

ПРИМЕНЕНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ПОЛИНОМОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ*

С.М. Аульченко, А.Ф. Латыпов, Ю.В. Никуличев

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, Новосибирск, Россия

e-mail: latypov@itam.nsc.ru

Предлагается семейство методов, основанное на представлении функций правых частей локальными параметрическими полиномами, для решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Метод позволяет в процессе решения вычислять локальную и глобальную погрешность решения, интегрируя систему уравнений в вариациях. Доказана A - и L -устойчивость при определенных значениях параметров. На примерах решения ряда известных тестовых задач приведены оценки локальной и глобальной погрешностей и сравнения с некоторыми известными методами в авторской реализации.

Исходные соотношения

Пусть функция $f(x)$ на отрезке $[x_1, x_K]$ задана в K упорядоченных по возрастанию аргумента точках x_1, x_2, \dots, x_K вместе со своими производными до порядков $L_i, i=1, 2, \dots, K$ включительно. Обозначим производные функции $f(x)$ в заданных точках через $f_i^{(j)}, j=0, 1, \dots, L_i$, так что $f_i^{(0)} = f(x_i), f_i^{(j)} = d^j f(x_i) / dx^j$. Рассмотрим сегмент $X_i = [x_i, x_{i+1}]$ и обозначим $L = L_i, R = L_{i+1}$. Предполагая функцию $f(x)$ на всем отрезке $[x_1, x_K]$ гладкой до степени $M = \max(L_i + L_{i+1}) + 2, i=1, K$ представим ее на сегментах $X_i, i=1, 2, \dots, K-1$ полиномами следующего вида:

$$\tilde{f}_i(x) = (1-\xi)^{R+1} \sum_{k=0}^L a_{ki} \xi^k + \xi^{L+1} \sum_{m=0}^R b_{mi} (1-\xi)^k, \quad (1)$$

$$\xi = (x - x_i) / h_i, \quad h_i = x_{i+1} - x_i.$$

Коэффициенты полиномов (1) определим по заданным значениям функции $f(x)$ и ее производных соответственно для первой суммы в точке x_i и для второй суммы – в точке x_{i+1} , что легко позволяет сделать выбранная форма записи (1). Получим следующие соотношения:

$$a_{ki} = \sum_{j=0}^k \tilde{f}_i^{(j)} C_{R+k-j}^R / j!, \quad b_{mi} = \sum_{j=0}^m \tilde{f}_{i+1}^{(j)} (-1)^j C_{L+k-j}^L / j!, \quad k = \overline{0, L}, \quad m = \overline{0, R}, \quad (2)$$

$$\tilde{f}_i^{(j)} = h^j d^j f(x_i) / dx^j, \quad C_i^j = \frac{i!}{j!(i-j)!}, \quad i = \overline{1, K-1}.$$

Полиномы (1) с использованием для коэффициентов формул (2) можно записать в виде

$$\tilde{f}(x) = \sum_{k=0}^L \tilde{f}_i^{(k)} \psi_k(\xi) + \sum_{m=0}^R (-1)^m \tilde{f}_{i+1}^{(m)} \chi_m(\xi), \quad \xi \in [0, 1], \quad (3)$$

где

$$\psi_k(\xi) = \frac{1}{k!} \left[(1-\xi)^{R+1} \sum_{j=0}^{L-k} C_{R+j}^R \xi^{k+j} \right], \quad k = \overline{0, L}, \quad (4)$$

$$\chi_m(\xi) = \frac{1}{m!} \left[\xi^{L+1} \sum_{j=0}^{R-m} C_{L+j}^L (1-\xi)^{m+j} \right], \quad m = \overline{0, R}, \quad \xi \in [0, 1].$$

Обозначим $Q=L+R+2$ и приведем необходимые в дальнейшем соотношения для определенных интегралов этих

* Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 99-01-00564.

