Вычислительные технологии **Том 9, № 2, 2004**

МЕТОДЫ ТИПА РУНГЕ — КУТТЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ СИСТЕМ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

И. В. Олемской
Санкт-Петербургский государственный университет, Россия
e-mail: OLIV@pobox.spbu.ru

An explicit one-step method for the numerical integration of a special type of ordinary differential equations is considered. Some statements on the relation between the order of method and the number of stages are proved. Economical numerical schemes up to the fourth order of accuracy are constructed for the integration of systems and equations of the second order.

Введение

При решении задачи Коши

$$\frac{dy_i}{dx} = f_i(x, y_1, \ldots, y_n), \quad i = 1, \ldots, n; \tag{1}$$

$$y_i(X_0) = y_{i\,0}, \quad i = 1, \ldots, n; \tag{2}$$

$$x \in [X_0, X_1] \subset R, \quad y_i : [X_0, X_1] \longrightarrow R, \quad i = 1, \ldots, n;$$

$$f_i : [X_0, X_1] \times R^n \longrightarrow R, \quad i = 1, \ldots, n,$$

общая схема явного метода Рунге — Кутты [1–3] численного интегрирования системы (1) имеет вид

$$y_i(x+h) \approx z_i = y_i(x) + \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij} k_{ij}(h), \quad i = 1, \ldots, n, \tag{3}$$

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

$$k_{ij}(h) = hf_i(x + c_{ij}h, y_1(x) + \sum_{p=1}^{j-1} a_{ij1p} k_{1p}, \ldots, y_n(x) + \sum_{p=1}^{j-1} a_{ijnp} k_{np}), \tag{4}$$

$$c_{i1} = 0, \quad a_{i1s0} = 0, \quad s = 1, \ldots, n.$$

Здесь m_i — число этапов и q_i — порядок точности 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 $M = (m_1, \ldots, m_n)$ и порядка точности $Q = (q_1, \ldots, q_n)$, 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 точности метода* (3), (4) при векторе порядка точности $Q = (q_1, \ldots, q_n)$ будем понимать $q = \min\{q_1, \ldots, q_n\}$.

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 точности* $Q = (q_1, \ldots, q_n)$. *Будем называть такой вектор числа этапов минимальным и обозначать* $M(Q) = (m_1(q_1), \ldots, m_n(q_n))$, *если для любой* $M = (m_1, \ldots, m_n)$*-этапной расчетной схемы с вектором порядка точности* $Q = (q_1, \ldots, q_n)$ *этого же метода справедливы неравенства* $m_i \geq m_i(q_i)$, $i = 1, \ldots, n$.

В скалярном случае минимальное число этапов метода порядка точности q будем обозначать $m(q)$. При построении расчетных схем [1–4] в рамках метода (3), (4) традиционно в силу равноправности уравнений системы параметры метода полагают не зависящими от номера компоненты i и s:

$$b_j \equiv b_{ij}, \quad c_j \equiv c_{ij}, \quad a_{jp} \equiv a_{ijsp}, \quad m \equiv m_i.$$

Такой способ распространения метода интегрирования (3), (4) уравнений на системы, безусловно, 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 точности метода q и числа этапов m, справедливые для скалярного случая, верны и для векторного. Такой способ распространения и методы, построенные с его использованием, будем называть *формальными,* причем известно [4], что для явного метода Рунге — Кутты q-го порядка точности численного интегрирования дифференциального уравнения минимальное число этапов удовлетворяет равенствам

$$m(q) = q, \quad q \leq 4, \quad m(5) = 6. \tag{5}$$

Заметим, что равенства (5) справедливы не только для формального метода интегрирования системы (1), но и для общей схемы метода (3), (4).

Известная теория условий порядка для скалярных уравнений была обобщена Хайрером [5, 6] на случай разделяющихся систем вида

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dy_1}{dx} & = & f_1(y_1, y_2), \\ \dfrac{dy_2}{dx} & = & f_2(y_1, y_2) \end{array} \right. \tag{6}$$

для неявного одношагового метода интегрирования

$$y_i(x+h) \approx y_i(x) + \sum_{j=1}^{m} b_{ij} k_{ij}, \quad i = 1, 2, \tag{7}$$

$$k_{ij} = hf_i(y_1(x) + \sum_{p=1}^{m} a_{j1p} k_{1p}, y_2(x) + \sum_{p=1}^{m} a_{j2p} k_{2p}),\ i = 1, 2, \quad j = 1, \ldots, m.$$

Параметры метода интегрирования (7) разделяющихся систем зависят от номера компоненты решения s, но все они одинаковы для всех компонент i правой части:

$$b_{ij} \equiv b_{ij}, \quad c_j \equiv c_{ij}, \quad a_{jsp} \equiv a_{ijsp}, \quad m \equiv m_i.$$

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). Одношаговые методы, не обладающие этим свойством, будем классифицировать как *структурные.*

В [7, 8] выделен класс систем обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dy_0}{dx} = f_0(x, y_0, y_1, \ldots, y_n); \tag{8}$$

$$\frac{dy_i}{dx} = f_i(x, y_0, \ldots, y_{i-1}, y_{g+1}; \ldots, y_n),\ i = 1, \ldots, g, \tag{9}$$

$$\frac{dy_j}{dx} = f_j(x, y_0, \ldots, y_{j-1}),\ j = g+1, \ldots, n, \tag{10}$$

где y_s, f_s — функции размерности r_s. Две группы уравнений (9), (10) структурно тождественны. Каждое уравнение одной из групп уравнений (9), (10) занимает определенное место в последовательности уравнений своей группы. Его правая часть не зависит от искомых функций, поведение которых описывается этим и всеми последующими уравнениями этой же группы. Группа уравнений (8), в которую вошли все уравнения, не имеющие структурных особенностей указанного выше типа, называется *общей.* Она, как и группа уравнений (9), может отсутствовать.

