УДК 519.63

В. С. Абрамчук*, канд. фіз.-мат. наук,
І. В. Абрамчук**, старший викладач

*Вінницький державний педагогічний університет
імені М. Коцюбинського, м. Вінниця,
**Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця

НАБЛИЖЕНЕ ІНТЕГРУВАННЯ ЖОРСТКИХ ЗАДАЧ

Досліджено задачі наближеного розв'язування жорстких систем звичайних диференціальних рівнянь (ЗДР) та інтегрування погано обумовлених функцій.

Ключові слова: *жорсткі задачі, гіперболічні многочлени, адаптивні квадратурні формули.*

Жорстка задача Коші. Задача Коші для системи s звичайних диференціальних рівнянь (ЗДР) першого порядку (у загальному випадку нелінійних)

$$\vec{y}' = \vec{f}\left(x, \vec{y}\right),\ x \in \left[a; b\right], \tag{1}$$

$$\vec{y}\left(a\right) = \vec{y}_0, \tag{2}$$

де $\vec{y}'\left(x\right) = \left(y_1\left(x\right), ..., y_s\left(x\right)\right)$, $\vec{f}\left(x, \vec{y}\right) = \left(f_1\left(x, \vec{y}\right), ..., f_s\left(x, \vec{y}\right)\right)$, називається жорсткою у деякому інтервалі $I \subset \left[a; b\right]$, якщо

$$\operatorname{Re}\lambda_i < 0, \quad i = 1, 2, ..., s, \tag{3}$$

$$S\left(x\right) = \max_{i=\overline{1,s}} \operatorname{Re}\left(-\lambda_i\right) \Big/ \min_{i=\overline{1,s}} \operatorname{Re}\left(-\lambda_i\right) \gg 1, \tag{4}$$

де λ_i — власні значення матриці Якобі $J = \left(\dfrac{\partial f_i}{\partial y_j}\right)$ в околі розв'язку $\vec{y}\left(x\right)$ [1]. Величини $1/\operatorname{Re}\left(-\lambda_i\right)$ «називають часовими постійними», $S\left(x\right)$ — коефіцієнтом жорсткості. В практичних задачах, що виникають в таких областях, як хімічна кінетика, управління і регулювання динамічних систем, деформація пружних тіл, коефіцієнт жорсткості може досягати величини $O\left(10^6\right)$ [1; 2]. В околі розв'язку рівняння (1) можна апроксимувати лінеаризованим рівнянням

$$\vec{y}' - J\left(x\right)\left(\vec{y} - \vec{y}\left(x\right)\right) - \vec{f}\left(x, \vec{y}\left(x\right)\right) = 0,$$

де $J\left(x\right)$ — матриця Якобі. Задача (1)—(2) буде абсолютно стійкою, якщо $f\left(x, \vec{y}\right)$ задовольняє умову Ліпшиця (в деякій рівномірній метриці)

$$\left\| f\left(x, \vec{y}_1\right) - f\left(x, \vec{y}_2\right) \right\| \le L \left\| \vec{y}_1 - \vec{y}_2 \right\|$$

для всіх $x \in [a;b]$ і всіх компонент векторів $\vec{y}_1, \vec{y}_2$ [1]. Якщо похідні $\partial f_i / \partial y_j$ неперервні і обмежені, то константа Ліпшиця визначається як

$$L = \left\| \partial f_i / \partial y_j \right\| > \rho \left| \partial f_i / \partial y_j \right|,$$

де ρ спектральний радіус матриці Якобі: $\rho = \max_{i=\overline{1,s}} \left| \lambda_i \right|$.

Основна проблема, яка виникає при побудові наближень до розв'язку жорсткої задачі є проблема чисельної стійкості, оскільки довжина кроку інтегрування обмежується величиною найменшої часової постійної, а тому число кроків інтегрування може бути порівняне з коефіцієнтом жорсткості системи.

