

ЛЕКЦИЯ 1

ОБЩЕЕ ВВЕДЕНИЕ

1. Я начну с нескольких общих замечаний на тему: в каком виде сейчас представляется положение дел в вычислительной математике специалистам-математикам.

Вычислительная математика существует столь же давно, что и математика вообще, но за последние 20—25 лет произошел качественный скачок, связанный с появлением электронных вычислительных машин.

Этот скачок привел к появлению нового метода изучения природы, а именно — к возможности проведения численного эксперимента. Можно сказать, что сейчас, кроме теоретического и естественно-экспериментального метода, существует еще третий — метод численного эксперимента. Это и есть то новое, что возникло в последние 20—25 лет.

В методологическом смысле все три подхода равноправны, т. е. в зависимости от задачи, от области науки и, наконец, от сложившейся ситуации, первый, второй или третий подход к проблеме оказывается более успешным, более важным, необходимым и т. д.

Соотношение между ними можно изобразить следующим образом:



Стрелки изображают связи: теория может проверяться численным экспериментом, численный эксперимент — физическим или наоборот.

2. Можно кратко обрисовать те случаи, когда численный эксперимент становится особенно важным или просто необходимым. Я попытался наметить три таких области, границы между которыми, конечно, можно провести лишь условно.

Первая область задач охватывает те вопросы, для которых, можно сказать, теория разработана безупречно. Говоря языком математиков — уравнения абсолютно достоверны, но эксперимент поставить трудно или вообще невозможно. Роль численного эксперимента при этом необычайно высока. Самый, пожалуй, яркий пример этому — проблемы небесной механики, или же, в современном аспекте — проблемы космической динамики. Уравнения, с которыми имеем дело, это уравнения динамики. Они бесспорны. Но, скажем, если речь идет о выработке программы полета к Луне, то раньше, чем полетит к ней реальный объект, проводятся расчеты множества траекторий с оптимизацией нужных параметров и т. д., и без подобного численного эксперимента были бы невозможны успешные полеты.

В эту же группу задач, очевидно, входит и знаменитая проблема трех тел *. Здесь численный эксперимент оказывается полезным уже не для чисто практических целей, а для выяснения сложных теоретических вопросов.

Вторая область задач охватывает те вопросы, когда явления в общем понятны, но имеются неизвестные нам параметры. Мы же, имея данные эксперимента, хотим выяснить, каковы эти параметры. Один из ярких примеров этому — проблема внутреннего строения звезд. Там, внутри звезд, происходят ядерные реакции, которые в настоящее время детально изучены, есть теория механической устойчивости звезд, но вместе с тем есть и множество неясностей. Например, мы не знаем химический состав звезды (от него зависит очень много!), не известны условия в центре и т. д., словом — нет характеристик, которые не поддаются прямому измерению. В нашем распоряжении имеется тем не менее, достаточно много данных: спектры, поверхностная температура, масса. Чтобы достигнуть понимания того, что происходит в звездах, — нам необходимо построить такие модели внутреннего строения звезд, которые давали бы нужные значения внешних наблюдаемых параметров.

Здесь, по-видимому, более 95% известных сведений получено из численных экспериментов. В ходе таких экспериментов выясняются тонкие детали строения звезд. Например, различные ядерные реакции могут протекать в различных слоях (зонах). Есть случаи, когда таких зон было найдено до 10. Довольно успешно удавалось также проследить и эволюцию звезды во времени.

* Т. е. задача о движении трех материальных точек, связанных Ньютона- ским тяготением.

Третья область задач — изучение очень сложных явлений, когда протекают одновременно и взаимодействуют множество элементарных процессов. Грубо говоря, теория известна лишь в общих чертах, и с точки зрения формального математика тут нечего решать, т. к. не написаны сами уравнения. В этих случаях можно не пытаться сразу объяснить явление в целом, а вместо этого получить некоторые частные сведения, используя упрощенные «модели». При рассмотрении ряда моделей можно будет, хотя бы в принципе, добиться нужного понимания наблюдаемых явлений. К этой области задач относятся современные задачи газовой динамики, и в качестве примера рассмотрим стандартную газодинамическую задачу: тело сложной формы летит с большой скоростью. Во время полета оно сильно разогревается, начинается диссоциация молекул газа, затем, при более высоких температурах — ионизация, может статься, что тело начнет плавиться и т. д. Картина явления, в целом, необычайно сложна, и описать ее математически точно не представляется возможным. Что делают в таком случае? Берут несколько упрощенных задач, заведомо зная, что они не отвечают действительности, и получают для них решения. Ну, например, тело имеет «хитрую» форму и рассмотрение его движения строго математически исследователи дать не могут. Тогда они заменяют его конусом и говорят: «Эту задачу мы можем решить точно и это решение может быть полезно при рассмотрении движения тел другой формы». Вторую разновидность задач этой области (не отделенную резко от первой) составляют проблемы, в которых мы не знаем всех элементарных процессов и не ставим себе целью их полное изучение. Вместо этого мы строим (по возможности простые) математические модели, правильно описывающие то, что происходит в природе. Сюда относится, в частности, большое количество задач химической кинетики. Таким образом, в этой области задач речь может идти:

