УДК 518 : 517.91/.94

Я. Н. Пелех

АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ А-УСТОЙЧИВЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

В вычислительной практике часто приходится решать задачи с начальными условиями для так называемых жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y_i' = f_i(x, y_1, y_2, \ldots, y_m) \quad (i = 1, 2, \ldots, m), \tag{1}$$

матрица производных $\frac{\partial f_i}{\partial y_j}$ для которых имеет большой разброс собственных значений. К решению таких задач приводят проблемы построения математических моделей физико-химических, биологических и экономических процессов, задачи многомерной оптимизации, кинетики, электроники, электрических цепей и т. п. Подобные вычислительные задачи могут возникать при решении более сложных дифференциальных задач. Классические явные методы типа Адамса или Рунге — Кутта, например, применимы в этом случае лишь при очень жестких (часто практически неприемлемых) ограничениях на величину шага h численного интегрирования. Более удобными здесь оказываются методы, А-устойчивые при любых шагах h. Численный метод называют А-устойчивым [3], если в применении к уравнению

$$y' = \lambda y \tag{2}$$

при всех λ, для которых $\operatorname{Re}\lambda < 0$, его погрешность стремится к нулю, когда $x \to \infty$.

Поскольку все предлагаемые ниже методы покомпонентно переносятся на системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, то для простоты записи будем иметь в виду случай одного дифференциального уравнения

$$y' = f(x, y) \tag{3}$$

с достаточно гладкой функцией f. Для построения А-устойчивых методов численного интегрирования дифференциальных уравнений рассмотрим разложение ряда Тейлора для функции

$$y(x) = y(x_0) + \frac{y'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{y''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{y^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \cdots \tag{4}$$

в соответствующую цепную дробь [1, 4]. Для этого ряд (4) запишем так:

$$y(x) = y(x_0)\, z_0,$$

где

$$z_0 = 1 + \frac{y'(x_0)}{y(x_0)} \frac{(x - x_0)}{1!} + \frac{y''(x_0)}{y(x_0)} \frac{(x - x_0)^2}{2!} + \cdots + \frac{y^{(n)}(x_0)}{y(x_0)} \frac{(x - x_0)^n}{n!} + \cdots$$

Представим z_0 в виде

$$z_0 = \frac{1}{1 - \omega_1^{(1)}(x - x_0) - \omega_2^{(1)}(x - x_0)^2 - \cdots - \omega_n^{(1)}(x - x_0)^n - \cdots}. \tag{5}$$

Здесь

$$\omega_1^{(1)} = \frac{y'(x_0)}{y(x_0)},$$

$$\omega_n^{(1)} = -\sum_{k=1}^{n-1} \omega_{n-k}^{(1)} \frac{y^{(k)}(x_0)}{k!\,y(x_0)} + \frac{y^{(n)}(x_0)}{n!\,y(x_0)} \quad (n = 2, 3, 4, \ldots).$$

Разложение (4) принимает вид

$$y(x)=\frac{y(x_0)}{1-\omega_1^{(1)}(x-x_0)-\omega_2^{(1)}(x-x_0)^2-\dots-\omega_n^{(1)}(x-x_0)^n-\dots}. \tag{6}$$

Запишем выражение (5) следующим образом:

$$z_0=\cfrac{1}{1-\omega_1^{(1)}(x-x_0)-\omega_2^{(1)}(x-x_0)^2-\dots-\cfrac{\omega_{n-1}^{(1)}(x-x_0)^{n-1}}{1-\omega_n^{(2)}(x-x_0)}-\dots},$$

где

$$\omega_n^{(2)}=\frac{\omega_n^{(1)}}{\omega_{n-1}^{(1)}}.$$

Тогда

$$y(x)=\cfrac{y(x_0)}{1-\sum_{i=1}^{n-2}\omega_i^{(1)}(x-x_0)^i-\cfrac{\omega_{n-1}^{(1)}(x-x_0)^{n-1}}{1-\omega_n^{(2)}(x-x_0)}-\dots}. \tag{7}$$

Продолжая этот процесс, получаем

$$y(x)=\frac{y(x_0)\,|}{|\,1}-\frac{\omega_1^{(1)}(x-x_0)\,|}{|\,1}-\dots-\frac{\omega_n^{(n)}(x-x_0)\,|}{|\,1}-\dots \tag{8}$$

