И З В Е С Т И Я   В Ы С Ш И Х   У Ч Е Б Н Ы Х   З А В Е Д Е Н И Й

2005 МАТЕМАТИКА № 2 (513)

УДК 519.624

И.В. ОЛЕМСКОЙ

КОНСТРУИРОВАНИЕ ЯВНЫХ МЕТОДОВ ТИПА РУНГЕ–КУТТА ИНТЕГРИРОВАНИЯ СИСТЕМ СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

1. Введение

При решении задачи Коши

$$\begin{gathered} y_i' = f_i(x, y_1, \dots, y_n), \quad i = 1, \dots, n, \\ y_i(X_0) = y_{i\,0}, \quad i = 1, \dots, n, \\ x \in [X_0, X_1] \subset R, \quad y_i : [X_0, X_1] \longrightarrow R, \quad i = 1, \dots, n, \\ f_i : [X_0, X_1] \times R^n \longrightarrow R, \quad i = 1, \dots, n, \end{gathered} \tag{1.1}$$

общая схема явного метода Рунге–Кутта ([1], гл. 6, § 3, с. 82) численного интегрирования системы (1.1) имеет вид

$$y_i(x+h) \approx z_i = y_i(x) + \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij} k_{ij}(h), \quad i = 1, \dots, n, \tag{1.2}$$

где функции $k_{ij}(h)$ вычисляются по следующей схеме:

$$\begin{gathered} k_{ij}(h) = h f_i\Big(x + c_{ij} h, y_1(x) + \sum_{p=1}^{j-1} a_{ij1p} k_{1p}, \dots, y_n(x) + \sum_{p=1}^{j-1} a_{ijnp} k_{np}\Big), \\ c_{i1} = 0, \quad a_{i1s0} = 0, \quad s = 1, \dots, n. \end{gathered} \tag{1.3}$$

Здесь m_i — число этапов и q_i — порядок по i-й компоненте искомой функции в общем случае могут быть различны по каждой из компонент. Поэтому при построении расчетных схем метода их характеристикой могут выступать как векторы числа этапов $M = (m_1, \dots, m_n)$ и порядка $Q = (q_1, \dots, q_n)$, если хотя бы одна из компонент соответствующих векторов отлична от остальных (и тогда метод называется *разноэтапным* и *разнопорядковым* соответственно), так и скаляры m и q, если компоненты соответствующих векторов равны между собой: $m_1 = \ldots = m_n = m$, $q_1 = \ldots = q_n = q$.

Под *порядком метода* (1.2), (1.3) при векторе порядка $Q = (q_1, \dots, q_n)$ будем понимать $q = \min\{q_1, \dots, q_n\}$.

Введем еще одно понятие, необходимое для сравнения методов интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Определение. Пусть для некоторого вектора числа этапов в рамках одношагового метода существует расчетная схема с вектором порядка $Q = (q_1, \dots, q_n)$. Будем называть такой вектор числа этапов минимальным и обозначать $M(Q) = (m_1(q_1), \dots, m_n(q_n))$, если для любой $M = (m_1, \dots, m_n)$-этапной расчетной схемы с вектором порядка $Q = (q_1, \dots, q_n)$ этого же метода справедливы неравенства $m_i \geq m_i(q_i)$, $i = 1, \dots, n$.

В скалярном случае минимальное число этапов метода порядка q будем обозначать через $m(q)$.

При построении расчетных схем ([1], гл. 6, § 3, с. 84) в рамках метода (1.2), (1.3) традиционно в силу равноправности уравнений системы параметры метода полагают независящими от номеров компоненты i и s: $b_j \equiv b_{ij}$, $c_j \equiv c_{ij}$, $a_{jp} \equiv a_{ijsp}$, $m \equiv m_i$.

Такой способ распространения метода (*формальный*) (1.2), (1.3) интегрирования уравнений на системы сужает его возможности, однако значительно упрощает задачу конструирования методов интегрирования систем. В этом случае методы строятся для скалярных уравнений, а распространение на системы осуществляется простой заменой скалярных функций y, f, k_j на соответствующие векторные. При этом все утверждения о соотношении порядка метода q и числа этапов m, справедливые для скалярного случая, верны и для векторного: $m(q) = q$, $q \leq 4$. Эти равенства справедливы не только для формального метода интегрирования системы (1.1), но и для общей схемы метода (1.2), (1.3).