Розглянемо деякий загальний клас методів для обчислення наближеного розв'язку задачі (1)—(2) в прогнозованій точці $x_{n+1} = x_n + h$, $x_n \ge a$, який подамо формулою [1; 3]

$$\vec{y}_{n+1} = \sum_{i=0}^{k} \alpha_k \vec{y}_{n-i} + h\varphi\left(\vec{f}\left(x_{n+1}, \vec{y}_{n+1} \right), ..., \vec{f}\left(x_{n-k}, \vec{y}_{n-k} \right), h \right), \qquad (5)$$

де $\{\alpha_i\}$ — константи, що підбираються апріорі, або розраховуються на основі формули прогнозування розв'язку $\vec{y}_n, ..., \vec{y}_{n-k}$ — наближення до розв'язку, обчислені на попередніх кроках в точках $x_n, ..., x_{n-k} \ge a$. Якщо функція φ не залежить від $\vec{f}\left(x_{n+1}, \vec{y}_{n+1} \right)$, то метод називається явним, у протилежному випадку — неявним. Початкові значення $\vec{y}_1(x_1), ..., \vec{y}_k(x_k)$ для запуску неявного методу (5) розраховуються деяким явним методом. На кожному кроці методу (5) прогнозується величина кроку h та наближення $\vec{y}_{n+1}$ в точці $x_{n+1} = x_n + h$, яке уточнюється шляхом розв'язування нелінійної системи (5) методом функціональної ітерації або методом Ньютона. Формула (5) конструюється на основі наближеного інтегрування системи (1) або диференціюванням розв'язку задачі (1)—(2) (формули диференціювання вперед — в явних методах, назад — в неявних [1—4]).

Аналіз чисельних методів розв'язування задачі (1)—(2). Аналіз методів виду (5) дає змогу виділити їх позитивні сторони та недоліки [1; 3]: всі методи мають обмеження на величину кроку інтегрування $h \approx \left\| J^{-1} \right\|$; в неявних методах необхідно на кожному кроці (на частині) методом Ньютона розв'язувати нелінійну систему рівнянь, яку можна апроксимувати лінійною з матрицею переходу $H = I + \gamma h J$, яка залежить від матриці Якобі; метод Ньютона не накладає додаткових обмежень на крок сітки, але вимагає доброго початкового наближення; матриця переходу H може бути погано обумовленою і мати розріджену структуру, що вимагає внесення поправок у ту частину матриці, яка пов'язана з повільними часовими постійними; багатозначні методи типу Адамса—Мултона забезпечують високу точність, але не є абсолютно стійкими і застосовуються для розв'язування не жорстких задач, методи типу Гіра застосовуються для розв'язування жорстких задач, але мають обмеженість для задач з осцилюючими розв'язками; при зростанні кроку інтегрування жорстких задач або порядку прогнозуючого многочлена виникають осциляції; проблемними задачами є задача про інтегрування ЗДУ, розв'язки яких мають особливість, та задача адаптації квадратурних формул для інтегрування погано обумовлених функцій, якими є розв'язки жорстких задач (1)—(2) [1—6].

Перспективним напрямком побудови наближень до розв'язків жорстких задач є побудова таких узагальнених многочленів $P_n(t)$, $t=\varphi(x)$, $\varphi(x)\in C^n\left[D(\varphi)\right]$, які добре апроксимують погано обумовлені функції, що швидко осилюють на малих проміжках інтегрування (перехідна зона) і асимптотично затухають за їх межами. Побудова таких многочленів $P_n(t)$ дає змогу обґрунтувати на основі теореми Веєрштрасса збіжність до розв'язку жорсткої задачі Коші.

Гіперболічні многочлени. Введемо функції $G_n(x)$, поклавши $G_1(x)=\boldsymbol{th}\,x$, $G_{n+1}(x)=G_n'(x)$ $\forall n=1,2,\ldots$, $x\in(-\infty;\infty)$ та многочлени $S_n(t)=G_n(x)$, $t=\boldsymbol{th}\,x$, $x\in(-\infty;\infty)$, $t\in(-1;1)$, $n=2,3,\ldots$. Клас функцій $G_n(x)$, $S_n(t)$, $n\ge 2$, назвемо гіперболічними многочленами. Наведемо перші чотири многочлени: $S_1(t)=t$, $S_2(t)=1-t^2$, $S_3(t)=-2t\left(1-t^2\right)$, $S_4(t)=-2\left(1-t^2\right)\left(1-3t^2\right)$, $n=\overline{1,4}$.

