УДК 517.93

О.Р.Слоньовський

ОДИН З ПРИНЦИПІВ ПОБУДОВИ ДРОБОВО-РАЦІОНАЛЬНИХ ЧИСЕЛЬНИХ МЕТОДІВ НА ПРИКЛАДІ МЕТОДУ ТРЕТЬОГО ПОРЯДКУ УЗГОДЖЕНОСТІ

Розглядаємо метод третього порядку точності для знаходження розв"язків системи диференціальних рівнянь такого типу:

$$y_1' = y_1(N_{10}^1 + N_{11}^1 y_1) + y_2(N_{20}^1 + N_{21}^1 y_1 + N_{22}^1 y_2) + \ldots + y_m(N_{m0}^1 + N_{m1}^1 y_1 + \ldots + N_{mm}^1 y_m),$$

$$y_2' = y_1(N_{10}^2 + N_{11}^2 y_1) + y_2(N_{20}^2 + N_{21}^2 y_1 + N_{22}^2 y_2) + \ldots + y_m(N_{m0}^2 + N_{m1}^2 y_1 + \ldots + N_{mm}^2 y_m),$$

$$\text{- - - - - - - - - - - - - - - - - - - -}$$

$$y_m' = y_1(N_{10}^m + N_{11}^m y_1) + y_2(N_{20}^m + N_{21}^m y_1 + N_{22}^m y_2) + \ldots + y_m(N_{m0}^m + N_{m1}^m y_1 + \ldots + N_{mm}^m y_m);$$

$$y_1(0) = y_{10}, \tag{I}$$

$$\text{- - - - - -}$$

$$y_m(0) = y_{m0}$$

на відрізку $[0, X_K]$.

Розіб"ємо вказаний відрізок на елементарні частини $[X_n, X_{n+1}]$, $n = 0, 1, \ldots, N$. Розв"язок системи (I) у сітковому вузлі X_{n+1} шукаємо з допомогою раціонального виразу

$$\bar{y}_{n+1} = \frac{\bar{B}_0 + h\bar{B}_1 + h^2\bar{B}_2}{C_0 + hC_1 + h^2 C_2}, \tag{2}$$

де $\bar{y}_{n+1}$ – вектор отриманих значень функцій у точці X_{n+1}; $\bar{B}_0, \bar{B}_1, \bar{B}_2$ – m - мірні вектори; C_0, C_1, C_2 – $m \times m$ - мірні матриці; h – крок інтегрування функції ($h = X_{n+1} - X_n$).

Розрахункові формули для $\bar{B}_0$, $\bar{B}_1$ і $\bar{B}_2$ отримаємо таким чином.

Вираз (2) переписуємо у вигляді

$$(C_0 + hC_1 + h^2 C_2)\bar{y}_{n+1} = \bar{B}_0 + h\bar{B}_1 + h^2\bar{B}_2. \tag{3}$$

Приймаємо $h = 0$. Тоді

$$\bar{B}_0 = C_0 \bar{y}_n. \tag{4}$$

Продиференціювавши по h вираз (3) і прийнявши $h=0$, отримуємо

$$\bar{B}_1 = C_0\bar{y}_n' + C_1\bar{y}_n . \tag{5}$$

Двічі продиференціювавши по h вираз (3), при $h=0$ записуємо

$$\bar{B}_2 = \frac{C_0\bar{y}_n''}{2} + C_1\bar{y}_n' + C_2\bar{y}_n . \tag{6}$$

Підставивши (4), (5) і (6) у (2) маємо

$$\bar{y}_{n+1} = \frac{C_0\bar{y}_n + h(C_0\bar{y}_n' + C_1\bar{y}_n) + h^2(\frac{1}{2}C_0\bar{y}_n'' + C_1\bar{y}_n' + C_2\bar{y}_n)}{C_0 + hC_1 + h^2C_2} . \tag{7}$$

Матрицю C_0 для простоти задаємо одиничною, тобто $C_0=E$.

Для розрахунку матриць C_1 і C_2 введемо матрицю D, яка задовольняє умову

$$\bar{y}'' = -D\bar{y}' \tag{8}$$

Матрицю C_1 знаходимо за формулою

$$C_1 = \frac{2}{3}D , \tag{9}$$

що забезпечує L-стійкість методу (стійкість розглядається далі).