Наличие структурных особенностей в рамках общей схемы метода (3), (4) не нарушает соотношений (5). Причина этого в том, что учет специфики связей в правой части интегрируемой системы происходит только на уровне исследования условий порядка.

Для численного интегрирования систем (8)–(10) в [7, 8] предложен явный одношаговый структурный метод. В отличие от метода (3), (4) его вычислительная схема использует структурные особенности на уровне алгоритма:

$$y_s(x+h) \approx y_s(x) + \sum_{j=1}^{m_s} b_{sj} k_{sj}(h), \quad s = 0, \ldots, n, \tag{11}$$

причем функции $k_{sj} \equiv k_{sj}(h)$ из соображений явности схемы вычисляются в строгой последовательности

$$k_{01}, k_{11}, \ldots, k_{n1}, k_{02}, \ldots; \tag{12}$$

$$k_{sj}(h) = hf_s(X_{sj}, Y_{sj0}, Y_{sj1}, \ldots, Y_{sjn}); \quad s = 0, \ldots, n, \tag{13}$$

где

$$X_{sj} = x + c_{sj}h; \quad c_{s1} = \begin{cases} 0, & \text{если} \quad s \le g, \\ > 0, & \text{если} \quad s > g; \end{cases}$$

$$Y_{sjd} = \begin{cases} y_d(x), & \text{если} \quad j = 1 \text{ и } s \le g, \\ y_d(x) + \sum\limits_{p=1}^{j-1} a_{sjdp}k_{dp}(h), & \text{если} \quad j > 1 \text{ и } s \le d, \\ y_d(x) + \sum\limits_{p=1}^{j} a_{sjdp}k_{dp}(h), & \text{если} \quad j = 1 \text{ и } s > g \text{ или } \; j > 1 \text{ и } s > d. \end{cases} \tag{14}$$

Принципиальное отличие структурного метода от общей схемы (3), (4) заключается в том, что вся информация о значениях $k_{sj}(h)$, полученная на j-м этапе, по мере возможности сразу используется в вычислительном процессе.

Благодаря этому обстоятельству компоненты минимального вектора числа этапов $M(Q)$ структурного метода Q-го порядка численного интегрирования системы (8)–(10) удовлетворяют равенствам [8]

$$m_0(q_0) = q_0, \quad m_i(q_i) = q_i - 1, \quad i = 1, \ldots, n, \quad q_s = 3, 4, \quad s = 0, \ldots, n.$$

Отсутствие общей группы уравнений (8) ($r_0 = 0$) в рассматриваемой системе может еще больше повысить эффективность метода (11)–(14). Так, например, в [9–11] для систем

$$\begin{cases} \dfrac{dy_1}{dx} = f_1(x, y_2), \\ \dfrac{dy_2}{dx} = f_2(x, y_1) \end{cases} \tag{15}$$

(y_i, f_i — функции размерности r_i, $i = 1, 2$) рассмотрен следующий частный случай структурного метода (11)–(14). Приближенное решение ищем в виде

$$y_i(x + h) \approx z_i = y_i(x) + \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij}k_{ij}(h), \quad i = 1, 2, \quad m_1 \ge m_2, \tag{16}$$

где функции $k_{ij} \equiv k_{ij}(h)$ вычисляем в строгой последовательности

$$k_{11}, k_{21}, k_{12}, k_{22}, \ldots \tag{17}$$

по схеме

$$k_{1j} = \begin{cases} hf_1(x, y_2(x)), & j = 1, \\ hf_1(x + c_{1j}h, y_2(x) + \sum\limits_{\eta=1}^{j-1} a_{1j\eta}k_{2\eta}), & j > 1; \end{cases} \tag{18}$$

$$k_{2j} = hf_2(x + c_{2j}h, y_1(x) + \sum_{\eta=1}^{j} a_{2j\eta}k_{1\eta}), \; c_{21} \ne 0, \tag{19}$$

и в его рамках построены [11] четырехэтапные расчетные схемы пятого порядка, которые на треть экономичнее формального метода Рунге — Кутты.

Таблица 1

$M = (m_1, m_2)$-этапный структурный метод (16)–(19) интегрирования системы (15)

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
c_{12} & a_{121} & & & \\
\dots & \dots & \dots & & \\
c_{1m_1} & a_{1m_11} & \dots & a_{1m_1m_1-1} & \\
\hline
 & b_{11} & \dots & b_{1m_1-1} & b_{1m_1}
\end{array}
\qquad\qquad
\begin{array}{c|ccc}
c_{21} & a_{211} & & \\
\dots & \dots & \dots & \\
c_{2m_2} & a_{2m_21} & \dots & a_{2m_2m_2} \\
\hline
 & b_{21} & \dots & b_{2m_2}
\end{array}
$$