Многочлени $G_n(x)$, $S_n(t)$ мають властивості:є парними функціями для парних n і непарними для непарних n; $\forall n=2,3,\ldots$ $G_n(x)\to 0$ для $x\to\pm\infty$ ($S_n(t)\to 0$ для $t\to\pm 1$). Між многочленами $G_n(x)$, $x\in(-\infty;\infty)$ і $S_n(t)$, $t\in(-1;1)$, $n=2,3,\ldots$ існує взаємно однозначна відповідність, яка встановлюється за допомогою формул $t=\boldsymbol{th}\,x$ і $x=\frac{1}{2}\ln\frac{1+t}{1-t}$. Формально доозначимо $\boldsymbol{th}(-\infty)=-1$, $\boldsymbol{th}(\infty)=1$, тоді $\forall n=2,3,\ldots$ $G_n(-\infty)=G_n(\infty)=0$ ($S_n(-1)=S_n(1)=0$).

Теорема 1. Гіперболічні многочлени $G_n(x)$, $n=2,3,\ldots$, мають $n-1$ екстремальну точку і $n-2$ дійсних скінченних нулів, які розташовані симетрично відносно початку координат.

Доведення. Доведення проведемо методом математичної індукції. Для перших многочленів $G_2(x)$ — $G_4(x)$ висновки теореми істинні. Допустимо, що ці висновки істинні також для многочлена $G_k(x)$, $k>4$, і доведемо, що вони виконуються для многочлена $G_{k+1}(x)$. Парність (непарність) многочлена $G_{k+1}(x)$ є наслідком правил диференціювання: $G_{k+1}(x)=G'_k(x)$. Оскільки за допущенням многочлен $G_k(x)$, $k>2$, має $k-1$-ну скінченну екстремальну точку, то ці точки будуть нулями многочлена $G_{k+1}(x)$, до яких добавляться два асимптотичні нулі $\pm\infty$. Інших нулів многочлен $G_{k+1}(x)$ не має, оскільки взаємно однозначний для нього многочлен $S_{k+1}(t)$ є многочленом $k+1$-го порядку. Між кожною парою дійсних нулів у многочлена $G_{k+1}(x)$ існує не менше однієї екстремальної точки (як у неперервно диференційовної функції). В силу того, що $G_{k+1}(x)\to 0$ для $x\to\pm\infty$, то на проміжках $(-\infty;x_{\min})$, $(x_{\max};\infty)$ існує ще принаймні по одній екстремальній точці, оскільки $G_{k+1}(x_{\min})=G_{k+1}(x_{\max})=0$ і $G_{k+1}(x)\to 0$ для $x\to\pm\infty$. Отже, многочлен $G_{k+1}(x)$ може мати не менше, ніж $k-2+2=k$ скінченних екстремальних точок. З другої сторони, більше, ніж k екстремальних точок функція $G_{k+1}(x)$ не може мати. Дійсно, екстремальні точки многочлена $G_{k+1}(x)$ є нулями многочлена $G_{k+2}(x)=G'_{k+1}(x)$, в якого є ще два асимптотичні нулі $\pm\infty$. Многочлену $G_{k+2}(x)$ взаємно однозначно відповідає многочлен $S_{k+2}(t)$ $k+2$-го порядку, у якого є не більше, ніж k скінченних нулів $t_i=\boldsymbol{th}\, x_i$, $i=1,\ldots,k$, та два асимптотичні нулі ± 1. Оскільки висновки теореми істинні для довільного многочлена $G_{k+1}(x)$, $k\ge 2$, то вони істинні для всіх $k=2,3,\ldots$ **Теорему доведено.**

З теореми 1 випливає важливий висновок — многочлени $G_k(x)$, $k=2,3,\ldots$, є лінійно незалежними функціями на $(-\infty;\infty)$ і можуть використовуватись разом з $G_1(x)$ в якості базису для наближення розв’язків жорсткої задачі Коші.

