МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

УДК 517.9

О РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ КОШИ С ПОМОЩЬЮ РЕШЕТЧАТЫХ ФУНКЦИЙ В МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ И ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ

А.А. Горшков, доцент, Е.А. Коровайцева, студент кафедра Прикладной механики и основ конструирования МИТХТ им. М.В. Ломоносова. e-mail: lomovskoy@phyche.ac.ru

ГП редставлен полиномиальный метод решения задачи Коши, позволяющий построить для нормальной формы дифференциального соотношения фундаментальное решение в локально аналитической форме при любом виде функции правой части уравнения. Проведено тестирование на известных функциях, как при низшем, так и при высшем из возможных порядков полиномиального метода решения. Установлена целесообразность использования метода высшего порядка

Ключевые слова: задача Коши, тождественные преобразования, решетчатые функции, полиномиальный метод, локально аналитическое решение, тестирование, сравнение возможностей методов.

Задача Коши является фундаментальной для решения самого широкого круга прикладных задач, базирующихся на использовании дифференциальных, дифференциально-алгебраических и дифференциально-интегральных уравнений с произвольными дискретными ограничениями, накладываемыми на искомые функции. Рассмотрим ее формулировку в виде дифференциального уравнения с параметром

$$\frac{d\bar{y}}{dx} = \vec{f}(x, \vec{y}, \vec{\mu}) \tag{1}$$

и начальных условий

$$\vec{y}(x_0) = \vec{y}_0$$
, (2)

где \vec{f} , \vec{y} – векторные функции размерности *n*, $\vec{\mu}$ – вектор параметров задачи.

Согласно теореме существования и единственности решения задачи Коши к правой части уравнения (1) и ее производной обычно предъявляются требования непрерывности и выполнения условий Липшица [1, глава 1, §6], [2, с. 20-22].

При решении задачи (1-2) для всех используем переменных решетчатые функции. По определению теории этих функций, например, представленному в работе [3, глава 4, §4.1], она существует лишь при дискретных равноотстоящих друг от друга значениях независимой переменной х и равна нулю между этими значениями аргумента. Скалярная решетчатая функция, соответствующая непрерывной функции f(x), обычно обозначается $f(nX_0)$, где X_0 – расстояние между соседними дискретными значениями (период дискретности), *n* = 0,1,2,3,...

Решетчатая функция может быть всегда получена из непрерывной функции f(x), если заменить x на nX_0 , то есть рассматривать только дискретные значения функции f(x) (рис. 1).



При этом, с точки зрения используемого определения, с одной стороны, любой непрерывной функции f(x) можно поставить в соответствие множество решетчатых функций $f(nX_0)$ с различными значениями периода дискретности X_0 , а, с другой стороны, одной и той же

решетчатой функции $f(nX_0)$ с фиксированным значением периода дискретности X_0 могут соответствовать различные непрерывные функции f(x), называемые огибающими решетчатой функции, соответственно, $f_1(x)$, $f_2(x)$, $f_3(x)$, ... (рис. 2).



Для определенности ниже считаем все решетчатые функции, вводимые для любых переменных задачи Коши (1-2), несмещенными, то есть, используем на периоде дискретности огибающую решетчатой функции в виде ее значения на начало любого из периодов дискретности.

Приведенные на рис. 1, 2 преобразования используем для всех переменных задачи Коши дважды: в простейшем случае применяем их непосредственно к функции $f(x, \vec{y}, \vec{\mu})$, а при развитии метода решения задачи Коши с использованием полиномиальных функций применяем их к функции, полученной из исходной векторной функции $f(x, \vec{y}, \vec{\mu})$ с помощью ее специального тождественного преобразования. Причем, если переход от непрерывной функции $f(x, \vec{y}, \vec{\mu})$ к решетчатой, проиллюстрированный на рис. 1, используется на всем интервале решения задачи Коши, то обратный переход, про-

$$\tau = x_0; \ \vec{\xi} = \vec{y}_0; \ \vec{v} = \vec{\mu}(x_0); \ \vec{\phi}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) = \vec{f}(x_0, \vec{y}_0, \vec{\mu}(x_0)) = \overline{con}.$$

На периоде номер *n* решения задачи (1-2) значения $\vec{\xi}, \vec{v}, \vec{\varphi}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v})$ являются огибающими решетчатых функций, соответствующих непрерывным переменным $\vec{y}, \vec{\mu}, \vec{f}$ в начале этого периода, а $\tau = x_0 + (n-1)X_0$ при n > 1.