Таблица 2

Четырехэтапный метод пятого порядка

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & a_{1ij} \\
\frac{4\mp\sqrt{6}}{15} & \frac{4\mp\sqrt{6}}{15} & & & \\
\frac{4\mp\sqrt{6}}{8} & \frac{36\mp9\sqrt{6}}{128} & \frac{28\mp7\sqrt{6}}{128} & & \\
\frac{14\pm\sqrt{6}}{20} & \frac{9954\mp4419\sqrt{6}}{18800} & \frac{26556\pm9809\sqrt{6}}{112800} & \frac{-1464\pm4469\sqrt{6}}{22560} & \\
\hline
c_{1j}/b_{1j} & \frac{328\pm77\sqrt{6}}{1140} & \frac{-1188\mp2457\sqrt{6}}{5348} & \frac{2432\pm448\sqrt{6}}{2415} & \frac{-18184\pm51676\sqrt{6}}{250401}
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{c|cccc}
\frac{4\mp\sqrt{6}}{30} & \frac{4\mp\sqrt{6}}{30} & & & a_{2ij} \\
\frac{4\mp\sqrt{6}}{10} & \frac{4\mp\sqrt{6}}{40} & \frac{12\mp3\sqrt{6}}{40} & & \\
\frac{4\pm\sqrt{6}}{10} & \frac{5348\pm1947\sqrt{6}}{5000} & \frac{-18204\mp7581\sqrt{6}}{7000} & \frac{8448\pm3472\sqrt{6}}{4375} & \\
1 & \frac{-206\mp83\sqrt{6}}{76} & \frac{40614\pm11721\sqrt{6}}{5348} & \frac{-504\mp272\sqrt{6}}{161} & \frac{-62874\pm49236\sqrt{6}}{83467} \\
\hline
c_{2j}/b_{2j} & 0 & \frac{16\mp\sqrt{6}}{36} & \frac{16\pm\sqrt{6}}{36} & \frac{1}{9}
\end{array}
$$

С использованием таблиц Батчера [4, 5] по каждой компоненте метод (16)–(19) можно представить в компактной форме (табл. 1).

Так, полученная в [11] в рамках метода (16)–(19) четырехэтапная расчетная схема пятого порядка имеет табличное представление (табл. 2).

Известно [5], что формальный метод Рунге — Кутты при интегрировании дифференциальных уравнений второго порядка

$$y'' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = y_0' \tag{20}$$

уступает по своим характеристикам методу Нюстрема (прямому методу Рунге — Кутты):

$$y^{(\nu)}(x+h) \approx Z_\nu = \sum_{j=0}^{1-\nu} \frac{h^j}{j!} y^{(j+\nu)}(x) + h^{1-\nu} \sum_{i=1}^{m} B_{\nu i} k_i, \quad \nu = 0, 1, \tag{21}$$

$$k_i = hf(x + C_i h, y(x) + C_i h y_0' + h \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} k_j), \quad C_1 = 0.$$

Для компактной записи явного m-этапного метода Нюстрема используется [5, 12] табличное представление (табл. 3). После приведения структурного метода (16)–(19) к виду экономичному и алгоритмически простому для непосредственного интегрирования дифференциальных уравнений (20) его расчетная схема примет вид

$$
\begin{aligned}
&y(x+h) \approx Z_0 = y(x) + hy^{'}(x) + h\sum_{i=1}^{m_1-1} B_{0i}k_i,\\
&y^{'}(x+h) \approx Z_1 = y^{'}(x) + \sum_{i=1}^{m_2} B_{1i}k_i,\\
&k_{2i} \equiv k_i = hf\big(x + C_ih, y(x) + C_ihy'(x) + h\sum_{j=1}^{i-1} A_{ij}k_j\big),\\
&B_{0i} = \sum_{j=i+1}^{m_1} b_{1j}a_{1ji}, \quad B_{1i} = b_{2i}, \quad A_{ij} = \sum_{t=j+1}^{i} a_{2it}a_{1tj}, \quad C_i = c_{2i}.
\end{aligned} \tag{22}
$$

Так, метод пятого порядка (см. табл. 2), приведенный к виду (22) для прямого интегрирования уравнения (20), имеет вид, представленный в табл. 4.

Надо отметить, что, во-первых, упомянутый выше (см. табл. 4) метод согласно классификации в [5] принадлежит классу методов Нюстрема, причем по своим характеристикам (числу этапов и порядку точности) он совпадает с лучшими известными; во-вторых, рассматриваемый подход дает ответ на вопросы, какие особенности должна иметь интегрируемая система и каким образом их должен использовать метод, чтобы при применении метода к дифференциальному уравнению $y^{''}(x) = f(x, y(x))$ он не уступал методу Нюстрема?

Цель данной работы — дальнейшее исследование возможностей метода (16)–(19) интегрирования системы (15) (при $m_1 = 4,\ m_2 = 3$). Заметим,что в рамках трехэтапного метода (16)–(19) в [8] получены схемы четвертого порядка точности, а в [11] — для четырехэтапного (см. табл. 2) — пятого. С одной стороны (чисто формальной), необходимо ответить на

Т а б л и ц а 3

m-этапный метод Нюстрема

C_i	A_{ij}					B_{0j}	B_{1j}
C_1	0					B_{01}	B_{11}
C_2	A_{21}					B_{02}	B_{12}
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$		
C_m	A_{m1}	A_{m2}	$\dots$	$A_{m\,m-1}$	0	B_{0m}	B_{1m}