- а) о расчете идеализированных вариантов поставленной задачи;
- б) о подборе механизма, дающего совпадение с наблюдаемыми эффектами. Постановка численного эксперимента сводится при этом к построению моделей и решению уравнений, описывающих эти модели.

Вот таковы, приблизительно, те проблемы, в которых численный эксперимент играет важную роль. Естественно, можно привести примеры и противоположного свойства, когда от численного эксперимента никакой пользы нет, но на этом я останавливаюсь не буду.

3. Сама вычислительная математика с появлением возможности проведения численного эксперимента изменила свой дух; рассматриваемые проблемы настолько усложнились, что точные теоремы в реальных задачах доказываются лишь в исключительных случаях.

Вкратце положение дел сейчас таково. Математикам удается, следуя своим математическим традициям, строго доказать теоремы для простейших моделей, и поэтому вся область собственно вычислительной математики состоит как бы из двух подобластей: малой подобласти, где рассматриваются сравнительно простые задачи и где результаты рассмотрения можно представить в виде серии теорем, и громадной подобласти, связанной с решением практических задач, где никаких теорем нет. Здесь успехи в решении задачи связаны с проведением численных экспериментов. Придумаем модель. Посчитаем. Получилось — хорошо; не получилось — подумаем в чем дело, пересмотрим исходную модель и т. д. Такова стандартная схема работы современного вычислителя.

Чтобы понять «до какой степени нет теорем» в реальных задачах, я приведу единственный пример. Сейчас значительный процент машинного времени во всех странах тратится на решение задач газовой динамики и гидродинамики. Между тем у математиков нет теоремы, которая бы утверждала очень скромную вещь: решение этих задач существует. Уравнения (в простейшем варианте) написаны около 200 лет назад, а теоремы, которая бы утверждала, что решение существует, нет и сегодня, т. е. нет того, с чего, казалось бы, математик должен был начинать.

Резюмируя, можно сказать, что вычислительная математика является сейчас полуэкспериментальной наукой. Во всяком случае считать ее просто разделом математики, я думаю, уже нельзя. Вместе с тем не надо забывать, что вычислительная математика опирается на все громадное здание современного Математического Анализа (и алгебры), используя подчас глубокие и абстрактные математические теоремы.

4. То, что я думаю рассказать, наполовину или даже более можно было бы изложить в виде точных теорем. Но я буду больше стремиться объяснить суть дела, чем доказывать теоремы, даже тогда, когда это возможно сделать.

В целом я думаю, что разумно принять порядок, который был когда-то в средней школе — порядок концентрического изложения. Мне кажется, что для курса вычислительной математики стоит сделать 3 концентра. Сначала — основные идеи и общие соображения, затем — более глубоко — основы, а затем отдельные избранные вопросы со всеми подробностями.

В первом концентре, с которого я начну, я буду доказывать очень мало, и даже точные формулировки будут приводиться не всегда. Позже можно будет сделать необходимые уточнения.

Первую тему можно назвать так: интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений. Более точно, мы будем заниматься сегодня начальной задачей, или задачей Коши, для обыкновенных дифференциальных уравнений.

При этом я немного нарушу традиции. Ни в одном курсе вычислительной математики эта тема не является первой, она в луч-

шем случае излагается где-нибудь «в серединке». По степени же практической важности эта тема является одной из важнейших. Учитывая это, а также то, что для понимания сути дела нам потребуются минимальные сведения из математики (только то, что дифференциальные уравнения — это вещь полезная, что их нужно решать, и сверх того — лишь формула Тейлора), я решил начать изложение с этой темы.

ЗАДАЧА КОШИ ДЛЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

1. Постановка задачи Коши

Рассмотрим, для примера, систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d^2u}{dt^2} = f(u, T) \\ \frac{dT}{dt} = g\left(u, \frac{du}{dt}, T\right). \end{cases} \quad (1)$$

Это система двух дифференциальных уравнений для определения двух неизвестных функций $u(t)$ и $T(t)$. Функции эти неравноправны: в систему входит дважды продифференцированная функция u и однажды — функция T . Чтобы найти $u(t)$ и $T(t)$, нужно задать 3 условия при $t = 0$:

$$u(0) = u_0; \quad u'(0) = u'_0; \quad T(0) = T_0. \quad (2)$$

Данные (2) называют начальными данными. В общем случае для определения функций из дифференциальных уравнений надо задать столько начальных данных для каждой функции, каков порядок ее наивысшей производной.