функций.

$$I_k(\xi) = \int_0^\xi \psi_k(\xi) d\xi = \frac{\xi^{k+1}}{(k+1)!} - \frac{1}{k!} \sum_{j=0}^R \frac{\xi^{L+2+j}}{(L+2+j)} p_{j,k}, \tag{5}$$

$$J_m(\xi) = \int_0^\xi \chi_m(\xi) d\xi = \frac{1-(1-\xi)^{m+1}}{(m+1)!} - \frac{1}{m!} \sum_{j=0}^L \frac{1-(1-\xi)^{R+2+j}}{(R+2+j)} q_{j,m},$$

$$I_k(1) = \frac{C_{L+1}^{k+1}}{C_Q^{k+1}(k+1)!}, \quad J_m(1) = \frac{C_{R+1}^{m+1}}{C_Q^{m+1}(m+1)!}, \quad k = \overline{0, L}, \quad m = \overline{0, R}. \tag{6}$$

Полиномы (3) представляют собой интерполирующие полиномы Эрмита, записанные в удобной для практического использования форме. Очевидно, представление (3) обладает гладкостью до степени $L_m = \min(L_i), i = \overline{1, K}$ на всем отрезке $[x_1, x_K]$. Остаточный член полинома (3) на i -м интервале, согласно [1], записывается соотношением

$$f(x) - \tilde{f}(x) = (1-\xi)^{R+1} \xi^{L+1} \frac{f^{(Q)}(\xi) h^Q}{Q!}, \quad \xi \in [0, 1]. \tag{7}$$

Используем соотношение (7) для получения верхней оценки точности представления (3). Заметим, что

$$\max_{\xi \in [0,1]} (1-\xi)^{R+1} \xi^{L+1} = \frac{(L+1)^{R+1} \cdot (R+1)^{L+1}}{Q^Q}.$$

Тогда

$$\delta_i = \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]} |f(x) - \tilde{f}(x)| \leq \frac{(L+1)^{R+1} (R+1)^{L+1} h^Q d_Q}{Q^Q Q!}, \quad d_Q = \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]} |f^{(Q)}(x)|. \tag{8}$$

Задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

Пусть дана задача Коши для решения системы n обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$y'(x) = f(y), \quad y(0) = y_0, \quad x \in [0, X].$$

Рассмотрим решение системы на одном шаге величины $h < X, x \in [x_j, x_j + h]$. Представим систему на шаге h в виде

$$dy / d\xi = h f(y) \equiv \Phi(\xi), \quad y(0) = y_0, \quad \xi \in [0, 1]. \tag{9}$$

Зададим две целые величины L и R . Предполагая, что существует единственное решение и функции правых частей уравнений (9) на решении имеют порядок гладкости по y не ниже $Q = L+R+2$, представим их на шаге h в форме (1):

$$\tilde{\Phi}_i(\xi) = (1-\xi)^{R+1} \sum_{k=0}^L a_{ki} \xi^k + \xi^{L+1} \sum_{k=0}^R b_{ki} (1-\xi)^k + 2^Q (1-\xi)^{L+1} \xi^{R+1} c_i, \tag{10}$$

$$\xi = x/h, \quad i = \overline{1, n}.$$

Коэффициенты полиномов при двух первых членах (10) определяются по заданным значениям функции $\Phi(y(x))$ и ее производных соответственно для первой суммы в точке $x = x_j (\xi = 0)$ и для второй суммы – в точке $x = x_j + h (\xi = 1)$ и, значит, они удовлетворяют соотношениям (2).