Т а б л и ц а 4

Метод пятого порядка

C_i	A_{ij}			B_{0j}	B_{1j}
$\frac{4\mp\sqrt{6}}{30}$	0			0	0
$\frac{4\mp\sqrt{6}}{10}$	$\frac{11\mp4\sqrt{6}}{100}$			$\frac{9\pm\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16\mp\sqrt{6}}{36}$
$\frac{4\pm\sqrt{6}}{10}$	$-\frac{13\pm7\sqrt{6}}{250}$	$\frac{81\pm34\sqrt{6}}{500}$		$\frac{9\mp\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16\pm\sqrt{6}}{36}$
1	$-\frac{4\pm5\sqrt{6}}{16}$	$\mp\frac{\sqrt{6}}{8}$	$\frac{12\mp3\sqrt{6}}{16}$	0	$\frac{1}{9}$

вопросы: каким образом увеличение числа этапов по первой компоненте повлияет на характеристики метода? Удастся ли повысить порядок точности хотя бы по первой компоненте на единицу? С другой стороны, при практическом интегрировании систем (15) довольно часто возникают ситуации неравнозначности трудозатрат при вычислении правых частей f_i, $i = 1, 2$. В этом случае вполне оправдана попытка улучшения характеристик метода за счет дополнительного вычисления правой части, требующей меньшего количества арифметических операций, так как затраты на вычисление правых частей (относительные) в этом случае возрастут ненамного, а выгода очевидна.

И, наконец, с точки зрения здравого смысла в схеме (22) при вычислении приближенного значения искомой функции и ее производной естественно использовать одинаковое число $k_{2i}(h)$, что означает выполнение равенства $m_2 = m_1 - 1$. А это еще один аргумент в пользу рассмотрения разноэтапных методов.

1. Разноэтапный метод четвертого порядка

Теорема 1. *В рамках структурного метода (16)–(19) при* $M = (m_1, m_2) = (4, 3)$ *численного интегрирования системы (15) не существует расчетной схемы порядка точности* $Q = (q_1, q_2) = (5, 4)$.

Доказательство. Выпишем условия порядка, потребовав, чтобы разложение локальной погрешности

$$\Psi_i(h) = y_i(x+h) - y_i(x) - \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij} k_{ij}(h), \quad i = 1, 2,$$

метода (16)–(19) по степеням h начиналось с шестой степени при числе этапов $m_1 = 4$, $m_2 = 3$. Условия порядка метода (16)–(19) в этом случае с использованием упрощающих предположений

$$\sum_{j=1}^{q} a_{sqj} = c_{sq},\ s = 1, 2; \quad c_{11} = 0, \quad a_{1qq} = 0,\ q = 1, \ldots, 4,$$

образуют систему тридцати одного нелинейного алгебраического уравнения с двадцатью пятью неизвестными b_{ij}, c_{ij}, a_{ijs} вида

$$\sum_{q=1}^{m_s} b_{sq} = 1, \quad (s, v) = \{(1, 2), (2, 1)\}; \tag{23}$$

$$\sum_{q=1}^{m_s} b_{sq} c_{sq} = \frac{1}{2}; \tag{24}$$

$$\sum_{q=1}^{m_s} b_{sq} c_{sq}^2 = \frac{1}{3}; \tag{25}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} \sum_{j=1}^{q} a_{sqj} c_{vj} = \frac{1}{6}; \tag{26}$$

$$\sum_{q=1}^{m_s} b_{sq} c_{sq}^3 = \frac{1}{4}; \tag{27}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} c_{sq} \sum_{j=1}^{q} a_{sqj} c_{vj} = \frac{1}{8}; \tag{28}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} \sum_{j=1}^{q} a_{sqj} c_{vj}^2 = \frac{1}{12}; \tag{29}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} \sum_{j=2}^{q} a_{sqj} \sum_{t=1}^{j} a_{vjt} c_{st} = \frac{1}{24}; \tag{30}$$

$$\sum_{q=1}^{m_s} b_{sq} c_{sq}^4 = \frac{1}{5}; \tag{31}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} c_{sq}^2 \sum_{j=1}^{q} a_{sqj} c_{vj} = \frac{1}{10}; \tag{32}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} c_{sq} \sum_{j=1}^{q} a_{sqj} c_{vj}^2 = \frac{1}{15}; \tag{33}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} c_{sq} \sum_{j=2}^{q} a_{sqj} \sum_{t=1}^{j} a_{vjt} c_{st} = \frac{1}{30}; \tag{34}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} \left(\sum_{j=1}^{q} a_{sqj} c_{vj} \right)^2 = \frac{1}{20}; \tag{35}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} \sum_{j=1}^{q} a_{sqj} c_{vj}^3 = \frac{1}{20}; \tag{36}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} \sum_{j=2}^{q} a_{sqj} c_{vj} \sum_{t=1}^{j} a_{vjt} c_{st} = \frac{1}{40}; \tag{37}$$

$$\sum_{q=2}^{m_s} b_{sq} \sum_{j=2}^{q} a_{sqj} \sum_{t=1}^{j} a_{vjt} c_{st}^2 = \frac{1}{60}; \tag{38}$$

$$\sum_{q=3}^{m_s} b_{sq} \sum_{j=2}^{q} a_{sqj} \sum_{t=2}^{j} a_{vjt} \sum_{p=1}^{t} a_{stp} c_{vp} = \frac{1}{120}; \tag{39}$$

$$\sum_{j=1}^{i} a_{sij} = c_{si}; \quad i = 1, \ldots, 4. \tag{40}$$

Такая компактная запись условий порядка вынуждает при ссылке на некоторое равенство этой системы в случае, если нас интересует один из двух вариантов, дополнять его номер через точку с запятой значением параметра s. Например, ссылка $(27;2)$ подразумевает равенство (27) при значениях пары $(s,v) = (2,1)$, а $(27;1)$ — равенство (27) при значениях пары $(s,v) = (1,2)$.