Отметим, затем, что в системе (1) старшие производные для каждой из функций выделены, или — можно сказать иначе — система разрешена относительно старших производных. В таких случаях говорят, что система написана в нормальной форме. Будем считать, что в дальнейшем система дифференциальных уравнений записывается в нормальной форме.

Итак, постановка задачи такова: задана система дифференциальных уравнений в нормальной форме и необходимое число начальных данных при $t = 0$. Требуется найти все функции, входящие в систему, на некотором интересующем нас промежутке времени $0 \leq t \leq t_{max}$.

2. Теоретическое отступление

В теории дифференциальных уравнений доказывается «теорема существования и единственности». Она гарантирует, что ре-

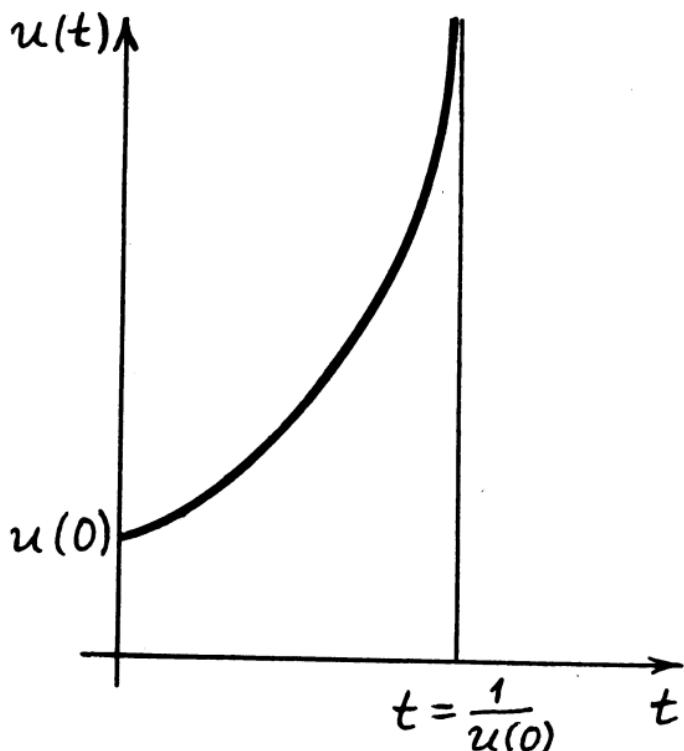
решение интересующей нас задачи существует (и притом только одно). Но! — только на некотором участке времени $0 \leq t \leq t_*$.

Это ограничение — не является дефектом математики. Это — ограничение по существу. Для системы n линейных уравнений

$$\frac{du^a}{dt} = \sum_{\beta=1}^n a_{\beta}^a(t) u^{\beta} \quad a=1, \dots, n$$

такого ограничения нет: решение задачи Коши существует при всех t .

Иначе обстоит дело в случае нелинейных уравнений. Рассмотрим простейшее нелинейное дифференциальное уравнение: $u' = u^2$. Его решение: $u(t) = 1/(c-t)$. Считая, что начальное значение $u(0) = 1/c$ задано, получим: $u(t) = \frac{u(0)}{1-u(0)t}$. При $t_* = c$ знаменатель обращается в ноль. Если $u(0) > 0$, то удается найти решение задачи Коши только до момента $t_* = 1/u(0)$. На графике это решение выглядит следующим образом:



3. Стандартная запись

Возвратимся к рассмотрению системы (1). Перепишем ее, используя стандартную форму записи — в виде системы дифференциальных уравнений 1-го порядка.

Пусть $u' = v$. Тогда задача Коши для системы (1) может быть представлена таким образом:

$$\begin{cases} u' = v \\ v' = f(u, T) \\ T' = g(u, v, T) \end{cases} \quad \begin{array}{l} u(0), v(0), T(0) — заданы; \\ u(t), v(t), T(t) — ищутся. \end{array} \quad (3)$$

Для простоты записи будем использовать далее векторные обозначения

$$u = (u^1, u^2, \dots, u^n); \quad f = (f^1, f^2, \dots, f^n). \quad (4)$$

Тогда общую систему дифференциальных уравнений первого порядка можно записать таким образом

$$\frac{du}{dt} = f(u, t). \quad (5)$$

Итак, общая задача, стоящая перед нами, такова: дана система уравнений (5), задано $u(0)$ (т. е. все $u^i(0)$), нужно найти $u(t)$. Для решения такой «стандартной задачи» на большинстве вычислительных машин существуют стандартные программы.