Коэффициенты при третьем члене суммы (10) определим из значения функций правых частей системы (10) в середине отрезка $[0, h]$. Полиномы (10), следовательно, запишутся аналогично соотношениям (3) в следующем виде:

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}(\xi) &= \sum_{k=0}^L \Phi_0^{(k)} \psi_k(\xi) + \sum_{m=0}^R (-1)^m \Phi_1^{(m)} \chi_m(\xi) + 2^Q (1-\xi)^{R+1} \xi^{L+1} \mathbf{c}, \\ \mathbf{c} &= \Phi_{1/2} - \sum_{k=0}^L \psi_k(1/2) \Phi_0^{(k)} - \sum_{m=0}^R (-1)^m \chi_m(1/2) \Phi_1^{(m)}.\end{aligned}\quad (11)$$

Здесь и дальше нижний индекс указывает на значение переменной; напомним также, что $\Phi^{(k)}(\xi) = h\bar{f}^{(k)}(x_j + h\xi)$, $\Phi'(\xi) = \Phi^{(1)}(\xi)$, надчерк – в соответствии с обозначениями в (2). Проинтегрировав полиномы (11) на отрезках $[0, 1]$, $[0, 1/2]$, получим следующую неявную систему $2n$ алгебраических уравнений для определения решений в точках $\xi=1/2$ и $\xi=1$:

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{y}}(1) = \mathbf{y}_0 + P(1) \Phi_{1/2} + \sum_{k=0}^L \gamma_k(1) \Phi_0^{(k)} + \sum_{m=0}^R (-1)^m \eta_m(1) \Phi_1^{(m)}, \\ \tilde{\mathbf{y}}(1/2) = \mathbf{y}_0 + P(1/2) \Phi_{1/2} + \sum_{k=0}^L \gamma_k(1/2) \Phi_0^{(k)} + \sum_{m=0}^R (-1)^m \eta_m(1/2) \Phi_1^{(m)}, \end{cases}\quad (12)$$

где

$$\begin{aligned}\gamma_k(\xi) &= I_k(\xi) - P(\xi) \psi_k(1/2), \quad \eta_m(\xi) = J_m(\xi) - P(\xi) \chi_m(1/2), \\ P(\xi) &= 2^Q \alpha_{L+1, R+1}(\xi), \quad \alpha_{m,n}(\xi) = \int_0^\xi \xi^m (1-\xi)^n d\xi = \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j C_n^j}{j(m+1+j)} \xi^{m+1+j}, \\ \alpha_{L+1, R+1}(1) &= \frac{1}{(L+2)C_{Q+1}^{R+1}}.\end{aligned}$$

Метод решения задачи Коши для систем ОДУ, основанный на пошаговом решении систем алгебраических уравнений (12), назван *LRM*-методом.

В работе [5] приводится метод, названный *LR*-методом, в котором при представлении функций правых частей системы (9) используются полиномы (10) без третьего члена. Как показано в [2], введение третьего члена значительно увеличило эффективность и удобство практического применения получаемого таким образом метода.

Представление в форме (11) является интерполяционным многочленом Эрмита по трем точкам, для которого в принятых в [1] обозначениях $\alpha_0=L+1$, $\alpha_1=1$, $\alpha_2=R+1$ и формула для вычисления погрешности имеет вид

$$\tilde{\Phi}(\xi) - \Phi(\xi) = \frac{\Phi^{(Q+1)}(\theta\xi)}{(Q+1)!} \xi^{L+1} (\xi-1)^{R+1} (\xi-1/2), \quad \theta \in (0,1). \quad (13)$$

Для оценки ошибки решения на шаге h

$$\delta\mathbf{y}(h) = |\tilde{\mathbf{y}}(h) - \mathbf{y}(h)| = \int_0^1 [\tilde{\Phi}(\xi) - \Phi(\xi)] d\xi, \quad (14)$$

учитывая малость величины шага интегрирования, положим

$$\Phi^{(Q+1)}(\theta\xi) = \Phi^{(Q+1)}(0) + \theta\Phi^{(Q+2)}(0)\xi + o(\xi).$$

Проведя интегрирование в (14), получим оценку локальной погрешности решения на шаге h :

$$|\mathbf{y}(h) - \tilde{\mathbf{y}}(h)| \sim h^{Q+3}. \quad (15)$$

Для линейных систем ОДУ вида

$$\mathbf{y}' = A\mathbf{y} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \quad x \in [0, X] \quad (16)$$