Ортогоналізація гіперболічних многочленів. Введемо скалярний добуток для елементів із простору гіперболічних многочленів $G = span\left\{G_n\left(x\right), n = 2,3,...\right\}$ через невласний інтеграл

$$\left(\varphi_i, \varphi_j\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i\left(x\right)\varphi_j\left(x\right)dx = \int_{-1}^{1} \psi_i\left(t\right)\psi_j\left(t\right)\frac{dt}{1-t^2}, \qquad (6)$$

де $t = \boldsymbol{th}\, x$, $dx = dt/\left(1-t^2\right)$, $\psi_i\left(t\right) = \psi_i\left(\boldsymbol{th}\, x\right) = \varphi_i\left(x\right)$, $i = 2,3,...$. За норму елемента приймемо число $\left\|\varphi_k\left(x\right)\right\| = \left(\varphi_k, \varphi_k\right)^{1/2}$, $k = 2,3,...$. Систему ортогональних многочленів $\tilde{G}_n\left(x\right)$ побудуємо за правилом Грама-Шмідта: покладемо $\tilde{G}_2\left(x\right) = G_2\left(x\right)\Big/\left\|G_2\left(x\right)\right\|$, $\tilde{S}_2\left(t\right) = S_2\left(t\right)\Big/\left\|S_2\left(t\right)\right\|$. Для всіх $k = 3,4,...$ визначимо

$$\tilde{G}_k\left(x\right) = G_k\left(x\right) + \sum_{j=2}^{k-1}\alpha_{kj}\tilde{G}_j\left(x\right),\ \tilde{S}_k\left(t\right) = S_k\left(t\right) + \sum_{j=2}^{k-1}\alpha_{kj}\tilde{S}_j\left(t\right), \qquad (7)$$

$$\alpha_{kj} = -\left(G_k\left(x\right), \tilde{G}_j\left(x\right)\right) = -\left(S_k\left(t\right), \tilde{S}_j\left(t\right)\right),\ \tilde{G}_k\left(x\right) := \tilde{G}_k\left(x\right)\Big/\left\|\tilde{G}_k\left(x\right)\right\|,$$

$$\tilde{S}_k\left(t\right) := \tilde{S}_k\left(t\right)\Big/\left\|\tilde{S}_k\left(t\right)\right\|,$$

($:=$ — символ присвоювання). Оскільки кожний із многочленів $S_k\left(t\right)$, $k = 2,3,...$, містить множник $1-t^2$, то підінтегральна функція в (6) є многочленом.

Теорема 2. Многочлени $\tilde{S}_n\left(t\right)$, $n = 2,3,...$, $t \in \left(-1,1\right)$, для парних *n* є парними функціями, для непарних *n* — непарними.

Доведення. Дійсно, для многочленів $\tilde{S}_2\left(t\right), \tilde{S}_3\left(t\right), \tilde{S}_4\left(t\right)$ висловлення теореми істинне. Нехай для многочлена $\tilde{S}_k\left(t\right), k > 4$, виконується висновок теореми 2. Побудуємо многочлен $\tilde{S}_{k+1}\left(t\right)$ за формулою (7), і нехай $S_{k+1}\left(t\right)$ є непарним (парним) многочленом, тоді всі коефіцієнти $\alpha_{k+1,j}$ з парними (непарними) номерами рівні нулеві (за властивістю визначеного інтеграла (6)). **Теорему доведено.**

Отже, процедуру побудови ортогональних многочленів $\tilde{G}_n\left(x\right)$, $\tilde{S}_n\left(t\right)$ для парних і непарних номерів можна виконувати паралельно.