Последнее замечание. Часто интересующая нас система (5) является автономной, т. е. в правую часть ее не входит (явно) независимое переменное t :

$$\frac{du}{dt} = f(u). \quad (6)$$

Так будет, например, во всех тех случаях, когда t есть время и система (5) описывает процесс, происходящий в неизменных внешних условиях. При теоретических рассмотрениях бывает удобно и неавтономную систему (5) записать в автономном виде*. Чтобы максимально упростить формулы, я буду считать, что это приведение уже сделано и вместо (5) буду (не изменения обозначений) рассматривать систему (6).

4. Метод Эйлера

Переходя к построению приближенных решений, мы будем для простоты писать формулы для одного уравнения, указывая там, где это потребуется, изменения в формулах для случая системы.

* Этого всегда можно добиться введением нового независимого переменного s и формальным увеличением числа неизвестных функций на единицу.

Итак, пусть задано уравнение

$$\frac{du}{dt} = f(u) \quad (7)$$

и начальное значение $u(0) = u_0$. Начнем с того, что перейдем от непрерывного изменения t к дискретному: выберем некоторое маленькое число τ и будем рассматривать лишь значения $t = t_k = k\tau$. Постараемся найти $u(t_k)$. Положим в качестве приближенного значения

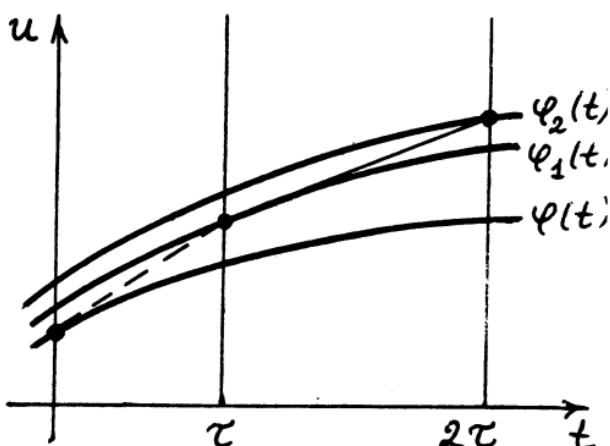
$$u(\tau) \approx u_1 = u_0 + \frac{du}{dt}(0)\tau = u_0 + f(u_0)\tau.$$

Положим далее

$$\begin{aligned} u(2\tau) &\approx u_2 = u_1 + f(u_1)\tau \\ u(k\tau) &\approx u_k = u_{k-1} + f(u_{k-1})\tau. \end{aligned} \quad (8)$$

Такой способ приближенного решения уравнения (7)' называется методом Эйлера.

Насколько отличаются значения u_1, u_2, \dots, u_k от точных значений интересующей нас функции $u = \varphi(t)$? На первом шаге мы вместо точной формулы Тейлора воспользовались первыми двумя членами ее. Иначе говоря, на промежутке $(0, \tau)$ мы двигались не по кривой $u = \varphi(t)$, а по касательной к ней. Точка с координатами (τ, u_1) лежит поэтому не на кривой $u = \varphi(t)$, а на некотором соседнем решении уравнения (7) $u = \varphi_1(t)$. На следующем шаге мы, двигаясь по касательной к кривой $u = \varphi_1(t)$, попадаем на кривую $u = \varphi_2(t)$ и т. д. Ясно, что метод Эйлера не является особенно точным. Пренебрегая на каждом шаге в формуле Тейлора всеми членами, кроме первых двух, мы делаем ошибку



порядка τ^2 . Ошибки эти должны каким-то образом суммироваться, так что к концу интересующего нас интервала мы можем ожидать ошибки порядка τ . В таких случаях говорят, что метод имеет первый порядок точности. Для практических нужд он слишком груб и почти никогда не употребляется.

Займемся теперь уточнением метода Эйлера.

5. Более точные методы: использование старших производных

Для того, чтобы получить более точные формулы, следовало бы написать формулу Тейлора с большим числом членов. На первый взгляд, кажется, что это невозможно, так как уравнение доставляет нам только первую производную u' ($= \frac{du}{dt}$). Однако можно из этого же уравнения извлечь старшие производные. В самом деле, если $u = \varphi(t)$ решение, то $\varphi'(t) = f(\varphi(t))$ есть тождество. Продифференцировав его по t , мы получим:

$$\varphi'' = f'(\varphi)\varphi' = f'(\varphi)f(u).$$

Таким образом, следствием из уравнения $u' = f(u)$ является уравнение

$$\frac{d^2u}{dt^2} = f_2(u), \quad f_2(u) = f'(u)f(u). \quad (9)$$

Для системы уравнений (6) эти формулы имеют вид

$$\frac{d^2u^i}{dt^2} = \sum_k \frac{\partial f^i}{\partial u^k} f_k(u). \quad (9a)$$