Для доказательства теоремы необходимо показать, что исходная система нелинейных алгебраических уравнений (23)–(30), $(31;1)$–$(39;1)$, (40) противоречива. Допустим, что система совместна при выполнении условия

$$c_{22}c_{23}(c_{22}-c_{23})(c_{22}-c_{21})(c_{23}-c_{21}) \neq 0. \tag{41}$$

Преобразуя уравнения (26; 1), (29; 1) с помощью соотношений (24; 1), (40; 1), получим равенства

$$b_{13}a_{132}+b_{14}a_{142} = -\frac{1-2(c_{21}+c_{23})+6c_{21}c_{23}}{12(c_{23}-c_{22})(c_{22}-c_{21})}; \tag{42}$$

$$b_{14}a_{143} = \frac{1-2(c_{21}+c_{22})+6c_{21}c_{22}}{12(c_{23}-c_{21})(c_{23}-c_{22})}. \tag{43}$$

С другой стороны, из рассмотрения уравнений (23; 2)–(25; 2), (27; 2) имеем

$$b_{22}(1-c_{22}) = -\frac{1-2(c_{21}+c_{23})+6c_{21}c_{23}}{12(c_{23}-c_{22})(c_{22}-c_{21})}; \tag{44}$$

$$b_{23}(1-c_{23}) = \frac{1-2(c_{21}+c_{22})+6c_{21}c_{22}}{12(c_{23}-c_{21})(c_{23}-c_{22})}. \tag{45}$$

Сравнение равенств (42)–(45) с учетом (26; 1) приводит к соотношениям

$$\begin{aligned} &b_{12}a_{121}+b_{13}a_{131}+b_{14}a_{141} = b_{21}(1-c_{21}),\\ &b_{13}a_{132}+b_{14}a_{142} = b_{22}(1-c_{22}),\\ &b_{14}a_{143} = b_{23}(1-c_{23}), \end{aligned} \tag{46}$$

которые в теории условий порядка [4, 5] известны как *упрощающие*.

Дальнейшее рассмотрение системы, в частности преобразование соотношений (36; 1), (27; 2) с учетом (46)

$$\sum_{i=2}^{4} b_{1i}\sum_{j=1}^{i-1} a_{1ij}c_{2j}^3 = \sum_{j=1}^{3} c_{2j}^3 \sum_{i=j+1}^{4} b_{1i}a_{1ij} = \sum_{j=1}^{3} c_{2j}^3 b_{2j}(1-c_{2j}) = \frac{1}{4} - \sum_{j=1}^{3} b_{2j}c_{2j}^4 = \frac{1}{20}$$

приводит к равенству

$$b_{21}c_{21}^4 + b_{22}c_{22}^4 + b_{23}c_{23}^4 = \frac{1}{5}. \tag{47}$$

Аналогично из соотношений (37; 1), (28; 2), (46) следует ограничение

$$b_{22}c_{22}^2a_{222}c_{12} + b_{23}c_{23}^2(a_{232}c_{12}+a_{233}c_{13}) = \frac{1}{10}. \tag{48}$$

Уравнения (26; 2), (28; 2), (48) непротиворечивы, если параметры метода удовлетворяют соотношению

$$\frac{1}{3}c_{22}c_{23} - \frac{1}{4}(c_{22}+c_{23}) + \frac{1}{5} = 0. \tag{49}$$

В то же время при выполнении ограничения (49) для совместности уравнений (23; 2)–(25; 2), (27; 2), (47) требуется выполнение равенств

$$c_{22}c_{23} - \frac{1}{2}(c_{22}+c_{23}) + \frac{1}{3} = 0; \tag{50}$$

$$\frac{1}{2}c_{22}c_{23} - \frac{1}{3}(c_{22}+c_{23}) + \frac{1}{4} = 0. \tag{51}$$

Но это невозможно, так как система уравнений (49)–(51) противоречива.

Это и доказывает несовместность исходной системы (23)–(30), (31; 1)–(39; 1), (40), а значит, и утверждение теоремы.

Осталось показать справедливость утверждения теоремы в случае невыполнения неравенства (41).

Предположим, что рассматриваемая система (23)–(30), (31; 1)–(39; 1), (40) непротиворечива при $c_{23} = 0$. С учетом того, что $c_{21} \neq 0$, $b_{23} \neq 0$, $b_{14} \neq 0$, $c_{12} \neq 0$, равенство (28; 2) примет вид

$$b_{22}c_{22}a_{222}c_{12} = \frac{1}{8}. \tag{52}$$

Уравнения (24; 2), (25; 2), (27; 2), (26; 1), (29; 1), (36; 1) совместны при

$$c_{21} = \frac{3}{5} \mp \frac{\sqrt{6}}{10}, \quad c_{22} = \frac{3}{5} \pm \frac{\sqrt{6}}{10}. \tag{53}$$