Нехай $f\left(x\right) \in C\left(R\right)$, $\int_{-\infty}^{\infty}\left|f\left(x\right)\right|dx < \infty$ і $f\left(x\right) \to 0$ для $x \to \pm\infty$. І нехай функція $f\left(x\right)$ осцилює на проміжку $[a;b]$ і монотонно асимптотично згасає для $x \to \infty$, тоді природно її апроксимувати за допомогою узагальненого многочлена (ряду) $\sum_{k=1}^{m} \alpha_k \tilde{G}_k(x)$. Якщо формально побудований ряд для функції $f(x)$: $\alpha_k = \left(f(x), \tilde{G}_k(x)\right)$, рівномірно збіжний на деякому проміжку $[a;b] \subset (-\infty;\infty)$, то можна гарантувати, що для будь-якого $\varepsilon > 0$ знайдеться такий скінченний номер m, що $\left| f(x) - \sum_{k=1}^{m} \alpha_k \tilde{G}_k(x) \right| < \varepsilon$ (m буде залежати від меж відрізка $[a;b]$ і точності ε).

Зазначимо, що аналогічно до гіперболічних многочленів на основі $t = \boldsymbol{th}\, x$ можна побудувати многочлени на основі функції $t = 1/\boldsymbol{ch}\, x$.

Тестовий приклад для жорсткої задачі. Звернемо увагу на суттєву відмінність розв'язків жорсткої задачі від їх апроксимацій у вигляді многочленів Тейлора, що використовуються для прогнозу в явних і неявних методах виду (5). Розв'язки жорстких задач в початкових точках (перехідна зона) сильно збурені (абсолютні величини похідних від розв'язку сильно ростуть з ростом порядку похідної), що приводить до сильної осциляції прогнозуючого многочлена на межі проміжку інтегрування, у той час як розв'язок за межами перехідної зони починає монотонно затухати (матриця Якобі починає вироджуватись у вектор [1]).

Приклад 1 [4]**.** Проінтегрувати жорстку задачу Коші

$$\vec{y}' = \vec{f}(\vec{y}), \quad x \in [0;+\infty), \quad \vec{y} \in R^3, \quad \vec{y}^{(0)} = (1,1,0)^T,$$

де $f_1 = -0.013 y_1 + 10^3 y_1 y_2$, $f_2 = 2.5 \cdot 10^3 y_2 y_3$, $f_3 = -f_1 - f_2$, $\vec{f} = (f_1, f_2, f_3)^T$, $\vec{y} = (y_1, y_2, y_3)^T$. Матриця Якобі

$$J(x) = \begin{pmatrix} -0.013 + 10^3 y_3 & 0 & 10^3 y_1 \\ 0 & 2.5 \cdot 10^3 y_3 & 2.5 \cdot 10^3 y_2 \\ 0.013 - 10^3 y_3 & -2.5 \cdot 10^3 y_3 & -10^3 y_1 - 2.5 \cdot 10^3 y_2 \end{pmatrix}.$$

Компонента розв'язку $y_1(x)$ монотонно спадає, а компонента $y_2(x)$ монотонно зростає і обмежена зверху. Компонента $y_3(x)$ зростає до деякого максимального значення ($y_3 < 1.3 \cdot 10^{-5}$), після чого монотонно спадає. Обчислимо похідні до третього порядку в точці $x = 0$: $\vec{y}'(0) = (-0.013, 0, 0.013)^T$, $\vec{y}''(0) = (13.000169, 32.5, -45.500169)^T$, $\vec{y}'''(0) =$

$=\left(29489.5983,-113750.4225,159251.0987\right)^T$. Власні значення матриці Якобі в околі $\vec{y}\left(0\right)$: $\lambda_1=0$, $\lambda_2=-3499.996286$, $\lambda_3=-0.0167145$. Отже розв'язок є умовно стійким і сильно збуреним в точці $x=0$, монотонно згасаючим для $x\to\infty$. За прогнозуючі розв'язки наведеної жорсткої задачі необхідно вибирати функції з аналогічними властивостями, якими є гіперболічні многочлени.