Аналогично можно было бы получить уравнение $u''' = f_3(u)$ и т. д. Если теперь положить

$$u_{k+1} = u_k + \tau f(u_k) + \frac{\tau^2}{2} f_2(u_k), \quad (10)$$

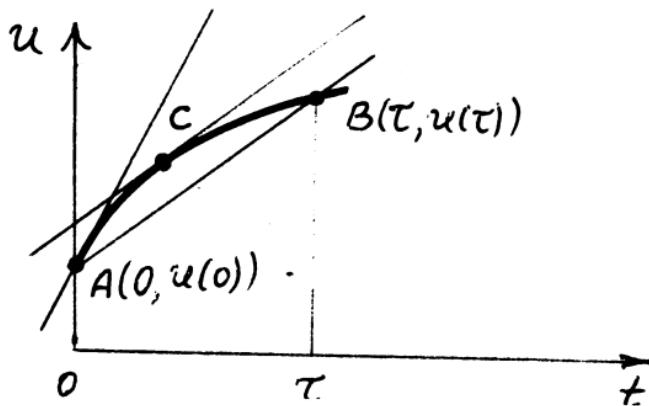
т. е. учесть в формуле Тейлора 3 слагаемых, мы получим метод, дающий на каждом шаге ошибку порядка τ^3 .

6. Более точные методы: многократное использование заданного уравнения

Во многих случаях (особенно для систем уравнений) выражения для функций f_2 , f_3 очень громоздки; поэтому обычно стараются избежать вычисления этих функций и получают несколько членов формулы Тейлора косвенно, используя на каждом

шаге несколько раз исходное уравнение. Простейшие формулы такого рода, называемые уточненным методом Эйлера (или методом Эйлера с пересчетом), мы сейчас выведем.

Наводящие соображения можно получить из рассмотрения рисунка.



По нему видно, что к направлению хорды AB гораздо ближе направление касательной в средней точке C , чем в точке A . Если мы сумеем (достаточно точно) найти $u'(\frac{\tau}{2})$, то можно надеяться более точно найти $u(\tau)$. Поскольку $u'(\frac{\tau}{2}) = f(u(\frac{\tau}{2}))$, нам достаточно найти $u(\frac{\tau}{2})$. Итак, положим сначала: $u_{1/2} = u_0 + \frac{\tau}{2} f(u_0)$. А теперь $u_1 = u_0 + \tau f(u_{1/2})$. Оценим, насколько отличается u_1 от точного значения $u(\tau)$ и проверим, оправдались ли наши ожидания. По формуле Тейлора:

$$f(u_{1/2}) = f\left(u_0 + \frac{\tau}{2} f(u_0)\right) = f(u_0) + f'(u_0) \frac{\tau}{2} f(u_0) + O(\tau^2).$$

И дальше:

$$u_1 = u_0 + \tau f(u_{1/2}) = u_0 + \tau f(u_0) + \frac{\tau^2}{2} f(u_0) f'(u_0) + O(\tau^3). \quad (11)$$

Теперь вспомним, что $f(u_0) = u'(0)$, а $f(u_0) f'(u_0) = u''(0)$. Значит в формуле (11) первые три члена совпадают с формулой Тейлора и отличие $u(\tau)$ от u_1 имеет порядок τ^3 . Таким образом, мы получили более точную формулу за счет двухкратного вычисления функции f . При этом мы косвенно (без прямого дифференцирования) учли вторую производную решения. Перепишем еще раз формулы уточненного метода Эйлера. При известном u_k мы находим последовательно:

$$u_{k+1/2} = u_k + \frac{\tau}{2} f(u_k), \quad u_{k+1} = u_k + \tau f(u_{k+1/2}). \quad (12)$$

На промежутке изменения t порядка 1 этот метод дает ошибку порядка τ^2 или, как говорят, имеет 2 порядок точности. В большинстве случаев при решении дифференциальных уравнений нужен более высокий порядок точности. Следующие красивые формулы Рунге-Кутта дают метод 4 порядка точности. При их использовании косвенно используются производные решения до 4 порядка включительно. Достигается это вычислением 4 значений f от разных аргументов:

$$1 \text{ этап} \quad f^{(1)} = f(u_k),$$

$$2 \text{ этап} \quad f^{(2)} = f(u_k + \frac{\tau}{2} f^{(1)}),$$

$$3 \text{ этап} \quad f^{(3)} = f(u_k + \frac{\tau}{2} f^{(2)}),$$

$$4 \text{ этап} \quad f^{(4)} = f(u_k + \tau f^{(3)}),$$

$$u_{k+1} = u_k + \frac{\tau}{6} (f^{(1)} + 2f^{(2)} + 2f^{(3)} + f^{(4)}).$$

Я не знаю хорошего способа объяснить, как придумать такие формулы. Но когда они уже написаны, оценить ошибку на одном шаге нетрудно. Нужно снова воспользоваться формулой Тейлора, удержав необходимое число слагаемых. Эту мало поучительную выкладку я проводить не буду.