Рассмотрение на непротиворечивость уравнений системы (30; 1), (37; 1) и (26; 2) (с учетом (28; 2)) приводит к ограничению

$$b_{14}a_{143} = b_{23}\frac{5c_{22} - 3}{20c_{22} - 15}, \tag{54}$$

а уравнений (30; 1), (38; 1), (26; 2), (29; 2) — к соотношению

$$b_{14}a_{143} = b_{23}\frac{5c_{12} - 2}{20c_{12} - 10}. \tag{55}$$

Очевидно, что последние два равенства (54), (55) справедливы при условии

$$c_{12} = \frac{2}{3}c_{22}. \tag{56}$$

С учетом того, что $c_{12} \neq 0$, соотношения (24; 1), (25; 1), (27; 1), (31; 1), (53), (56) могут быть непротиворечивы только при выполнении неравенства

$$c_{13}c_{14}(c_{13} - c_{14})(c_{12} - c_{14})(c_{12} - c_{13}) \neq 0. \tag{57}$$

Полагаем, что это так. Тогда одно из условий совместности уравнений (25; 1)–(28; 1), (31; 1), (32; 1) имеет вид

$$c_{12} = 2c_{21}. \tag{58}$$

Но соотношения (53), (56), (58) противоречивы. Это и доказывает утверждение теоремы при $c_{23} = 0$.

Совершенно аналогично можно показать справедливость утверждения теоремы и при выполнении любого из нерассмотренных случаев: $c_{22} = 0$, $c_{21} = c_{22}$, $c_{21} = c_{23}$, $c_{22} = c_{23}$.

Таким образом, в силу доказанного утверждения теоремы увеличение количества вычислений первой правой части f_1 на единицу не позволяет повысить также порядок точности по первой компоненте на единицу.

Какие все-таки преимущества можно извлечь из четвертого вычисления правой части первого уравнения исходной системы? Покажем, что дополнительное вычисление правой части позволяет построить экономичный метод четвертого порядка точности с контролем погрешности на шаге интегрирования.

2. Вложенные разноэтапные методы

Для записи вложенных методов используем уже устоявшуюся [4, 5] терминологию и их табличное представление, несколько видоизменив их (см. табл. 5).

Параметры $M = (m_1, m_2)$-этапного структурного вложенного метода (16)–(19) с точностной характеристикой $P[Q] = (p_1, p_2)[(q_1, q_2)]$ интегрирования системы (15) должны обеспечивать для величин

$$z_1 = y_1(x) + \sum_{i=1}^{m_1} b_{1i} k_{1i}, \quad z_2 = y_2(x) + \sum_{i=1}^{m_2} b_{2i} k_{2i}$$

порядки точности p_1 и p_2 (приближений к решению)

$$y_1(x+h) - z_1 = O(h^{p_1+1}), \quad y_2(x+h) - z_2 = O(h^{p_2+1}),$$

а для (“оценщиков” погрешности)

$$\bar{z}_1 = y_1(x) + \sum_{i=1}^{m_1} \bar{b}_{1i} k_{1i}, \quad \bar{z}_2 = y_2(x) + \sum_{i=1}^{m_2} \bar{b}_{2i} k_{2i}$$

— q_1 и q_2, соответственно

$$y_1(x+h) - \bar{z}_1 = O(h^{q_1+1}), \quad y_2(x+h) - \bar{z}_2 = O(h^{q_2+1}).$$

Здесь в рамках структурного подхода (16)–(19) с числом этапов $M = (4, 3)$ для интегрирования системы (15) строим вложенный метод с точностной характеристикой $P[Q] = (4, 4)[(3, 2)]$, т.е. основной метод имеет четвертый порядок точности, а “оценщик” по первой компоненте — третий, а по второй — второй. Используя упрощающие предположения

$$\sum_{j=i+1}^{m_1} b_{1j} a_{1ji} = b_{2i}\left(1 - c_{2i}\right), \quad i = 1, \ldots, m_2, \quad \sum_{j=1}^{q-1} a_{1qj} c_{2j} = \frac{1}{2} c_{1q}^2,$$

выпишем условия порядка, которым должны удовлетворять параметры вложенного мето-

Т а б л и ц а 5

$M = (m_1, m_2)$-этапный вложенный $P[Q] = (p_1, p_2)[(q_1, q_2)]$
метод (16)–(19) интегрирования системы (15)

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
c_{12} & a_{121} & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\
c_{1m_1} & a_{1,m_1,1} & \cdots & a_{1,m_1,m_1-1} & \\
\hline
z_1 & b_{11} & \cdots & b_{1,m_1-1} & b_{1,m_1} \\
\bar{z}_1 & \bar{b}_{11} & \cdots & \bar{b}_{1m_1-1} & \bar{b}_{1m_1}
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|ccc}
c_{21} & a_{211} & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & \\
c_{2m_2} & a_{2m_21} & \cdots & a_{2m_2m_2} \\
\hline
z_2 & b_{21} & \cdots & b_{2m_2} \\
\bar{z}_2 & \bar{b}_{21} & \cdots & \bar{b}_{2m_2}
\end{array}$$