В ([2], гл. 2, § 14, с. 294; [3]) предложен метод и построена теория условий порядка для разделяющихся дифференциальных уравнений. Параметры метода интегрирования разделяющихся систем зависят от номера компоненты решения s, но все они одинаковы для всех компонент i правой части: $b_j \equiv b_{ij}$, $c_j \equiv c_{ij}$, $a_{jsp} \equiv a_{ijsp}$, $m \equiv m_i$. А это значит, что в методе для разделяющихся систем (как и в формальном) порядок вычислений функций k_{ij} на j-м этапе произволен (обычно в порядке возрастания индекса i). Метод интегрирования разделяющихся систем и формальный метод пассивно используют структурные особенности интегрируемых систем только на уровне исследования условий порядка.

В отличие от указанных выше подходов в данной работе рассматривается новый явный одношаговый метод типа Рунге–Кутта решения задачи Коши для структурно разделяющихся систем обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\begin{cases} y_1' = f_1(x, y_n), \\ y_j' = f_j(x, y_{j-1}), \quad j = 2, \ldots, n, \quad n \geq 2, \end{cases} \tag{1.4}$$
$$y_s(X_0) = y_{s0}, \quad s = 1, \ldots, n, \quad x \in [X_0, X_1] \subset R,$$

где y_s, f_s — функции размерности r_s. Для их интегрирования [4] построены экономичные двух- и трехэтапные методы третьего и четвертого порядков соответственно.

2. Метод интегрирования

Считаем, что известно точное решение $y_s(x)$, $s = 1, \ldots, n$, задачи (1.4) в точке $x \in [X_0, X_1]$. Приближение z_s, $s = 1, \ldots, n$, к точному решению $y_s(x+h)$ в точке $x + h \in [X_0, X_1]$ ищем в виде

$$y_s(x+h) \approx z_s = y_s(x) + \sum_{w=1}^{m_s} b_{sw} k_{sw}(h), \quad s = 1, \ldots, n, \tag{2.1}$$

где функции $k_{sw} \equiv k_{sw}(h)$ вычисляем по схеме

$$k_{1w} = \begin{cases} h f_1(x, y_n(x)), & w = 1; \\ h f_1\Big(x + c_{1w} h, y_n(x) + \sum\limits_{g=1}^{w-1} a_{1wg} k_{nw}\Big), & w > 1, \end{cases} \tag{2.2}$$

$$k_{iw} = h f_i\left(x + c_{iw} h, y_{i-1}(x) + \sum_{g=1}^{w} a_{iwg} k_{i-1\, g}\right), \quad c_{i1} \neq 0, \quad i = 2, \ldots, n, \tag{2.3}$$

в строгой последовательности $k_{11}, k_{21}, \ldots, k_{n1}, k_{12}, k_{22}, \ldots$; m_s — число этапов (количество вычислений s-й компоненты правой части системы (1.4) на шаге интегрирования):

$$m_1 = \cdots = m_s \geq m_{s+1} = \cdots = m_n, \ m_s - m_{s+1} \leq 1, \tag{2.4}$$

b_{sw}, c_{sw}, a_{swg} — параметры метода (2.1)–(2.4); h — шаг метода.

Для компактного представления метода (2.1)–(2.4) можно использовать табличное представление (табл. 1), состоящее из n подтаблиц.

Таблица 1. Метод (2.1)–(2.4) интегрирования систем (1.4)

$c_{1\eta}$	$a_{1\eta\nu}$			$b_{1\eta}$
c_{11}				b_{11}
c_{12}	a_{121}			b_{12}
....	.....	...	....	....
$c_{1\,m_1}$	$a_{1\,m_1\,1}$	...	$a_{1\,m_1\,m_1-1}$	$b_{1\,m_1}$

$c_{2\eta}$	$a_{2\eta\nu}$			$b_{2\eta}$
c_{21}	a_{211}			b_{21}
c_{22}	a_{221}			b_{22}
....	.....	...	....	....
$c_{2\,m_2}$	$a_{2\,m_2\,1}$	...	$a_{2\,m_2\,m_2}$	$b_{2\,m_2}$

....