Постоянство используемого периода дискретности X₀ решетчатого представления всех переменных задачи (1-2), а также допущение посто-

$$\vec{y}(x) = \vec{y}_0 + \int_0^x \vec{\phi}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) d\varsigma = \vec{y}_0 + \vec{\phi}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) x, \text{ где } x \in [0, X_0].$$
(3)

На последующих периодах дискретности решетчатых функций используем метод припасовывания [5], позволяющий построить решение задачи Коши на заданном интервале изменения аргумента х. Причем на периоде номер *п* решения задачи (1–2) параметры правой части соотношения (3) используются по их значениям, вычисленным по величинам соотношения предыдущего $\vec{y}(X_0)$ (3) периода и $\tau = x_0 + (n-1)X_0$ при n > 1.

Рис. 2.

иллюстрированный на рис. 2 И ocyществляемый для получения точного аналитического решения преобразованного дифференциального уравнения, выполняется локально на каждом из периодов дискретности.

Простейшее аналитическое решение задачи Коши при использовании в процессе решения решетчатых функций соответствует допущению того, что локально вводимая непрерывная функция постоянна на периоде дискретности решетчатой функции. Тогда на любом из периодов дискретности решетчатый аналог векторной функции $f(x, \vec{y}, \vec{\mu})$ может быть представлен его огибающей в виде $\vec{\varphi}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) = \overrightarrow{const}$, где $\vec{\xi}, \vec{v}$ – огибающие векторных функций $\vec{v}, \vec{\mu}$ на периоде, а τ – аргумент решетчатой функции. На первом периоде решения задачи Коши (1-2) с использованием решетчатых функций с периодом дискретности X₀ имеем, соответственно

$$x_0; \ \vec{\xi} = \vec{y}_0; \ \vec{v} = \vec{\mu}(x_0); \ \vec{\varphi}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) = \vec{f}(x_0, \vec{y}_0, \vec{\mu}(x_0)) = \overline{const.}$$

янства огибающей решетчатого представления функции \vec{f} на любом из периодов построения решения задачи Коши в виде соотношения

$$\vec{\varphi}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) = \overline{const}$$

позволяет построить локально аналитическое решение задачи Коши при использовании решетчатых функций на первом периоде дискретности решетчатых функций в виде линейной функции:

С использованием решетчатых функций могут быть построены различные алгоритмы решения явного и неявного типов, обобщающие методы Эйлера для континуальных функций на решетчатые функции. Их общим недостатком, так же как и формулы (3), является отсутствие использования размерности векторных функций для выделения матричных компонент решения, уменьшающих зависимость трудоемкости решения задачи (1-2) с использованием решетчатых

функций от точности иллюстраций континуальных функций с помощью решетчатых. В итоге функция (3) является линейной независимо от значения порядка системы дифференциальных уравнений.

Для построения локальной полиномиальной аналитической формы решения задачи (1–2) с использованием в процессе решения решетчатых функций преобразуем правую часть дифференциального уравнения (1) так, чтобы иметь возможность построения полиномиальной фундаментальной системы решения уравнения (1). Для этого представим

$$f(x, \vec{y}, \vec{\mu}) = A\vec{y} + \vec{\phi}^*(\tau, \xi, \vec{v}),$$
 (4)

где A — квадратная треугольная ленточная матрица с нулевыми диагональными элементами

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix},$$
(5)
a $\vec{\varphi}^{*}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) = \vec{\varphi}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) - A\vec{\xi}$.

Для решения задачи (1–2), (4), всегда имеющей при использовании несмещенных решетчатых функций в процессе решения форму неоднородной линейной задачи, воспользуемся при расчете общего решения системы дифференциальных уравнений (1), (4) линейным преобразованием

$$\vec{y}(x) = M(x)\vec{y}_0 + \vec{H}(x).$$
 (6)

Тогда общее решение однородного уравнения, следующего из (1), (4), определяется решением матричной задачи Коши:

$$\frac{dM}{dx} = AM, \qquad M(0) = E , \qquad (7)$$

а частное решение неоднородного уравнения – решением задачи Коши:

$$\frac{d\bar{H}}{dx} = A\bar{H} + \vec{\varphi}^{*}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}), \qquad \vec{H}(0) = \vec{0}.$$
 (8)