да (см. табл. 5) с такими характеристиками:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{4} b_{1i} = 1,\\
&\sum_{i=2}^{4} b_{1i}c_{1i}^{j} = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1,2,3,\\
&\sum_{i=1}^{j} a_{1,j+1,i} = c_{1,j+1},\ j = 1,2,3,\\
&\sum_{i=1}^{j} a_{1,j+1,i}c_{2i} = \frac{1}{2}c_{1,j+1}^{2},\ j = 1,2,3,\\
&\sum_{i=j+1}^{4} b_{1i}a_{1ij} = b_{2j}(1-c_{2j}),\ j = 1,2,3,\\
&\sum_{i=1}^{3} b_{2i}c_{2i}^{j} = \frac{1}{j+1},\ j = 0,1,2,3,\\
&\sum_{i=2}^{3} b_{2i}\sum_{j=2}^{i} a_{2ij}c_{1j} = \frac{1}{6},\\
&\sum_{i=2}^{3} b_{2i}c_{2i}\sum_{j=2}^{i} a_{2ij}c_{1j} = \frac{1}{8},\\
&\sum_{i=2}^{3} b_{2i}\sum_{j=2}^{i} a_{2ij}c_{1j}^{2} = \frac{1}{12},\\
&\sum_{i=1}^{j} a_{2ji} = c_{2j},\ j = 1,2,3,\\
&\sum_{i=1}^{4} \bar{b}_{1i} = 1,\\
&\sum_{i=2}^{4} \bar{b}_{1i}c_{1i}^{j} = \frac{1}{j+1},\ j = 1,2,\\
&\sum_{i=1}^{3} \bar{b}_{2i}c_{2i}^{j} = \frac{1}{j+1},\ j = 0,1.
\end{aligned}
\tag{59}
$$

Для повышения эффективности метода потребуем, чтобы последнее вычисление функции $k_{14}(h)$ на этом шаге было первым (в случае успеха) на следующем. Для этого необходимо к требованию выполнения равенств (59) добавить ограничения вида

$$c_{14} = 1,\ a_{141} = b_{21},\ a_{142} = b_{22},\ a_{143} = b_{23}. \tag{60}$$

Решения системы (59), (60) образуют двухпараметрическое семейство. Не выписывая общее, приведем два частных ее решения. Для первого доопределим два параметра, положив $c_{21} = 1/6,\ c_{22} = 1/2$. Расчетная схема, соответствующая этому решению, приведена в

Таблица 6

$M = (4,3)$-этапный вложенный $P[Q] = (4,4)[(3,2)]$ метод (16)–(19)

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8} & & \\
1 & \frac{3}{8} & \frac{1}{4} & \frac{3}{8} & \\
\hline
z_1 & \frac{1}{6} & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\
\bar{z}_1 & \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & 2 & 0
\end{array}
\qquad\qquad
\begin{array}{c|ccc}
\frac{1}{6} & \frac{1}{6} & & \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \\
\frac{5}{6} & \frac{5}{18} & -\frac{1}{3} & \frac{8}{9} \\
\hline
z_2 & \frac{3}{8} & \frac{1}{4} & \frac{3}{8} \\
\bar{z}_2 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2}
\end{array}
$$

Таблица 7

$M = (4,3)$-этапный вложенный $P[Q] = (4,4)[(3,2)]$ метод (16)–(19)

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & a_{1ij} \\
1-\frac{\sqrt{15}}{5} & 1-\frac{\sqrt{15}}{5} & & & \\
\frac{13}{8}-\frac{\sqrt{15}}{4} & \frac{45}{16}-\frac{125\sqrt{15}}{192} & -\frac{19}{16}-\frac{77\sqrt{15}}{192} & & \\
1 & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} & \\
\hline
z_1 & \frac{281}{1308}-\frac{49\sqrt{15}}{1308} & \frac{25}{1356}+\frac{115\sqrt{15}}{1356} & \frac{9856}{36951}+\frac{9728\sqrt{15}}{184755} & \frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10} \\
\bar{z}_1 & \frac{569}{1308}-\frac{55\sqrt{15}}{1308} & \frac{415}{1356}-\frac{125\sqrt{15}}{1356} & \frac{9568}{36951}+\frac{4960\sqrt{15}}{36951} & 0
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{c|ccc}
\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10} & & a_{2ij} \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{32}-\frac{\sqrt{15}}{32} & \frac{15}{32}+\frac{\sqrt{15}}{32} & \\
\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{487}{2180}+\frac{33\sqrt{15}}{2180} & \frac{75}{452}-\frac{83\sqrt{15}}{2260} & \frac{6816}{61585}+\frac{7488\sqrt{15}}{61585} \\
\hline
z_2 & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \\
\bar{z}_2 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2}
\end{array}
$$

табл. 6. Второе частное решение (табл. 7) базируется на трехточечной квадратурной формуле Гаусса — Лежандра, так как в качестве c_{2i} взяты нули сдвинутого полинома Лежандра третьей степени:

$$c_{21} = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}, \quad c_{22} = \frac{1}{2}, \quad c_{23} = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}.$$

Характеризуя полученные схемы (см. табл. 6, 7) интегрирования, естественно использовать для сравнения известные аналоги — классическую четырехэтапную схему метода Рунге — Кутты с контрольным членом Егорова 4(2) [13] и пятиэтапную расчетную схему Зонневельда 4(3) [5]. При равном порядке точности с указанными оппонентами построенные расченные схемы более эффективны, так как по сути (в силу выполнения равенств (60)) являются трехэтапными. Подчеркнем два важных момента (не приводя здесь их доказательства): во-первых, в рамках структурного подхода (16)–(19) с числом этапов $M = (4,3)$ для интегрирования системы (15) нельзя построить вложенный метод с точностной характеристикой $P[Q] = (4,4)[(3,3)]$; во-вторых, не существует трехэтапной расчетной схемы вложенного метода (16)–(19) с точностной характеристикой $P[Q] = (4,4)[(3,2)]$.

