхні моделюємого об'єкта. Потужність кластера пов'язана, з одного боку, зі складом гетерогенної системи і, з іншого, – з параметрами її провідності. Знаючи ці зв'язки кількісно, можна вирішувати початкову зворотну задачу, тобто визначати склад, який забезпечує необхідні властивості.