$c_{n\eta}$	$a_{n\eta\nu}$			$b_{n\eta}$
c_{n1}	a_{n11}			b_{n1}
c_{n2}	a_{n21}			b_{n2}
....	......	....	....	....
$c_{n\,m_n}$	$a_{n\,m_n\,1}$	...	$a_{n\,m_n\,m_n}$	$b_{n\,m_n}$

Здесь исследуются возможности $M = (3, \dots, 3, 2)$-этапного метода (2.1)–(2.4) интегрирования систем (1.4) при построении вычислительных схем четвертого порядка.

При ограничениях $\sum\limits_{g=1}^{w} a_{swg} = c_{sw}$, $c_{11} = 0$, $w = 1, \dots, m_s$, условия порядка метода, которым должны удовлетворять параметры метода (2.1)–(2.4) при $q_s = 4$, $s = 1, \dots, n$, образуют систему $8n$ нелинейных алгебраических уравнений с $12n - 9$ неизвестными b_{sj}, c_{sj}, a_{sjw}:

$$\sum_{w=1}^{m_s} b_{sw} c_{sw}^{p} = \frac{1}{p+1}, \quad p = 0, 1, 2, 3; \tag{2.5}$$

$$\sum_{w=1}^{m_s} b_{sw} c_{sw}^{\xi} \sum_{g=1}^{w} a_{swg} c_{s-1\,g}^{\varkappa} = \frac{1}{2(\xi+3)\varkappa}, \quad (\xi, \varkappa) \in \{(0,1), (1,1), (0,2)\}; \tag{2.6}$$

$$\sum_{w=1}^{m_s} b_{sw} \sum_{g=1}^{w} a_{swg} \sum_{t=1}^{g} a_{s-1\,gt} c_{s-2\,t} = \frac{1}{24}. \tag{2.7}$$

Такая компактная запись предполагает (здесь и в дальнейшем), что, во-первых, интервалы изменения индексов фиксированы ($s = 1, \dots, n$, $v = 2, \dots, n-1$, $d = 3, \dots, n-1$), и, во-вторых, формально вводятся и считаются нулевыми параметры, явно не присутствующие в вычислительной схеме метода (2.1)–(2.4) ($b_{0j} \equiv b_{nj}$, $c_{0j} \equiv c_{nj}$, $a_{0jg} \equiv a_{njg}$, $c_{-1\,j} \equiv c_{n-1\,j}$, $a_{1jj} = 0$, $c_{11} = 0$, $c_{n3} = b_{n3} = a_{n3j} = 0$).

Теорема 1. *В рамках $M = (3, 2)$-этапного метода* (2.1)–(2.4) *численного интегрирования системы* (1.4) *не существует расчетной схемы с порядком $Q = (4, 3)$.*

Доказательство сводится к установлению несовместности условий порядка (2.5)–(2.7), которые в этих предположениях образуют систему 16 нелинейных алгебраических уравнений с 15 неизвестными b_{sw}, c_{sw}, a_{swg}. Для систем двух уравнений (1.4) с неравнотрудоемкими (по числу арифметических операций) правыми частями построена вычислительная схема третьего порядка (табл. 2) с минимальным количеством слагаемых в главном члене погрешности по первой компоненте.

Таблица 2. Метод (2.1)–(2.4) третьего порядка интегрирования систем (1.4) при $n = 2$

$c_{1\eta}$	$a_{1\eta\nu}$		$b_{1\eta}$
0			$\frac{9-\sqrt{3}}{52}$
$\frac{3-\sqrt{3}}{3}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{3}$		$\frac{13+7\sqrt{3}}{44}$
$\frac{9+\sqrt{3}}{12}$	$\frac{5+2\sqrt{3}}{16}$	$\frac{21-2\sqrt{3}}{48}$	$\frac{76-20\sqrt{3}}{143}$

$c_{2\eta}$	$a_{2\eta\nu}$		$b_{2\eta}$
$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$		$\frac{1}{2}$
$\frac{3+\sqrt{3}}{6}$	$\frac{5+\sqrt{3}}{22}$	$\frac{9+4\sqrt{3}}{33}$	$\frac{1}{2}$

Теорема 2. *В рамках* $M = (3, \ldots, 3, 2)$*-этапного метода* (2.1)–(2.4) *численного интегрирования системы* (1.4) *при* $n \geq 3$ *существует расчетная схема четвертого порядка.*

При доказательстве теоремы найдено частное решение (табл. 3) системы (2.5)–(2.7).