Для виведення формули, щоб знайти матрицю C_2, поділимо чисельник на знаменник у (7)

$$\bar{y}_{n+1} = \bar{y}_n + h\bar{y}_n' + \frac{h^2}{2}\bar{y}_n'' + h^3\left(-C_2\bar{y}_n' - \frac{C_1\bar{y}_n''}{2}\right) + O(h^4). \tag{10}$$

Отже, щоб досягався третій порядок точності, необхідно, щоб виконувалась рівність

$$-C_2\bar{y}_n' - \frac{C_1\bar{y}_n''}{2} = \frac{\bar{y}_n'''}{6} , \tag{11}$$

де

$$\frac{\bar{y}_n'''}{6} = \frac{(\bar{y}'')'}{6} = \frac{(-D\bar{y}_n')'}{6} = \frac{(-D' + D^2)}{6}\bar{y}_n' ; \tag{12}$$

$$-C_2\bar{y}_n' - \frac{C_1}{2}\bar{y}_n'' = \left(-C_2 + \frac{D^2}{3}\right)\bar{y}_n' . \tag{13}$$

З (II), (I2) і (I3) отримуємо

$$C_2 = \frac{1}{6}(D^2 + D'). \qquad (14)$$

Провівши нескладні перетворення над (7), записуємо остаточну формулу

$$\bar{y}_{n+1} = \bar{y}_n + \frac{\bar{K}_2 + hC_1\bar{K}_1}{E + hC_1 + h^2C_2}. \qquad (15)$$

де $\bar{K}_1 = h\bar{y}'_n$; $\bar{K}_2 = \frac{h^2\bar{y}''_n}{2} + h\bar{y}'_n$.

Вектор $\bar{K}_2$ знаходимо за формулою

$$\bar{K}_2 = (E - \frac{h}{2}D)\bar{K}_1. \qquad (16)$$

Для доведення стійкості методу розглянемо модельну систему $\bar{y}' = -A\bar{y}$; $\bar{y}'' = -A\bar{y}' = A^2\bar{y}$; $\bar{y}''' = A^2\bar{y}' = -A^3\bar{y}$, (17)
приймаючи, що матриця A -додатно визначена.

Звідси випливає

$$C_1 = \frac{2}{3}A \; ; \; C_2 = \frac{A^2}{6}. \qquad (18)$$

Підставимо (17) і (18) в (7)

$$\bar{y}_{n+1} = \frac{\bar{y}_n + h(-A + \frac{2}{3}A)\bar{y}_n + h^2(\frac{A^2}{2} - \frac{2}{3}A^2 + \frac{A^2}{6})\bar{y}_n}{E + \frac{2}{3}hA + \frac{h^2}{6}A^2} = \frac{E - \frac{h}{3}A}{E + \frac{2}{3}hA + \frac{h^2}{6}A^2}\bar{y}_n. \qquad (19)$$

Звідси очевидно, що даний метод L -стійкий. Знаходження наближеного розв"язку проводили за схемою Рунге.

I. При заданому h визначають $\bar{y}_{n+1/h}$.

2. Шукають $\bar{y}_{n+\frac{1}{2}/\frac{h}{2}}$ і $\bar{y}_{n+1/\frac{h}{2}}$ при половинному кроці.

3. Перевіряють умову $|\bar{y}_{n+1/h} - \bar{y}_{n+1/\frac{h}{2}}| < \varepsilon$, (20)

4. При виконанні умови (20) приймають $n = n+1$ за формулою

$$h_н = \alpha h_c \sqrt[4]{\frac{\varepsilon}{\Delta n}}, \qquad (21)$$

де $h_н$ - нове значення кроку; h_c - значення попереднього кроку; $\Delta_n = \max_i |y_{in/h} - y_{in/\frac{h}{2}}|$; ε - задана точність; знаходять новий крок і перехід на I.

5. При невиконанні умови (20) приймають $h_н = \frac{h_c}{2}$ і перехід на 2.

Обчислення продовжують доти, доки аргумент не пройде весь заданий відрізок $[0, X_к]$.

Проведено експериментальні дослідження алгоритму на ряді тестових прикладів. Результати експерименту засвідчили достатню ефективність алгоритму.

За вихідну брали системи рівнянь, які описують процеси задач хімічної кінетики з реакціями першого і другого порядків.