Багатомірні гіперболічні многочлени. Позначимо $H\left(x\right)=$ $=H\left(x_1,...,x_m\right)=\prod_{i=1}^{m}\boldsymbol{th}\left(x_i\right)$ і утворимо гіперболічні многочлени

$$D_{i,k}\left(\vec{x}\right)=\frac{\partial^k H\left(\vec{x}\right)}{\partial {x_i}^k}=G_k\left(x_i\right)\prod_{j\neq i}\text{th}\left(x_j\right),\ x_i\in\left(-\infty,\infty\right), \tag{8}$$

та відповідні многочлени

$$U_{i,k}\left(\vec{t}\right)=S_k\left(t_i\right)\prod_{j\neq i}t_j,\ t_i\in\left(-1,1\right),$$

$\vec{x}=\left(x_1,...,x_m\right)$, $\vec{t}=\left(t_1,...,t_m\right)$, $i=\overline{1,m}$, $k=2,3,...$. Для наближення багатомірних функцій $f\left(\vec{x}\right)$, $\vec{x}\in R^m$, $\iint\limits_D f^2\left(\vec{x}\right)d\sigma<\infty$, $d\sigma=$ $=dx_1\cdots dx_m$, $D\in R^m$ і $f\left(\vec{x}\right)$ — асимптотично згасаючі функції для кожної компоненти $x_i\to\pm\infty$, можна використовувати кратні ряди побудовані за системою многочленів $D_{i,k}$.

Рівняння в частинних похідних параболічного типу. В теорії тепло і масоперенесення необхідно розв'язувати крайову задачу: розв'язати рівняння параболічного типу

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\sum_{i,j}^{m}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(K_{i,j}\frac{\partial u}{\partial x_j}\right)+f\left(u,\vec{x},t\right),\quad \vec{x}=\left(x_1,...,x_m\right), \tag{9}$$

$m=1,2,3$, $\left(\vec{x},t\right)\in D\times\left[a;b\right]$ з початковими умовами

$$u\left(\vec{x},a\right)=u_0\left(\vec{x}\right),\quad \vec{x}\in D, \tag{10}$$

і крайовими умовами, наприклад,

$$u\left(\vec{x},t\right)\Big|_s=0,\ \vec{x}\in\partial D\equiv S, \tag{11}$$

де D — відкрита і обмежена область з замкненою межею ∂D. Якщо $K_{ij}=K_{ij}\left(u(\vec{x})\right)$, то рівняння (9) стає нелінійним, у протилежному випадку — лінійне. Якщо K_{ij} — константа $\forall\vec{x}\in D$, то рівняння (9) набуде вигляду $u'_t=a^2\Delta u+f(u)$.

Для наближеного розв'язування рівняння (9) методом скінчених елементів [1] його зводять до системи звичайних диференціальних рівнянь

$$B\vec{y}\,' = A\vec{y} + \vec{f}(\vec{y}) , \tag{12}$$

де матриця B необов'язково буде одиничною. Для цього область D розбивають сіткою на елементарні частини, на яких задають базисні кусково-поліноміальні функції $\varphi_i(\vec{x})$ і розв'язок апроксимують многочленом [1]

$$U(\vec{x},t) = \sum_i y_i(t)\varphi_i(\vec{x}) . \tag{13}$$

Якщо розв'язок є погано обумовленою функцією для кожного $t \in [a;b]$, то в якості базисних функцій необхідно обирати гіперболічні многочлени (8). Для зведення крайової задачі до задачі Коші застосовують метод Гальоркіна (Канторовича—Гальоркіна або Фаело—Гальоркіна) [1; 2], замінивши рівняння (9) рівнянням

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t},\varphi_p\right) = -\sum_{i,j=1}^{m}\left(K_{ij}\frac{\partial U}{\partial x_j},\frac{\partial \varphi_p}{\partial x_i}\right) + (f,\varphi_p) , \tag{14}$$