Коэффициенты дроби (8) определяются через коэффициенты исходного ряда Тейлора

$$\omega_1^{(1)}=\frac{y'(x_0)}{y(x_0)},\quad \omega_{2k}^{(2k)}=\frac{\varphi_{k+1}\psi_{k-1}}{\varphi_k\psi_k},$$

$$\omega_{2k+1}^{(2k+1)}=\frac{\varphi_k\psi_{k+1}}{\varphi_{k+1}\psi_k},\quad \varphi_0=\psi_0=1\quad (k=1,\,2,\,\dots),$$

$$\varphi_k=\begin{vmatrix} y(x_0) & \frac{y'(x_0)}{1!} & \frac{y''(x_0)}{2!} & \dots & \frac{y^{(k)}(x_0)}{k!}\\ \frac{y'(x_0)}{1!} & \frac{y''(x_0)}{2!} & \frac{y'''(x_0)}{3!} & \dots & \frac{y^{(k+1)}(x_0)}{(k+1)!}\\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots\\ \frac{y^{(k)}(x_0)}{k!} & \frac{y^{(k+1)}(x_0)}{(k+1)!} & \frac{y^{(k+2)}(x_0)}{(k+2)!} & \dots & \frac{y^{(2k)}(x_0)}{(2k)!}\end{vmatrix},$$

$$\psi_k=\begin{vmatrix} \frac{y'(x_0)}{1!} & \frac{y''(x_0)}{2!} & \frac{y'''(x_0)}{3!} & \dots & \frac{y^{(k)}(x_0)}{k!}\\ \frac{y''(x_0)}{2!} & \frac{y'''(x_0)}{3!} & \frac{y^{\mathrm{IV}}(x_0)}{4!} & \dots & \frac{y^{(k+1)}(x_0)}{(k+1)!}\\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots\\ \frac{y^{(k)}(x_0)}{k!} & \frac{y^{(k+1)}(x_0)}{(k+1)!} & \frac{y^{(k+2)}(x_0)}{(k+2)!} & \dots & \frac{y^{(2k-1)}(x_0)}{(2k-1)!}\end{vmatrix}.$$

Определение [4]. Аппроксимацией Падэ функции $y(x)$, представленной степенным рядом $y(x)=\sum_{i=0}^{\infty}c_ix^i$, называется последовательность рациональных функций $g_{nm}(x)=P_n(x)/Q_m(x)$, для которых выполняется условие $\left|y(x)-\frac{P_n(x)}{Q_m(x)}\right|=O(x^{n+m+1})$, т. е. разложение g_{nm} в степенной ряд совпадает с исходным степенным рядом до членов x^{n+m} включительно. Матрица $\|g_{nm}\|$ называется таблицей Падэ.

По выражению (6) построим последовательность

$$y(x)=\frac{y(x_0)}{1-\sum\limits_{i=1}^{n}\omega_i^{(1)}(x-x_0)^i}.$$

Ее разложение в степенной ряд совпадает с разложением искомой функции $y(x)$ в ряд Тейлора до членов x^n включительно. Для уравнения (2) она совпадает с первыми n элементами крайнего левого столбца таблицы Падэ для функции $e^{\lambda(x-x_0)}$.

Исходя из разложения (7) построим последовательность

$$y(x)=\frac{y(x_0)}{1-\omega_1^{(1)}(x-x_0)-\cdots-\dfrac{\omega_{n-1}^{(1)}(x-x_0)^{n-1}}{1-\omega_n^{(2)}(x-x_0)}},$$

которая для уравнения (2) совпадает с $n-1$ элементами второго столбца таблицы Падэ, начиная с элемента g_{11}. Продолжая аналогичные построения, мы исчерпаем все элементы, находящиеся в столбцах нижнего треугольника таблицы Падэ.

Таким образом, представляя искомое решение дифференциального уравнения в виде (6) — (8), получаем А-устойчивые методы численного интегрирования дифференциальных уравнений.