с заданной матрицей A и векторами \mathbf{y}_0 , \mathbf{b} производные вычисляются по формулам

$$\mathbf{y}^{(k)} = A^k \mathbf{y} + A^{k-1} \mathbf{b}. \quad (17)$$

Подставив (17) в (12), получим систему линейных алгебраических уравнений для определения решения в точках $x = h$ и $x = h/2$.

$$\begin{aligned} & \left[E - \sum_{m=0}^R (-1)^m \eta_m(1) \bar{A}^{m+1} \right] \tilde{\mathbf{y}}(h) - P(1) \bar{A} \tilde{\mathbf{y}}(h/2) = \\ & \left[E + \sum_{k=0}^L \gamma_k(1) \bar{A}^{k+1} \right] \mathbf{y}_0 + \left[P(1) + \sum_{k=0}^L \gamma_k(1) \bar{A}^k + \sum_{m=0}^R (-1)^m \eta_m(1) \bar{A}^m \right] \mathbf{b}, \\ & \left[\sum_{m=0}^R (-1)^m \eta_m(1/2) \bar{A}^{m+1} \right] \tilde{\mathbf{y}}(h) + \left[E - P(1/2) \bar{A} \right] \tilde{\mathbf{y}}(h/2) = \\ & \left[E + \sum_{k=0}^L \gamma_k(1/2) \bar{A}^{k+1} \right] \mathbf{y}_0 + \\ & \left[P(1/2) + \sum_{k=0}^L \gamma_k(1/2) \bar{A}^k + \sum_{m=0}^R (-1)^m \eta_m(1/2) \bar{A}^m \right] \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь E – единичная матрица. Особенностью системы (18) является то, что матрицы-коэффициенты перед неизвестными и правые части зависят только от h и, значит, в процедуре решения на отрезке $[0, X]$ с постоянным шагом не нужно пересчитывать эти величины на каждом шаге.

Показано, что при $R \geq L$ LRM-метод A -устойчив в смысле [3], при $R > L$ — L -устойчив.

Множество значений параметров L и R в описанном подходе порождают семейство LRM-методов решения задачи Коши для систем ОДУ. Так, в [2] описывается разработанный авторами настоящей статьи эффективный вариант LRM-метода для $L = R = 1$. Основным затруднением при использовании LRM-метода является расчет производных для функций правых частей системы (9). Для функций правых частей системы (9), представимых «аналитически» – в виде конечной последовательности алгебраических операций над множеством аналитических функций – можно воспользоваться методом аналитических преобразований

Опишем еще один метод из рассматриваемого семейства, названный LRMD-методом, имеющий 7-й порядок точности по шагу h и обладающий свойствами A - и L -устойчивости, основанный на следующем одношаговом алгоритме. Представим функции правых частей системы (9) полиномами аналогично (10) со значениями $L=R=1$ и с добавлением еще одного члена:

$$\begin{aligned} \Phi(\xi) = & (1-\xi)^2 (\mathbf{a}_0 + \mathbf{a}_1 \xi) + \xi^2 [\mathbf{b}_0 + \mathbf{b}_1 (1-\xi)] + \\ & + (1-\xi)^2 \xi^2 [\mathbf{c}_{1/2} (1-\zeta) + \mathbf{c}_* \zeta], \quad \zeta = (1/2 - \xi)/(1/2 - \xi_*), \quad \xi_* = 1 - \Delta. \end{aligned} \quad (19)$$

Коэффициенты представления (19) определяются аналогично (10) из значений функций правых частей системы (9) в соответствующих точках. Получим следующие соотношения для определения коэффициентов (19):