для кожної базисної функції φ_p. Скалярний добуток задається у формі: $(u,v) = \iint\limits_R u(x)v(x)dx$, а базисні функції повинні задовольняти крайовим умовам $u(\vec{x},t) = 0$, $t \in [a;b]$, $\vec{x} \in \partial R$. Початкові умови для рівняння (14) мають вигляд $\forall \varphi_p$

$$\big(U(a),\varphi_p\big) = \big(u_0,\varphi_p\big). \tag{15}$$

Отже, якщо наближений розв'язок шукається у вигляді (13), то з рівнянь (14), (15) випливає, що функції $y_i(t)$ задовольняють систему рівнянь (12), у якій

$$B = \left(\varphi_p,\varphi_q\right),\ A\vec{y} = D\left(\vec{y}\right)\cdot\vec{y},\ D = \left(d_{pq}\right),$$

$$d_{pq} = -\sum_{i,j=1}^{m}\left(K_{ij}\frac{\partial \varphi_q}{\partial x_j},\frac{\partial \varphi_p}{\partial x_i}\right),\ \vec{f}(\vec{y}) = \left\{(\vec{f},\varphi_p)\right\} .$$

Зазначимо, якщо $\vec{f}$ — нелінійна функція, то необхідний значний машинний час для обчислення інтегралів $\left(\vec{f},\varphi_p\right)$; якщо застосувати метод коллокацій, то відпадає необхідність обчислення інтегралів, але вимагається неперервність (кускова) других похідних від базисних функцій. За точки коллокацій вибираються нулі полінома Лежандра, якщо за базисні функції обирати кусково-кубічні сплайни. За точки коллокації можна вибирати нулі гіперболічних многочленів, якщо за базисні функції вибирати гіперболічні многочлени. В методі прямих частинні похідні $\partial / \partial x_i$ за координатами можна замінити скінченно-різницевим аналогом і задача зведеться до розв'язування систем алгебричних рівнянь [7].

Чисельне інтегрування погано обумовлених функцій. Нехай необхідно обчислити інтеграл $I(f) = \int\limits_{\Omega} f(P)\rho(P)dP$, де область інтегрування Ω, вагова функція $\rho(P)$ є фіксованими. Клас розглядуваних задач визначається заданням класу F підінтегральних функцій. Похибкою квадратури $I(f) \approx S_N(f) = \sum_{j=1}^{N} D_j(f) f(P_j)$ на класі F називають величину. $R_N(F) = \sup\limits_{f \in F} \left\| R_N(f) \right\|$, $R_N(f) = I(f) - S_N(f)$ [8]. Нижню межу $W_N(F) = \inf\limits_{D_i, P_i} R_N(f)$ називають оптимальною оцінкою похибки квадратури на розглядуваному класі F. Якщо існує квадратура, для якої $R_N(F) = W_N(F)$, то її називають оптимальною (найкращою) на класі F. Оптимальні квадратури отримані для невеликого набору класів функцій [8,9]. Зосередимо увагу на найбільш важливих для практики класах $C^m[a;b]$, $m = 0{,}1$, і виділимо підклас F погано обумовлених функцій, що виникають при розв'язувані жорстких задач. Для інтегрування погано обумовлених функцій необхідно розробляти адаптивні квадратурні формули, що автоматично налаштовуються на рельєф підінтегральної функції. Відомі адаптивні формули будуються на принципі порівняння значень квадратур на проміжках розбиття з кроками h і $h/2$ або на застосуванні двох різних квадратурних формул [3]. Підінтегральні функції в обох випадках наближаються многочленами з цілими степенями, що не перевищують заданого показника m. У той час, як погано обумовлені функції можуть змінювати порядок росту в широких діапазонах.