Используя формулы (6) — (8), построим нелинейные формулы типа Рунге — Кутта и Адамса. Методы второго порядка точности представим в виде

$$\text{а) } y_{n+1}=\frac{y_n}{1-\dfrac{hk_1}{y_n}-\dfrac{y_nh(k_2-k_1)-2\alpha_2h^2k_1^2}{2\alpha_2y_n^2}}+r_{n+1}, \tag{9}$$

$$r_{n+1}=\frac{h^3}{4}\{\alpha_2(y_n'''-f_yy_n'')+4y_n'(y_ny_n''-(y_n')^2)'y_n^2\}+O(h^4),$$

$$k_1=f(x_n,y_n),\quad k_2=f(x_n+\alpha_2h,\ y_n+\alpha_2hk_1),$$

$$y_{n+1}=y(x_{n+1}),\quad y_n=y(x_n),\quad h=x_{n+1}-x_n,$$

где α_2 — свободный параметр;

$$\text{б) } y_{n+1}=\frac{y_n}{1-\dfrac{\dfrac{hk_1}{y_n}}{1-\dfrac{y_n(k_2-k_1)-2\alpha_2k_1^2h}{2\alpha_2y_nk_1}}}+r_{n+1}, \tag{10}$$

$$r_{n+1}=\frac{h^3}{4}\{\alpha_2(y_n'''-f_yy_n'')+(y_n'')^2/y_n'\}+O(h^4).$$

Операторы перехода соответственно имеют вид

$$S_{n+1}^{a}(\lambda h)=\frac{1}{1-\lambda h+\dfrac{1}{2}(\lambda h)^2},$$

$$S_{n+1}^{б}(\lambda h)=\frac{1+\dfrac{1}{2}\lambda h}{1-\dfrac{1}{2}\lambda h},$$

т. е. $|S_{n+1}^{(а,б)}(\lambda h)| < 1$ при $\mathrm{Re}\,\lambda < 0$ и $h > 0$. Методы третьего порядка точности:

$$a)\quad y_{n+1} = \cfrac{y_n}{1 - \cfrac{\dfrac{hk_1}{y_n}}{1 - \cfrac{\dfrac{y_n(a_1k_1 + a_2k_2) - hk_1^2}{y_nk_1}}{1 - \dfrac{y_n[k_1(b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3) - (a_1k_1 + a_2k_2)^2}{k_1[y_n(a_1k_1 + a_2k_2) - hk_1^2]}}}} + r_{n+1}^{a}, \tag{11}$$

$$k_1 = f(x_n, y_n),\quad k_2 = f(x_n + \alpha_2h,\ y_n + \alpha_2hk_1),$$

$$k_3 = f(x_n + \alpha_3h,\ y_n + \beta_{31}hk_1 + \beta_{32}hk_2),$$

$$a_1 = -\frac{1}{2\alpha_2},\quad a_2 = \frac{1}{2\alpha_2},$$

$$b_1 = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_2\alpha_3},\quad b_2 = \frac{3\alpha_2 - 2}{6\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2)},\quad b_3 = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)},$$

$$\beta_{31} = \frac{\alpha_3}{\alpha_2}\cdot\frac{3\alpha_2(1 - \alpha_2) - \alpha_3}{2 - 3\alpha_2},\quad \beta_{32} = \frac{\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)}{\alpha_2(2 - 3\alpha_2)},$$

$$r_{n+1}^{a} = h^4\left\{e_{n+1} + \frac{2y_n(y_n''')^2 - 12y_n'y_n''y_n''' + 9(y_n'')^3}{36(y_ny_n'' - 2(y_n')^2)}\right\} + O(h^5),$$

где α_2 и α_3 — свободные параметры, e_{n+1} — остаточный член семейства классических методов Рунге — Кутта третьего порядка;

$$б)\quad y_{n+1} = \frac{y_n}{1 - d_1h - d_2h^2 - d_3h^3} + r_{n+1}^{б}, \tag{12}$$

$$d_1 = \frac{k_1}{y_n},$$

$$d_2 = \left[y_n\left(\frac{a_1k_1 + a_2k_2}{h}\right) - k_1^2\right]/y_n^2,$$

$$d_3 = \left[y_n^2\left(\frac{b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3}{h^2}\right) - 2y_nk_1\left(\frac{a_1k_1 + a_2k_2}{h}\right) + k_1^3\right]/y_n^3,$$

$$r_{n+1}^{б} = h^4\left\{e_{n+1} + \frac{1}{12}\left[y_n^2(4y_n'y_n''' + 3(y_n'')^2) - \right.\right.$$

$$\left.\left. - 18y_n(y_n')^2y_n'' + 12(y_n')^4\right]/y_n^3\right\} + O(h^5).$$

