М Е Т О Д Ы   С П Л А Й Н - Ф У Н К Ц И Й
(Вычислительные системы)
198[illegible] год   Выпуск 87

УДК 517.9+518.6

О МЕТОДЕ БАТЧЕРА С ПЕРЕМЕННЫМ ШАГОМ

В.К.Королев

Для численного решения задачи Коши

$$\dot{y} \equiv \frac{dy}{dt} = f(t,y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t \in [t_0, T], \quad y, f \in R^m, \qquad (1)$$

существует достаточно большое количество разнообразных методов (см., например, [1]).

Метод Батчера [2] принадлежит к так называемым гибридным и является одним из наиболее эффективных среди существующих методов. Соединяя в себе достоинства как многошаговых методов, использующих информацию о решении в предыдущих точках и позволяющих сократить число вычислений правых частей уравнений, так и одношаговых (типа Рунге-Кутта), он позволяет за счет дополнительного вычисления правых частей во внеузловой точке получить наивысший (недостижимый для многошаговых методов) порядок точности решения.

Пусть в точках $t_{n-1}, t_{n-2}, \ldots, t_{n-k}$ решение найдено, т.е. известны значения функции $y_{n-1}, y_{n-2}, \ldots, y_{n-k}$ и ее производной $f_{n-1}, f_{n-2}, \ldots, f_{n-k}$. Тогда формулы k-шагового метода Батчера имеют вид:

$$y_{n-\theta} = \sum_{i=1}^{k} A_i y_{n-i} + h \sum_{i=1}^{k} B_i f_{n-i}, \qquad (2)$$

$$y_n = \sum_{i=1}^{k} a_i y_{n-i} + h\Big(\sum_{i=1}^{k} b_i f_{n-i} + b f_{n-\theta} \Big), \qquad (3)$$

$$y_n = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_{n-i} + h\Big(\sum_{i=0}^{k} \beta_i f_{n-i} + \beta f_{n-\theta} \Big). \qquad (4)$$

Первые две формулы экстраполяционные и образуют сложный предиктор: с помощью (2) вычисляем значение функции y в точке $t_{n-\theta}$, $t_{n-1} < t_{n-\theta} < t_n$, из (3) находим прогнозируемое значение y_n. Формула

(4) интерполяционная и служит корректором: по ней значение y_n уточняется.

Выпишем выражение для остаточного члена, например, формулы (2) в следующем виде:

$$R_{p+1} = E_{p+1}\frac{h^{p+1}\, y^{(p+1)}(\tau)}{(p+1)!} . \tag{5}$$

Здесь p - порядок точности формулы (2); $\tau\in[\,t_{n-1}, t_n\,]$, E_{p+1} - коэффициент ошибки, определяемый подстановкой в (5) полинома

$$y(t) = (t - t_n)^r , \quad r = 0,1,\dots, p+1 . \tag{6}$$

Аналогично определяются коэффициенты ошибок e_{p+1} и ε_{p+1} формул (3) и (4).

Метод Батчера (формула-корректор (4)) имеет порядок $p = 2k+1$, т.е. $R_{p+1} = O(h^{2k+2})$.

При $k=2$ и $\theta=\frac{1}{2}$ (см. [2]) формулы (2)-(4) принимают вид:

$$y_{n-\frac{1}{2}} = y_{n-2} + \frac{h}{8}(9f_{n-1} + 3f_{n-2}) , \tag{2'}$$

$$y_n = \frac{1}{5}(28y_{n-1} - 23y_{n-2}) + \frac{h}{15}(-60f_{n-1} - 26f_{n-2} + 32f_{n-\frac{1}{2}}), \tag{3'}$$

$$y_n = \frac{1}{31}(32y_{n-1} - y_{n-2}) + \frac{h}{93}(15f_n + 12f_{n-1} - f_{n-2} + 64f_{n-\frac{1}{2}}). \tag{4'}$$

Порядок точности этого (двухшагового) варианта метода равен 5, т.е. $R_{p+1}=O(h^6)$.

Формулы (2)-(4) можно использовать более гибко, если величину шага сделать переменной.

Для простоты рассмотрим случай скалярного уравнения (I) ($m=1$) и запишем полином Эрмита, интерполирующий функцию $y(t)$ по ее значениям и значениям ее производной в узлах $t_{n-1}, t_{n-2}, \dots, t_{n-k}$ в следующем виде (ср. с [3]):

$$H(t) = \sum_{i=1}^{k}\left\{ y_{n-i}\left[1 - \frac{\ddot{\omega}_k(t_{n-i})}{\dot{\omega}_k(t_{n-i})}(t-t_{n-i})\right] + f_{n-i}(t-t_{n-i})\right\}\frac{\omega_k^2(t)}{(t-t_{n-i})^2\,\dot{\omega}_k^2(t_{n-i})} , \tag{7}$$

где $\omega_k(t) = (t-t_{n-1})(t-t_{n-2})\dots(t-t_{n-k})$.