Специфический вид матрицы *А* позволяет получить общее решение задачи (7) не в виде матричного ряда [4], а в аналитической форме, использующей простейшие полиномиальные функции низшего порядка

$$M(x) = \begin{bmatrix} 1 & x & \frac{x^2}{2!} & \dots & \frac{x^{n-2}}{(n-1)!} & \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} \\ 0 & 1 & x & \dots & \frac{x^{n-3}}{(n-3)!} & \frac{x^{n-2}}{(n-2)!} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & x \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
(9)

При расчете аналитического решения задачи (1–2), (4) с неоднородной частью в виде решетчатой функции приходится еще раз учесть неоднородность векторной системы дифферен-

циальных уравнений (8) и находить ее решение как сумму общего решения векторного однородного дифференциального уравнения

$$\frac{d\bar{H}_0}{dx} = A\bar{H}_0 \tag{10}$$

и частного решения неоднородного уравнения (8).

Определяя точное решение уравнения (10) в форме
$$\vec{H}_0(x) = M(x)\vec{C},$$
 (11)

а частное решение неоднородного уравнения (8) в форме

$$\vec{H}_H(x) = M(x)\vec{V}(x), \qquad (12)$$

получаем общее решение неоднородного векторного уравнения (8) в виде:

$$\vec{H}(x) = M(x) \left[\vec{C} + \int_{0}^{x} M^{-1}(\varsigma) \vec{\varphi}^{*}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) d\varsigma \right]$$
(13)

При начальных условиях (8) получаем:

$$\vec{H}(x) = M(x) \int_{0}^{x} M^{-1}(\varsigma) \vec{\varphi}^{*}(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) d\varsigma$$
(14)

Таким образом, решение задачи (1-2), (4) имеет вид:

$$\vec{y}(x) = M(x) \left[\vec{y}_0 + \int_0^x M^{-1}(\varsigma) \vec{\phi}^*(\tau, \vec{\xi}, \vec{v}) d\varsigma \right].$$
 (15)

Отметим, что специфическая форма использованного линейного преобразования правых частей исходного дифференциального уравнения (1) позволила отказаться от расчета нормированной интегральной матрицы M(x) дифференциальных уравнений типа (1) в форме, представленной в [4], и получить ее точный аналитический вид (9) на одном периоде решетчатой функции решения задачи Коши. Обращение, интегрирование этой матрицы и перемножение аналитического результата интегрирования с необращенной матрицей не вызывает никаких затруднений и выполняется с помощью любого аппарата символьных преобразований на ЭВМ. приводя к аналитическим же функциям, таким же как и в соотношении (9), но смещенным на одну диагональ.

Отметим также, что использованная форма аналитического решения задачи (1–2), (4), безусловно, не снимает остроты использования полиномов при больших значениях аргумента. Но в техническом плане эти трудности даже при использовании глобального аргумента преодолимы автономным или комплексным использованием трех мер воздействия:

1) сегментацией исходной задачи [6],

2) привлечением различных технических гипотез, снимающих остроту проблем работы с жесткими и осциллирующими функциями,

3) использованием различных тождест-

Вестник МИТХТ, 2009, т. 4, № 3

венных преобразований исходного дифференциального уравнения [7].

В качестве примера рассмотрены модельные задачи Коши, решение которых позволило получить значения ряда известных функций математического анализа и расчеты тонкостенных элементов конструкций предлагаемым методом для сравнения с известными их аналитическими выражениями, рассматриваемыми как тестовые (табл. 1).

Основной задачей представленных ниже примеров является тестирование полученной формулы (15) на примере упомянутых функций и сравнение зависимости континуальных и решетчатых компонент решения от порядка полиномиального метода решения задачи Коши на одной и той же сетке.