Таблица 3. Метод (2.1)–(2.4) четвертого порядка интегрирования систем (1.4) при $n \geq 3$

$c_{1\eta}$	$a_{1\eta\nu}$		$b_{1\eta}$
0			$\frac{9-\sqrt{3}}{52}$
$\frac{3-\sqrt{3}}{3}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{3}$		$\frac{13+7\sqrt{3}}{44}$
$\frac{9+\sqrt{3}}{12}$	$\frac{5+2\sqrt{3}}{16}$	$\frac{21-2\sqrt{3}}{48}$	$\frac{76-20\sqrt{3}}{143}$

$c_{2\eta}$	$a_{2\eta\nu}$			$b_{2\eta}$
$\frac{3-\sqrt{3}}{12}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{12}$			$\frac{76-20\sqrt{3}}{143}$
$\frac{\sqrt{3}}{3}$	$\frac{11\sqrt{3}-15}{24}$	$\frac{5-\sqrt{3}}{8}$		$\frac{13+7\sqrt{3}}{44}$
1	$\frac{\sqrt{3}-1}{8}$	$\frac{73+63\sqrt{3}}{264}$	$\frac{28-12\sqrt{3}}{33}$	$\frac{9-\sqrt{3}}{52}$

$c_{d\eta}$	$a_{d\eta\nu}$			$b_{d\eta}$
$\frac{3-\sqrt{3}}{12}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{12}$			$\frac{76-20\sqrt{3}}{143}$
$\frac{\sqrt{3}}{3}$	$\frac{\sqrt{3}-1}{2}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$		$\frac{13+7\sqrt{3}}{44}$
1	$\frac{35-15\sqrt{3}}{66}$	$\frac{31+15\sqrt{3}}{66}$	0	$\frac{9-\sqrt{3}}{52}$

$c_{n\eta}$	$a_{n\eta\nu}$		$b_{n\eta}$
$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$		$\frac{1}{2}$
$\frac{3+\sqrt{3}}{6}$	$\frac{5+\sqrt{3}}{22}$	$\frac{9+4\sqrt{3}}{33}$	$\frac{1}{2}$

При его поиске использовались упрощающие предположения $\sum\limits_{g=w}^{m_s} b_{sg} a_{sgw} = b_{s-1\,w}(1 - c_{s-1\,w})$, $w = 1, 2, 3$; $\sum\limits_{g=1}^{w-1} a_{pwg} c_{p-1\,g} = \frac{1}{2} c_{pw}^2$, $w = 2, 3$, $\quad p = \overline{1, n}$.

В силу алгоритмической несимметричности метода (2.1)–(2.4) покомпонентное применение упрощающих предположений различно.

Необходимо отметить, что в рамках рассмотренного метода (2.1)–(2.4) нельзя построить расчетную схему четвертого порядка численного интегрирования системы (1.4) с вектором числа этапов $M = (3, \ldots, 3, 2, 2)$. Поэтому набор числа этапов $M(4) = (3, \ldots, 3, 2)$ является минимальным для метода (2.1)–(2.4) четвертого порядка.

По своим характеристикам полученные расчетные схемы (табл. 2 и 3) обладают явными преимуществами перед расчетными схемами формального метода Рунге–Кутта. Следует обратить внимание на два существенных момента, характеризующих рассматриваемый метод. Во-первых, доказанные утверждения (теоремы 1 и 2) демонстрируют зависимость порядка метода (2.1)–(2.4) от размерности системы (1.4). Во–вторых, метод (2.1)–(2.4) интегрирования систем (1.4) при интегрировании дифференциальных уравнений

$$y^{(n)} = f(x, y), \quad y^{(i)}(x_0) = y_0^{(i)}, \quad i = 0, 1, \ldots, n-1, \tag{2.8}$$

столь же эффективен, как и специальные прямые методы его интегрирования

$$k_i = hf\Big(x_0 + C_i h,\ \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(C_i h)^j}{j!} y_0^{(j)} + h^{n-1} \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} k_j\Big),$$

$$y^{(\nu)}(x_0 + h) \approx \sum_{j=0}^{n-1-\nu} \frac{h^j}{j!} y_0^{(j+\nu)} + h^{n-\nu-1} \sum_{i=1}^{m} B_{\nu i} k_i, \quad \nu = 0, \ldots, n-1, \tag{2.9}$$

$$C_1 = 0. \tag{2.10}$$

Каждому прямому методу (2.9), (2.10) соответствует табличное представление (табл. 4).