Коэффициенты формулы (2) при $k=2$ нетрудно определить непосредственно из (7), если положить $t = t_{n-\frac{1}{2}}$, $H(t_{n-\frac{1}{2}}) = y_{n-\frac{1}{2}}$, $t_{n-1} - t_{n-2} = h$, $t_n - t_{n-1} = \varkappa h$. Здесь мы вводим параметр $\varkappa$, через который выражаются все коэффициенты формул (2)-(4). Для формулы (2) имеем:

$$A_1 = (1-\varkappa)\left(1+\frac{\varkappa}{2}\right)^2, \qquad A_2 = (3+\varkappa)\left(\frac{\varkappa}{2}\right)^2,$$
$$B_1 = \frac{\varkappa}{2}\left(1+\frac{\varkappa}{2}\right)^2, \qquad B_2 = \left(1+\frac{\varkappa}{2}\right)\left(\frac{\varkappa}{2}\right)^2. \tag{8}$$

Формулу (4) можно трактовать как уравнение для определения $\dot{y}_{n-\frac{1}{2}} \equiv f_{n-\frac{1}{2}}$ через производную полинома Эрмита, построенного по значениям функции $y(t)$ и ее производной в узлах $t_n, t_{n-1}, \dots, t_{n-k}$. Дифференцируя (7) по t, получаем:

$$\dot{H}(t) = \sum_{i=0}^{k} \frac{1}{(t-t_{n-i})\dot{\omega}_k^2(t_{n-i})} \left\{ 2\frac{y_{n-i}}{t-t_{n-i}} \left[\omega_k(t)\dot{\omega}_k(t) - \frac{\omega_k^2(t)}{t-t_{n-i}}\right] + \right.$$
$$\left. + \left[f_{n-i} - y_{n-i}\frac{\ddot{\omega}_k(t_{n-i})}{\dot{\omega}_k(t_{n-i})}\right]\left[2\omega_k(t)\dot{\omega}_k(t) - \frac{\omega_k^2(t)}{t-t_{n-i}}\right]\right\}. \tag{9}$$

При $k=2$ аналогично предыдущему находим коэффициенты формулы (4):

$$\alpha_1 = \frac{(1+\varkappa)^3(6-3\varkappa+\varkappa^2)}{\Delta}, \quad \alpha_2 = -\frac{\varkappa^5}{\Delta}, \quad \beta_0 = \frac{\varkappa(1+\varkappa)(2+3\varkappa)}{2\Delta},$$
$$\beta_1 = \frac{\varkappa(2-\varkappa)(1+\varkappa)^3}{2\Delta}, \quad \beta_2 = -\frac{\varkappa^5(1+\varkappa)}{2(2+\varkappa)\Delta}, \quad \beta = \frac{8\varkappa(1+\varkappa)^3}{(2+\varkappa)\Delta}, \tag{10}$$

где $\Delta = 10\varkappa^2 + 15\varkappa + 6$.

Формула (3) выводится иначе, чем (2) или (4): ее коэффициенты определяются через коэффициенты этих формул с помощью следующих выкладок.

Выпишем выражения для коэффициентов ошибок (5) формул (2)-(4). Подставляя (6) в эти формулы, имеем:

$$
\left.
\begin{aligned}
&E_0 = A_1 + A_2 - 1\,,\\
&E_r = (-1)^r\Big[A_1\varkappa^r + A_2(1+\varkappa)^r - \left(\frac{\varkappa}{2}\right)^r -\\
&\qquad -r\big(B_1\varkappa^{r-1} + B_2(1+\varkappa)^{r-1}\big)\Big], \qquad r\geq 1\,,\\
&e_0 = a_1 + a_2 - 1\,,\\
&e_r = (-1)^r\Big[a_1\varkappa^r + a_2(1+\varkappa)^r - rb\left(\frac{\varkappa}{2}\right)^{r-1} -\\
&\qquad -r\big(b_1\varkappa^{r-1} + b_2(1+\varkappa)^{r-1}\big)\Big], \qquad r\geq 1\,,\\
&\varepsilon_0 = \alpha_1 + \alpha_2 - 1\,,\\
&\varepsilon_1 = -\big[\alpha_1\varkappa + \alpha_2(1+\varkappa) - (\beta_0 + \beta_1 + \beta_2 + \beta)\big],\\
&\varepsilon_2 = (-1)^r\Big[\alpha_1\varkappa^r + \alpha_2(1+\varkappa)^r -\\
&\qquad -r\Big(\beta_1\varkappa^{r-1} + \beta_2(1+\varkappa)^{r-1} + \beta\left(\frac{\varkappa}{2}\right)^{r-1}\Big)\Big], \qquad r\geq 2.
\end{aligned}
\right\}\quad (11)
$$