7. Идея Адамса:

использование уже найденного участка решения
для приближенного вычисления старших производных

Существует другой путь для построения более точных методов. Именно, для приближенного вычисления старших производных можно использовать уже найденные значения u_k или $u'_k = f(u_k)$. Простейшая реализация этой идеи такова. Положим $u''_k = \frac{1}{\tau} (u'_k - u'_{k-1})$. Тогда можно рассчитывать, что формула

$$u_{k+1} = u_k + \tau u'_k + \frac{\tau^2}{2} u''_k = u_k + \tau \left(\frac{3}{2} u'_k - \frac{1}{2} u'_{k-1} \right) \quad (14)$$

будет точнее, чем метод Эйлера. И в самом деле, можно показать, что формула (14) (где $u'_s = f(u_s)$) дает метод 2 порядка точности. Аналогично, используя большее число предыдущих значений, можно получить еще более точные формулы. Например, формула часто употребляемого метода Адамса 4 порядка имеет вид

$$u_{k+1} = u_k + \frac{\tau}{24} (55u'_k - 59u'_{k-1} + 37u'_{k-2} - 9u'_{k-3}). \quad (15)$$

Здесь $u'_s = f(u_s)$. Такого рода формулы (в отличие от формул Рунге-Кутта!) легко выводятся, если предположить, что все используемые значения u'_s относятся к одному (точному) решению дифференциального уравнения. Достаточно разложить u'_s по формуле Тейлора (в окрестности точки t_k) и подобрать подходящие коэффициенты при u'_s *. Однако простота эта обманчива. Дело в том, что при практическом применении метода Адамса значения $u_k, u_{k-1}, u_{k-2}, \dots$ никогда не лежат на одной интегральной кривой**. Поэтому само понятие «ошибка на одном шаге» и использование формулы Тейлора для оценки этой ошибки становятся не ясными.

При следующем, более глубоком рассмотрении темы «Обыкновенные дифференциальные уравнения» мы вернемся к этим вопросам.

И последнее, очевидное замечание. При использовании метода Адамса (и ему аналогичных) первые несколько значений нужно найти каким-то другим способом, например, методом Рунге-Кутта.

8. Исторические и другие замечания

По-видимому, Эйлер уже владел всеми изложенными идеями, кроме идей Адамса. Он понимал, как высшие производные получать из данного уравнения прямым дифференцированием, а также то, что можно обойтись и без прямого дифференцирования. В его курсе «Интегрального исчисления» (1768) указывалось, что можно вычислять высшие производные косвенным образом.

Изложение метода Адамса было дано в 1883 г. в книге Башфорта и Адамса по теории капиллярных сил (придуман он был, по-видимому, гораздо раньше, в 1855 г.). Но в дальнейшем этот метод был забыт настолько, что даже в очень популярной в начале нашего века энциклопедии математических знаний, опубликованной на немецком языке, ничего не говорится о методе Адамса.

В конце XIX века была опубликована работа Рунге, идейно восходящая к Эйлеру, а затем через несколько лет работа Кутта, где был приведен целый набор формул. Идеи Адамса, возродил, по-видимому, академик А. Н. Крылов, и сейчас метод Адамса получил широкое применение и воспринимается, как равноправно-существующий с методом Рунге-Кутта.

* Ход вычислений намечен в примечании 2.

** Аккуратнее было бы говорить о точках $(t_k, u_k); (t_{k-1}, u_{k-1}); \dots$.

Сейчас, действительно, кажется неразумным (ну, по крайней мере — неэкономным!) считать, не используя полученную ранее информацию: применение метода Адамса (и аналогичных ему) часто уменьшает время счета в 3—4 раза.

С другой стороны, кажется оправданным применение метода Рунге-Кутта в случаях, когда решение ведет себя «непредсказуемо», т. е. интегральная кривая имеет «неожиданные» всплески или сбросы (участки резких изменений в ходе $u(t)$). В частности, необходимое на таких участках измельчение шага метод Рунге-Кутта переносит безболезненно.