Таблица 4. m-этапный метод прямого интегрирования уравнения (2.8)

C_i	A_{ij}					B_{0i}	B_{1i}	$\ldots$	$B_{n-1\,i}$
C_1	0					B_{01}	B_{11}	$\ldots$	$B_{n-1\,1}$
C_2	A_{21}					B_{02}	B_{12}	$\ldots$	$B_{n-1\,2}$
$\ldots$	$\ldots\ldots$	$\ldots\ldots$	$\ldots$			$\ldots\ldots$	$\ldots\ldots$	$\ldots$	$\ldots\ldots$
C_m	A_{m1}	A_{m2}	$\ldots$	$A_{m,m-1}$	0	B_{0m}	B_{1m}	$\ldots$	$B_{n-1\,m}$

Например, приведение вычислительных схем (табл. 2 и 3) при $n = 2, 3$ разноэтапного метода (2.1)–(2.4) к экономичному и алгоритмически простому виду дает расчетные схемы (табл. 5 и 6) прямого интегрирования дифференциального уравнения (2.8) второго и третьего порядков соответственно.

Таблица 5. Метод третьего порядка

C_i	A_{ij}		B_{0i}	B_{1i}
$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	0		$\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{1}{2}$

Таблица 6. Метод четвертого порядка

C_i	A_{ij}		B_{0i}	B_{1i}	B_{2i}
$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	0		$\frac{1}{12} + \frac{\sqrt{3}}{24}$	$\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{12}$	0	$\frac{1}{12} - \frac{\sqrt{3}}{24}$	$\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{1}{2}$

Отметим, что явная двухэтапная расчетная схема третьего порядка (табл. 5) численного интегрирования $y'' = f(x, y)$ согласно классификации, используемой в ([2], гл. 2, § 13, с. 276; [5], гл. 1, § 3.2, с. 33), принадлежит типу Нюстрёма, но не может быть получена в рамках двухэтапного метода (2.9) в силу ограничения (2.10).

По своим характеристикам двухэтапная расчетная схема четвертого порядка (табл. 6) интегрирования уравнений $y''' = f(x, y)$ превосходит специальный метод Цурмюля ([5], гл. 1, § 3.4, с. 37), т. к. при том же порядке он требует трех вычислений правой части на шаге интегрирования.

Все вышесказанное, во-первых, заставляет по-новому взглянуть на общую схему метода (2.9), (2.10) интегрирования дифференциальных уравнений высшего порядка, т. к. здесь показано, что ограничение $C_1 = 0$ при $n = 2, 3$ существенно сужает его возможности; во–вторых, позволяет установить связь между методами интегрирования систем дифференциальных уравнений (1.4) и дифференциальных уравнений высшего порядка (2.8) (построены экономичные расчетные схемы табл. 5 и 6, являющиеся едиными для систем и дифференциальных уравнений при $n = 2, 3$).

Литература

1. Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырный П.И. *Вычислительные методы высшей математики.* Т. 2. – Минск: Вышэйш. школа, 1975. — 672 с.
2. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. *Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи.* – М.: Мир, 1990. – 512 с.

3. Hairer E. *Order conditions for numerical methods for partitioned ordinary differential equations* // Numer. Math. – 1981. – V. 36. – P. 431–445.
4. Олемской И.В. *Структурный подход в задаче конструирования явных одношаговых методов* // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 2003. – Т. 43. – № 7. – С. 961–974.
5. Коллатц Л. *Численные методы решения дифференциальных уравнений.* – М.: Ин. лит., 1953. – 460 с.

Санкт-Петербургский
государственный университет

Поступила
04.09.2003