Повторяя рассуждения Батчера, распорядимся коэффициентами $a_1,\ldots,b_2, b$ так, чтобы порядок формулы (3) был не $2k$ (по числу параметров), а $2k-1$, но чтобы уничтожался главный член ошибки слагаемого $\beta f_{n-\frac{1}{2}} + \beta_0 f_n$ в (4), поскольку величины $f_{n-\frac{1}{2}}$ и f_n вычисляются из менее точных формул (2), (3). Полагая

$$\beta E_r + \beta_0 e_r + \varepsilon_{r+1} = 0, \quad r = 0,1,\ldots,p, \qquad (12)$$

собирая из (11) и приравнивая нулю соответствующие члены, получаем выражения для искомых коэффициентов:

$$
\begin{aligned}
&a_1 = \frac{1}{\beta_0}(\varkappa\alpha_1 - \beta A_1 - \beta_1), \qquad a_2 = \frac{1}{\beta_0}((1+\varkappa)\alpha_2 - \beta A_2 - \beta_2),\\
&b_1 = \frac{1}{\beta_0}(\varkappa\beta_1 - \beta B_1), \qquad b_2 = \frac{1}{\beta_0}((1+\varkappa)\beta_2 - \beta B_2), \qquad (13)\\
&b = \frac{\varkappa\beta}{2\beta_0}.
\end{aligned}
$$

Так как формула (2) имеет порядок $p = 2k-1$, т.е. $p = 3$, то $E_0 = \ldots = E_3 = 0$, $E_4 \neq 0$. Аналогично для (4) $p = 2k+1$, т.е. $p=5$, поэтому $\varepsilon_0 = \ldots = \varepsilon_5 = 0$, $\varepsilon_6 \neq 0$. Из (12) получаем $e_0 = \ldots = e_3 = 0$, $e_4 \neq 0$ и, кроме того, $\beta E_4 + \beta_0 e_4 = 0$.

Заметим, что из $E_0 = e_0 = \varepsilon_0 = 0$ следует $A_1 + A_2 = a_1 + a_2 = \alpha_1 + \alpha_2 = 1$. Эти соотношения можно использовать при вычислении значений коэффициентов.

Для случая постоянного шага ($\varkappa$=1) из (8), (I0) и (I3) получаются численные значения коэффициентов формул (2'), (4') и (3') соответственно.

Вопрос о выборе величины шага при переходе от t_{n-1} к t_n, т.е. значения параметра $\varkappa$, достаточно сложен и здесь не рассматривается. Можно сделать следующие замечания.

Если задача (I) решается для сравнительно несложной системы, для которой трудоемкость вычисления правых частей уравнений и коэффициентов формул (2)-(4) одного порядка, то вычислять коэффициенты по формулам (8), (I0) и (I3) целесообразно лишь при сильном изменении шага, а при слабом его изменении лучше вести интегрирование с постоянным шагом по готовым формулам (2')-(4').

Если же интегрируется достаточно сложная система, для которой основную долю машинного времени занимает счет правых частей уравнений, а затраты на счет коэффициентов (8), (I0), (I3) сравнительно невелики, то рациональный (тем более оптимальный) выбор шага интегрирования позволит добиться заметной экономии машинного времени.

Это особенно важно, когда приходится многократно интегрировать одну и ту же систему при малых изменениях входящих в нее параметров (как, например, при вычислении компонент градиента в задачах оптимизации параметров динамических систем [4]). Если при этом каким-либо способом построена оптимальная сетка узлов (см., например, [5]), то величины $\varkappa_i$, $i = 1, 2, \ldots, N$, известны и предлагаемая модификация метода Батчера даст возможность существенно сократить общее время решения задачи.

Литература

I. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Ред. Холл Дж., Уатт Дж. - М.: Мир, 1979, - 312 с.

2. BUTCHER I.C. A modified multistep method for the numerical integration of ordinary differential equations. - J.of the ACM,1965,v.12, N 1,p.124-135.

3. БЕРЕЗИН И.С., ЖИДКОВ Н.П. Методы вычислений. Т.I - М.: Физматгиз. 1962, - 464 с.

4. КОРОЛЕВ В.К. Применение методов квадратичного программирования для оптимизации параметров динамических систем. - В кн.: Вычислительные системы. - Новосибирск, 1970, вып. 40, с.51-73.

5. ГАЙСАРЯН С.С. О выборе оптимальных сеток при численном решении задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. - Журнал вычислительной математики и математической физики, 1970, т.10, № 2, с. 465-473.

Поступила в ред.-изд.отд.
20 марта 1980 года