Таблица 1. Скалярный вид Начальные Интервал Наименование сопутствующего условия решения функции дифференциального задачи задачи уравнения Коши Коши $W(0) = \frac{3}{8}$ $\frac{d^2 W}{dx^2} = \frac{2x}{1-x^2} \frac{dW}{dx} - \frac{20}{1-x^2} W$ Многочлен Лежандра $x \in [0,1)$ четвертого порядка W'(0) = 0 $\frac{d^2 W}{dr^2} = \frac{x}{1-r^2} \frac{dW}{dr} - \frac{16}{1-r^2} W$ W(0) = 1Многочлен Чебышева $x \in [0,1)$ W'(0) = 0четвертого порядка Нормированный $\frac{d^2W}{dx^2} = \frac{x-1}{x}\frac{dW}{dx} - \frac{5}{x}W$ W(0) = 1 $x \in (0,4]$ многочлен Лагерра W'(0) = -5пятого порядка W(0) = 0 $\frac{d^2W}{dx^2} = 2x\frac{dW}{dx} - 10W$ Нормированный $x \in [0,6]$ $W'(0) = \frac{4}{5}$ полином Эрмита $\frac{d^2W}{dx^2} = -\frac{1}{x}\frac{dW}{dx} - W$ W(0) = 1Функция Бесселя $x \in (0, 15]$ W'(0) = 0первого рода $\frac{dy}{dx} = h\frac{dt}{dx}; h = 1000(g-y) + \frac{dg}{dt}$ Функция задачи v(0) = 10 $t \in [0,1]$ Лапидуса t(0) = 0 $\frac{dt}{dx} = \frac{1}{\sqrt{1+h^2}}; g = 10 - (10+t)e^{-t}$ и Зейнфельда W(0) = 1 $\frac{d^4 W}{dr^4} = -40000W$ W'(0) = 0Функция Крылова $x \in [0, 0.5]$ W''(0) = 0первого порядка W'''(0) = 0



Выбор первых пяти задач обусловлен рассмотрением известных в теории аппроксимации функций, шестая задача выбрана [7] как в связи с нелинейностью ее правой части,



так и в связи с жесткостью задачи. Последняя модельная задача связана с рассмотрением как жесткой, так и осциллирующей функции решения.

Для лучшей представимости разницы результатов, полученных различными методами, использована относительно редкая сетка их иллюстрации: 10 шагов на интервале решения. На рис. 3, 4 в качестве типового примера из всех рассмотренных сравниваются с эталоном (кривая 1) решения задачи Коши по соотношениям (3) (кривая 2) и (4)



Рис. 5.

При сравнении зависимости континуальных компонент от порядка полиномиального метода решения задачи Коши на этой же сетке характерна несущественная их связь с порядком метода: для метода низшего порядка *L2* – норма погрешности составила 13.47 %, а для полиномиального метода наивысшего возможного порядка – 10.92 %. Совершенно другая картина выявлена для



(кривая 3) для многочлена Лежандра и его производной соответственно.

На рис. 5, 6 на сетке в 100 шагов на этом же интервале показано в % изменение локальных погрешностей расчета этой функции и ее производной при использовании Чебышевской нормы эталонной функции.



решетчатых компонент решения: *L2* – норма решетчатых компонент решения для метода низшего порядка составила 10.09 %, а для метода высшего порядка – 0.307 %. Соответствующие зависимости по решетчатым компонентам многочлена Лежандра и его производной показаны на рис. 7, 8 (1 – метод низшего порядка, 2 – метод высшего порядка).



ЛИТЕРАТУРА:

1. Эльсгольц, Л. Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление / Л. Э. Эльсгольц. – М. : Наука, 1969. – 424 с.

2. Келлер, Д. Б. Теория ветвления решений обыкновенных дифференциальных уравнений / Д. Б. Келлер // Теория ветвления и нелинейные задачи на собственные значения / Ред. Д. Б. Келлер, С. М. Антман. М. : Мир, 1974. – С. 19–34.

3. Динамика систем управления ракет с бортовыми цифровыми вычислительными машинами / Отв. ред. М. С. Хитрик, С. М. Федоров. – М. : Машиностроение, 1972. – 231 с.

4. Стражева, И. В. Векторно-матричные методы в механике полета / И. В. Стражева, В. С. Мелкумов. – М. : Машиностроение, 1973. – 260 с.

5. Бидерман, В. Л. Прикладная теория механических колебаний /В. Л. Бидерман. – М. : Высшая школа, 1972. – 416 с.

6. Калнинс, А. К нелинейной теории упругих оболочек вращения / А. Калнинс, Лестинги // Прикладная механика. Серия Е. – 1967. – № 1. – С. 69–76.

7. Шалашилин, В. И. Метод продолжения решения по параметру и наилучшая параметризация / В. И. Шалашилин, Е. Б. Кузнецов. – М. : УРСС, 1999. – 222 с.