Для представления вложенных методов интегрирования дифференциального уравнения (20) воспользуемся табличной формой (табл. 8), приведенной в [14]. Здесь $B_{\nu i}$, $\bar{B}_{\nu i}$, C_i, A_{ij} — параметры метода (21) $P = (p_0, p_1)$-го порядка точности вычисления приближения Z_ν, $\nu = 0, 1$, к решению $y^{(\nu)}(x + h)$ и его "оценщиков" — $Q = (q_0, q_1)$-го порядка

$$\bar{Z}_\nu = \sum_{j=0}^{1-\nu} \frac{h^j}{j!} y^{(j+\nu)}(x) + h^{1-\nu} \sum_{i=1}^{m} \bar{B}_{\nu i} k_i, \quad \nu = 0, 1,$$

$$y(x + h) - \bar{Z}_0 = O(h^{q_0+1}), \quad y'(x + h) - \bar{Z}_1 = O(h^{q_1+1}).$$

Приведенные к виду (22) для прямого интегрирования уравнения (20) расчетные схемы (см. табл. 6, 7) представлены в виде табл. 9, 10 соответственно.

Существующий аналог [14] — пятиэтапный метод RKN4(3)4FM уступает трехэтапным расчетным схемам (см. табл. 9, 10), так как при одинаковом порядке точности требует четырех этапов в случае успеха. В случае же неудачи в методе RKN4(3)4FM приходится отказываться от четырех вычислений правой части, в то время как для полученных здесь схем — от трех.

В заключение отметим, что рассмотренный структурный подход указывает способ конструирования методов интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка специального вида, которые после их приведения к виду экономично-

Таблица 8

m-этапный вложенный метод типа Нюстрема

C_i	A_{ij}					B_{0i}	$\bar{B}_{0i}$	B_{1i}	$\bar{B}_{1i}$
C_1	0					B_{01}	$\bar{B}_{01}$	B_{11}	$\bar{B}_{11}$
C_2	A_{21}					B_{02}	$\bar{B}_{02}$	B_{12}	$\bar{B}_{12}$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$			$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
C_m	A_{m1}	A_{m2}	$\dots$	$A_{m\,m-1}$	0	B_{0m}	$\bar{B}_{0m}$	B_{1m}	$\bar{B}_{1m}$

Таблица 9

Трехэтапный вложенный $P[Q] = (4, 4)[(3, 2)]$ метод (21)

C_i	A_{ij}		B_{0i}	$\bar{B}_{0i}$	B_{1i}	$\bar{B}_{1i}$
$\frac{1}{6}$	0		$\frac{5}{16}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}$		$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	0
$\frac{5}{6}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{16}$	0	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{2}$

Таблица 10

Трехэтапный вложенный $P[Q] = (4, 4)[(3, 2)]$ метод (21)

C_i	A_{ij}		B_{0i}	$\bar{B}_{0i}$	B_{1i}	$\bar{B}_{1i}$
$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$	0		$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{36}$	$\frac{\sqrt{15}}{18}$	$\frac{5}{18}$	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{8} - \frac{\sqrt{15}}{16}$		$\frac{2}{9}$	$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{18}$	$\frac{4}{9}$	0
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$	$-\frac{3}{5} + \frac{\sqrt{15}}{5}$	$\frac{3}{5} - \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{36}$	0	$\frac{5}{18}$	$\frac{1}{2}$

му и алгоритмически простому для непосредственного интегрирования дифференциального уравнения $y''(x) = f(x, y(x))$ попадают в класс методов типа Нюстрема (21), делая ограничение $c_1 = 0$ необязательным.

Список литературы

[1] Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: Наука, 1987.

[2] Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. Т. 2. М.: Физматгиз, 1966.

[3] Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырный П.И. Вычислительные методы высшей математики. Т. 2. Минск, 1975.

[4] Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла, Дж. Уатта. М., 1979.

[5] Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М., 1990.

[6] Hairer E. Order conditions for numerical methods for partitioned ordinary differential equations // Numer. Math. 1981. Vol. 36. P. 431–445.

[7] Олемской И.В. Численный метод интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Мат. методы анализа управляемых процессов. Л., 1986. С. 157–160.

[8] Олемской И.В. Структурный подход в задаче конструирования явных одношаговых методов // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2003. Т. 43, № 7. С. 961–974.

[9] Олемской И.В. О численном методе интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Оптимальное управление механ. системами. Л., 1983. С. 178–185.

[10] Олемской И.В. Экономичная расчетная схема четвертого порядка точности численного интегрирования систем специального вида // Процессы управления и устойчивость: Тр. XXX научн. конф. СПб.: НИИ химии СПбГУ, 1999. С. 134–143.

[11] Олемской И.В. Четырехэтапный метод пятого порядка точности численного интегрирования систем специального вида // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2002. Т. 42, № 8. С. 1179–1190.

[12] Коллатц Л. Численные методы решения диференциальных уравнений. М.: Иностр. лит., 1953.

[13] Арушанян О.Б., Залеткин С.Ф. Численное решение обыкновенных диференциальных уравнений на Фортране. М.: Изд-во МГУ, 1990.

[14] Dormand J.R., El-Mikkawy M.E.A., Prince P.J. Families of Runge — Kutta — Nystrom Formulae // IMA J. Numer. Anal. 1987. Vol. 7. P. 235–250.

Поступила в редакцию 28 ноября 2003 г.