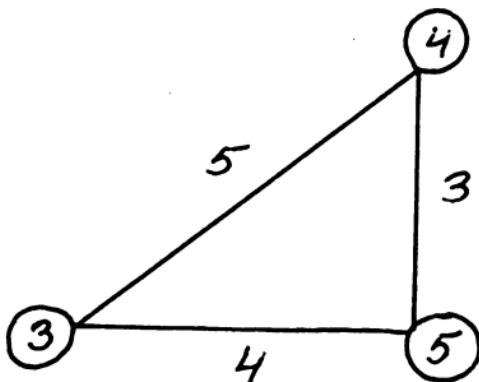
Очевидно, что в каждом конкретном случае нужно специально рассматривать вопрос о применимости того или иного метода счета. Нужно думать. Не надо быть настолько оптимистом, чтобы предполагать, что, имея вычислительную машину и программы Рунге-Кутта или Адамса (или те и другие), достаточно уметь вычислить правые части уравнения $u' = f(u, t)$. Часто встречаются задачи, которые без размышлений и аналитического исследования «напрямую» не могут быть решены. Это могут быть задачи, где трудности заранее очевидны. Скажем, нужно выходить (при $t=0$) или проходить (где-то при $t>0$) через особые точки системы. Далее в системе могут быть большие или малые параметры. Например, система дифференциальных уравнений может описывать одновременно протекающие процессы, сильно различающиеся по скорости. Ясно, что их совместное рассмотрение может оказаться очень трудным. Однако, встречаются и такие задачи, где трудности заранее неочевидны, завуалированы. Грубо говоря, особенности «проявляются» лишь в процессе решения.

В качестве примера рассмотрим один вариант задачи трех тел.

9. Пример

Условие: имеется 3 материальные точки с массами 3, 4 и 5, расположенные в углах Пифагорова треугольника. Их скорости в начальный момент равны 0, а взаимодействие между ними определяется тяготением. Эти точки как-то движутся в плоскости, после того, как «включено тяготение и время». Для решения задачи необходимо 6 уравнений Ньютона (для каждой точки пишется по 2 уравнения 2 порядка). Правые части уравнений просты — их легко запрограммировать, но тем не менее эта задача не была решена до 1967 г.*. Дело в том, что задача существенно хитрее, чем кажется на первый взгляд. Точки начинают двигаться, и в какой-то момент две из них начинают быст-

* См. V. Szebehely and C. F. Peters. Complete solution of a general problem of three bodies. Astron. Journ., 1967, v. 72, No 7. Рисунки из этой статьи перепечатаны в книге: В. Г. Демин. Судьба солнечной системы. «Наука», 1969.



ро сближаются и подходят друг к другу на расстояние $\sim 10^{-4}$. Если вспомнить, что Ньютона сила тяготения меняется с расстоянием как $1/r^2$, то ясно, что при сближении взаимодействие изменяется на 8 порядков! Это и есть трудное место в задаче — даже ничтожные ошибки, полученные при обсчете конфигурации, когда 2 частицы сближены, могут повести в дальнейшем к очень большим ошибкам. Через это место в задаче, фигурально выражаясь, чрезвычайно трудно пробиться, тут надо думать. Авторам пришлось решать эту задачу полуаналитически. Они ввели новые переменные, переписали ряд формул в другом виде, разобрались с особенностями, и только тогда удалось «пробиться». Результаты оказались следующими.

Частицы описывают очень замысловатые траектории и время от времени близко сходятся. Через время около 30 выбранных единиц частицы подходят почти к своим исходным позициям и скорости их близки к нулевым. Казалось бы, что после этого движение должно повториться, но ничтожных отличий достаточно, чтобы этого не получилось*. Спустя время порядка 60 единиц получается следующее: два более тяжелых тела начинают вращаться вокруг общего центра масс и удаляться в одну сторону, тогда как третье тело движется в противоположную. Центр масс всей системы, естественно, остается «на месте». Система распалась, и далее считать уже лишено смысла, далее надо «писать формулы» для задачи двух тел (надо отметить, что возможность такого распада системы была показана задолго до этой работы у нас в Союзе).

Последние два земечания.

1. При счете использовался один из вариантов метода Рунге-Кutta.
2. Ошибка при расчете критической ситуации даже в восьмом знаке может превратиться в ошибку в первом знаке! Поэтому

* Это наводит на мысль, что, если при $t=0$ частицы расположить несколько по-иному, то можно получить точное повторение. Другими словами, в окрестности найденного решения, возможно, есть периодическое решение.

здесь особенно необходимо контролировать точность вычислений. В данной задаче критерий точности был косвенным — это закон сохранения энергии. При точном решении этот закон должен выполняться точно, при численном решении — приблизительно. В задаче получено сохранение энергии с точностью до 10-го десятичного знака, и это является косвенным свидетельством точности вычислений.