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_0 = & \Phi_0, \quad \mathbf{a}_1 = 2\Phi_0 + \Phi'_0, \quad \mathbf{b}_0 = \Phi_1, \quad \mathbf{b}_1 = 2\Phi_1 - \Phi'_1, \\ \mathbf{c}_{1/2} = & 16\Phi_{1/2} - 8(\Phi_0 + \Phi_1) + 2(\Phi'_1 - \Phi'_0), \\ \mathbf{c}_* = & \frac{(3-2\Delta)(\Phi_1 - \Phi_0) + (\Delta-2)\Phi'_1 - \Phi'_0}{(1-\Delta)^2} - \frac{\Phi'_0}{(1-\Delta)} + \frac{\Phi_* - \Phi_1 + \Delta\Phi'_1}{\Delta^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Поскольку $\Phi_*(1-) = \Phi_1 - \Phi'_1 \Delta + 0.5 \Phi_1^{(2)} \Delta^2 + o(\Delta^2)$,

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \mathbf{c}_* = 3(\Phi_1 - \Phi_0) - \Phi'_0 - 2\Phi'_1 + \Phi_1^{(2)}/2.$$

Проинтегрируем систему (9) с функциями правых частей (19) в пределах от 0 до 1/2, от 0 до 1 и от 0 до $1-\Delta$. Получим

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{y}}(x_0 + h/2) = & \mathbf{y}_0 + (7/24)\mathbf{a}_0 + (11/192)\mathbf{a}_1 + (1/24)\mathbf{b}_0 + (5/192)\mathbf{b}_1 + \\ & + \frac{5-16\Delta}{1920(1-2\Delta)} \mathbf{c} + \frac{7}{960(1-2\Delta)} \mathbf{c}_*, \\ \tilde{\mathbf{y}}(x_0 + h) = & \mathbf{y}_0 + (1/3)(\mathbf{a}_0 + \mathbf{b}_0) + (1/12)(\mathbf{a}_1 + \mathbf{b}_1) + (1/30) \mathbf{c}, \\ \tilde{\mathbf{y}}(x_0 + h - \Delta) = & \mathbf{y}_0 + \alpha_{02}(\xi_*) \mathbf{a}_0 + \alpha_{12}(\xi_*) \mathbf{a}_1 + \alpha_{20}(\xi_*) \mathbf{b}_0 + \alpha_{21}(\xi_*) \mathbf{b}_1 + \\ & + \alpha_{22}(\xi_*) \mathbf{c} + (\alpha_{32}(\xi_*) - \alpha_{22}(\xi_*)/2)(\mathbf{c}_* - \mathbf{c})/(\xi_* - 1/2). \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь обозначения те же, что в (12).

Для решения системы алгебраических уравнений (20), (21) применяется метод простых итераций, сходимость которого обеспечивается выбором значения шага интегрирования h [4]. Для определения первого приближения к решению воспользуемся LRM-методом со значениями параметров $L=R=0$. Система уравнений (12) при этом будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{y}}(1/2) &= \mathbf{y}_0 + (5/24) \cdot \Phi_0 + (1/3) \cdot \Phi_{1/2} + (-1/24) \cdot \Phi_1, \\ \tilde{\mathbf{y}}(1) &= \mathbf{y}_0 + (1/6) \cdot \Phi_0 + (2/3) \cdot \Phi_{1/2} + (1/6) \cdot \Phi_1.\end{aligned}\quad (22)$$

Система уравнений (22) решается методом Ньютона; получаемое решение, согласно (15), имеет погрешность 5-го порядка, что является достаточно хорошим приближением к решению $\mathbf{y}(\xi)$. Локальная и глобальная ошибки вычисляется так же, как в [2]

Показано, что по сравнению с вариантом LRM-метода [2] LRMD-метод обладает также L -устойчивостью.

Для тестовых расчетов были взяты пять систем обыкновенных дифференциальных уравнений, приведенных в [2]. Результаты расчетов приведены в таблице. Расчеты проводились следующими методами:

- стандартный метод Рунге – Кутты (Ст. Р – К), взятый для демонстрации преимуществ неявных схем и для сравнения решений слабо жестких систем (пример 4);
- разновидность LRM-метода, опубликованная в [2] (LRM);
- LRMD-метод (LRMD);
- программный пакет, реализующий метод Гира (Gear);
- неявный метод Рунге – Кутты 5-го порядка (Rk5).