По предложенной методике легко построить соответственные нелинейные многошаговые методы типа Адамса. Например (см. разложение (6)):

$$y_{n+1} = \frac{y_n}{1 - \gamma_1h - \gamma_2h^2 - \dots - \gamma_mh^m} + O(h^{m+1}), \tag{13}$$

где

$$\gamma_1 = \frac{y_n'}{y_n};\quad \gamma_m = -\sum_{k=1}^{m-1}\frac{c_k}{y_n}\gamma_{m-k} + \frac{c_m}{y_n},\quad m = 2, 3, \dots;$$

$$c_1 = y_n';\quad c_{i+1} = \frac{\Delta^i y_{n-i}'}{h^i i!}\int_0^1 t(t+1)\dots(t+i-1)\,dt,\qquad i = 1, 2, \dots, m-1;$$

$$\Delta y_{n-1}' = y_n' - y_{n-1}';\quad \Delta^i y_{n-i}' = \Delta^{i-1}y_{n-i+1}' - \Delta^{i-1}y_{n-i}'.$$

Рассмотрим вычислительную формулу

$$y_{n+1}=\frac{b_0+b_1h+\cdots+b_kh^k}{\alpha_0+\sum\limits_{j=1}^{l}\alpha_j\prod\limits_{i=1}^{k+l}\left(\frac{d_iy_n-hF_n}{y_n+\beta_ihF_n}\right)}+O\left(h^{k+1}\right) \tag{14}$$

$$(k=1,\ 2,\ 3,\ \ldots;\quad l=0,\ 1,\ 2,\ \ldots),$$

где коэффициенты b_0, b_1, ..., b_k определяются из соответствующих условий аппроксимации; α_j, d_i, β_i — свободные параметры, а

$$F_n=\sum_{\nu=1}^{m}a_\nu k_\nu,\quad m=1,\ 2,\ 3,\ \ldots;$$

$$k_1=f(x_ny_n);\quad k_\mu=f\left(x_n+p_\mu h,\ y_n+h\sum_{j=1}^{\mu-1}g_{\mu j}k_j\right),$$

$$\mu=2,\ 3,\ \ldots,\ m;$$

p_μ и $g_{\mu j}$ — коэффициенты соответствующих линейных классических методов типа Рунге — Кутта. Среди множества вычислительных методов, которые описываются этой формулой, находятся А-устойчивые, L-устойчивые и жестко устойчивые [2] методы численного интегрирования дифференциальных уравнений.

1. *Хованский А. Н.* Приложение цепных дробей и их обобщений к вопросам приближенного анализа.— М. : Гостехиздат, 1956.— 203 с.
2. *Холл Дж., Уатт Дж.* Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.— М. : Мир, 1979.— 312 с.
3. *Dahlquist G.* A special stability problem for linear multistep methods.— BIT, 1963, 3, p. 27—43.
4. *Wall H. S.* Analitic theory of continued fractions.— Toronto etc. : Van Nostrand, 1948.— 433 p.

Институт прикладных проблем механики и математики АН УССР

Поступила в редколлегию 19.11.79

УДК 534.1 : 531.221.3

Р. М. Таций

О СОЧЕТАНИИ МЕТОДОВ РИТЦА И ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ РЯДОВ В САМОСОПРЯЖЕННЫХ ПОЛНОСТЬЮ ОПРЕДЕЛЕННЫХ ЗАДАЧАХ МНОГОЧЛЕННОГО КЛАССА

Рассмотрим задачу на собственные значения

$$M[y]=\lambda N[y], \tag{1}$$

$$U_\mu[y]=0,\ \mu=1,\ 2,\ \ldots,\ m, \tag{2}$$

где M, N — линейные однородные дифференциальные выражения порядков m и n $(m>n)$ соответственно; U_μ — линейные однородные дифференциальные формы относительно значений функции y и ее производных до $(m-1)$-го порядка в двух фиксированных точках $x=a$ и $x=b$.

Пусть задача (1), (2) является самосопряженной и полностью определенной. Это значит [2], что для любых функций сравнения u, v, удовлетворяющих краевым условиям (2) и m раз непрерывно дифференцируемых, справедливы условия самосопряженности

$$\begin{gathered}\int_a^b(uM[v]-vM[u])\,dx=0,\\ \int_a^b(uN[v]-vN[u])\,dx=0\end{gathered} \tag{3}$$