Дополнения и примечания к 1 лекции

1. (к п. 3) Сведение произвольной системы к автономной

Вместо системы (5) $\frac{du}{dt} = f(u, t)$ напишем:

$$\frac{du}{ds} = f(u, t), \quad \frac{dt}{ds} = 1. \quad (5')$$

Исходная задача Коши (задано $u(0) = u_0$; ищется $u(t)$) перейдет в эквивалентную: заданы $u(0) = u_0$, $t(0) = 0$; ищутся $u(s)$, $t(s)$. Система (5') является автономной, t есть теперь одна из неизвестных функций, а новая независимая переменная s — в правую часть не входит.

Обозначив $v = (u^1, \dots, u^n, t)$; $g = (f^1, \dots, f^n, 1)$, можно записать систему (5') в виде: $\frac{dv}{ds} = g(v)$. Отметим, что процедура сведения неавтономной системы к автономной, столь удобная для вывода общих формул, не всегда является безобидной. Например, линейное уравнение $\frac{du}{dt} = a(t)u$ перейдет при этом в нелинейную систему:

$$\begin{cases} \frac{du}{ds} = a(t)u \\ \frac{dt}{ds} = 1. \end{cases}$$

2. (к п. 7). Вычисления, приводящие к формулам метода Адамса, проиллюстрируем на примере формулы 3-го порядка точности. Ищем формулу метода в виде:

$$u_{k+1} = u_k + \tau(a u'_k + b u'_{k-1} + c u'_{k-2}); \quad u'_k = f(u_k).$$

Неопределенные коэффициенты a , b , c мы подберем так, чтобы получить нужный порядок точности. По формуле Тейлора

$$u'_{k-1} = u'_k - \tau u''_k + \frac{\tau^2}{2} u'''_k + O(\tau^3); \quad u''_k = u''(t_k), \quad u'''_k = u'''(t_k)$$

$$u'_{k-2} = u'_k - 2\tau u''_k + 2\tau^2 u'''_k + O(\tau^3)$$

$$u_{k+1} = u_k + \tau \left[(a+b+c)u'_k - \tau(b+2c)u''_k + \tau^2 \left(\frac{b}{2} + 2c \right) u'''_k \right] + O(\tau^4).$$

Для точного решения $u(t)$:

$$u(t_{k+1}) = u(t_k + \tau) = u(t_k) + \tau u'(t_k) + \frac{\tau^2}{2} u''(t_k) + \frac{\tau^3}{6} u'''(t_k) + O(\tau^4).$$

Приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях τ , получаем систему уравнений:

$$a+b+c=1; \quad b+2c=-\frac{1}{2}; \quad \frac{b}{2}+2c=\frac{1}{6}.$$

Найдя a, b, c из этой системы, получаем искомую формулу метода Адамса 3-го порядка:

$$u_{k+1} = u_k + \frac{\tau}{12} (23u'_k - 16u'_{k-1} + 5u'_{k-2}).$$

Аналогичные рассуждения приводят к формуле (15) в тексте. Напомним еще раз, что при выводе мы считали значения u_k, u_{k-1}, u_{k-2} принадлежащими (некоему) точному решению $u(t)$ уравнения $u' = f(u)$: $u_s = u(t_s)$, $u'_s = u'(t_s)$; $s = k, k-1, k-2$.

3. (к п. 6). Формулы метода Рунге-Кутта для общей системы 1 порядка

Пусть $\frac{du}{dt} = f(u, t)$.

По известному u_k находятся последовательно:

$$1) \quad f^{(1)} = f(u_k, t_k)$$

$$2) \quad f^{(2)} = f\left(u_k + \frac{\tau}{2} f^{(1)}, t_k + \frac{\tau}{2}\right)$$

$$3) \quad f^{(3)} = f\left(u_k + \frac{\tau}{2} f^{(2)}, t_k + \frac{\tau}{2}\right)$$

$$4) \quad f^{(4)} = f(u_k + \tau f^{(3)}, t_k + \tau)$$

Затем $u_{k+1} = u_k + \frac{\tau}{6} (f^{(1)} + 2f^{(2)} + 2f^{(3)} + f^{(4)})$.

4. Литературные замечания

Из книг «домашинного» периода особый интерес представляет книга: «Лекции о приближенных вычислениях» академика А. Н. Крылова (5 издание, 1950 г.). В разделе, посвященном интегрированию обыкновенных уравнений, там содержатся, в частности, исторические замечания п. 8. Из более поздних трудов стоит ознакомиться с книгой Милна «Численное решение дифференциальных уравнений» (ИЛ; 1955). Это ясно написанная книга относится к началу «машинного периода».

Наконец, современная точка зрения (в несколько крайнем своем выражении) изложена в книге Р. В. Хемминга «Численные методы» («Наука»; 1968).