Задача	Метод	H_{\min}	h_{\max}	$K_{\text{общ}}$	$K_{\text{усп}}$	$K_{\text{яправ}}$	$K_{\text{якоб}}$	E_{lock}	E_{glob}
1	Ст. Р—К	0.00011	0.002	6441	3147	64116	—	1.00E–06	3.91E–09
	LRM	0.0008	1.147	11	10	35	33	1.00E–06	2.06E–08
	LRMD	0.0008	1.616	10	10	31	31	1.00E–06	1.67E–09
	Gear	—	—	—	—	339	90	1.00E–07	1.00E–06
	Rk5	0.00017	1.27	11	11	53	1	1.00E–07	1.00E–09
2	Ст. Р—К	0.00003	0.003	8839	6538	88864	—	1.00E–06	5.75E–10
	LRM	0.001	0.592	39	24	754	751	1.00E–06	6.66E–06
	LRMD	0.001	2.147	22	15	103	103	1.00E–07	3.14E–09
	Gear	—	—	—	—	1166	180	1.00E–07	1.00E–08
	Rk5	0.0001	0.1	70	64	86	51	1.00E–07	1.00E–07
3	Ст. Р—К	0.00175	0.19	12600	7526	130904	—	1.00E–07	4.70E–07
	LRM	0.014	68.85	40	27	882	879	1.00E–05	3.40E–07
	LRMD	0.00982	84.84	39	30	221	221	1.00E–05	2.06E–08
	Gear	—	—	—	—	3011	3011	1.00E–10	—
	Rk5	0.001	11.65	345	202	2405	2405	1.00E–07	1.00E–07
4	Ст. Р—К	0.00021	0.180	226	172	2496	—	1.00E–07	7.30E–04
	LRM	0.001	1.054	77	49	1087	1085	1.00E–06	1.05E–04
	LRMD	0.00071	1.057	87	69	202	202	1.00E–05	1.00E–07
	Gear	—	—	—	—	3294	512	1.00E–09	—
	Rk5	0.00014	0.22	254	254	2405	252	1.00E–07	1.00E–04
5	Ст. Р—К	0.00033	0.072	491	440	5688	—	1.00E–05	2.21E–07
	LRM	0.009	4.541	8	8	202	199	1.00E–05	6.47E–09
	LRMD	0.009	4.995	9	9	192	192	1.00E–04	2.07E–09
	Gear	—	—	—	—	4227	708	1.00E–08	5.56E–06
	Rk5	0.00035	29.90	23	13	130	17	1.00E–08	1.01E–07

В колонках таблицы представлены соответственно номер задачи, метод, полученные в процессе решения минимальный и максимальный шаг интегрирования, число шагов интегрирования, число шагов интегрирования, удовлетворивших требованию точности (успешных шагов), число вычислений правых частей системы, число вычислений якобианов правых частей системы, задаваемая локальная точность и получаемая глобальная (относительная) точность, которая рассчитывалась по известному точному решению.

Список литературы

- [1] **Березин И.С., Жидков Н.П.** Методы вычислений. М.: Наука, 1970.
- [2] **Аульченко С.М., Латыпов А.Ф. Никуличев Ю.В.** Метод численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений с использованием интерполяционных полиномов Эрмита // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1998. Т. 38. № 10. С. 1665-1670.
- [3] **Dahlquist G.** A special stability problem for linear multistep methods // BIT. 1963. V. 3. P. 27-43.
- [4] **Петровский И.Г.** Лекции по теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1970.
- [5] **Никуличев Ю.В.** Численный метод интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений на основе аналитического дифференцирования функций на ЭВМ // Числ. методы механики сплошной среды. 1980. Т. 11, № 1.