Для характеристики швидкості зміни неперервної монотонної погано обумовленої функції на проміжку $[a;b]$ виберемо показник α позіноміальної апроксимуючої функції $\varphi(x) = \eta\left(x - a\right)^{\alpha} + \gamma$ (або показник $1/\beta$ функції $\psi(x) = \xi\left(b - x\right)^{\beta} + \delta$ за умови $\alpha \approx 1/\beta$). Вперше асимптотичний порядок функції в околі точки ввів Кармата (такі функції названі правильно змінними або регулярно змінними, а також автомодельними) [10]. У роботах [11; 12] для характеристики поведінки погано обумовленої монотонної функції на відрізку $[a;b]$ вибраний показник α апроксимуючої функції $\varphi(x)$:

$$\alpha\big([a;b]\big) = \ln\Big(\big(f(b)-f(a)\big)/\big(f(c)-f(a)\big)\Big)/\ln 2\,,\; c=(a+b)/2\,.$$

Розширимо і обґрунтуємо на основі квадратурних форм інтегрування погано обумовлених функцій поняття показника швидкості змінних функцій на відрізку.

Приклад 2. Наближено обчислити інтеграл

$$\int_{0.001}^{1.396}(1-3\ln x)\cdot x^{-4}\,dx \;\left(I = 6.907758279\cdot 10^{9}\right).$$

Підінтегральна функція є погано обумовленою

$$\left\{f(0.001)\approx 2.17\cdot 10^{13},\; f(0.6985)\approx 8.722,\;\; f(1.396)\approx -0.002\right\}$$

з логарифмічною швидкістю зміни на всьому проміжку інтегрування $\alpha\big([0.001;1.396]\big)=44.3$, на лівому підінтервалі $\alpha\big([0.001;0.6985]\big)=36.2$, на правому — $\alpha\big([0.6985;1.396]\big)=3.6$. Для обчислення заданого інтегралу методом Сімпсона з похибкою $\varepsilon\le 1$ необхідно 41 розбиття проміжка інтегрування.

Адаптивні триточкові квадратурні формули на основі позиномів. Нехай відрізок $[a;b]$ розбитий точками $a=x_0<\ldots<x_i<x_{i+1}<\ldots<$ $<x_n=b$ на елементарні проміжки, на яких функція $f\in F$ є монотонною. Триточкова адаптивна формула [11]: на кожному проміжку розбиття $[x_i,x_{i+1}]$ виберемо вузли інтерполяції $x_i = x_{i,1}<x_{i,2}<x_{i,3}=x_{i+1}$ і побудуємо інтерполяційні позиноми

$$\varphi_i(x,\overrightarrow{p_i}) = a_i + b_i(x-x_i)^{\alpha_i}\,,\;\psi_i(x,\overrightarrow{q_i}) = c_i + d_i(x_{i+1}-x)^{\beta_i}\,, \qquad (16)$$

де $\overrightarrow{p_i}=(a_i,b_i,\alpha_i)$, $\overrightarrow{q_i}=(c_i,d_i,\beta_i)$ — параметри, які необхідно визначити з умови інтерполяції: $\varphi_i(x_{i,j},\overrightarrow{p_i}) = f(x_{i,j}) = f_{i,j}$, $\psi_i(x_{i,j},\overrightarrow{q_i}) = f(x_{i,j}) =$ $=f_{i,j}$, $j=1,2,3$, $i=0,1,\ldots,n-1$.

Параметри α_i,β_i визначаються формулами:

$$\alpha_i = \ln u_i/\ln v_i\,,\; \beta_i = \ln(1-u_i)/\ln(1-v_i)\,,$$

де $u_i = (f_{i,2}-f_{i,1})/(f_{i,3}-f_{i,1})$, $v_i=(x_{i,2}-x_{i,1})/(x_{i,3}-x_{i,1})$.

Теорема 3. Якщо функція $y=f(x)$ є неперервною, монотонною і зберігає опуклість на проміжках $[x_i,x_{i+1}]$, то параметри $\overrightarrow{p_i},\overrightarrow{q_i}$ визначається однозначно. Квадратурні формули мають вигляд:

$$S_1(f)=\int_{x_i}^{x_{i+1}}\varphi_i(x)dx=h_i\left(\frac{\alpha_i}{1+\alpha_i}f_{i,1}+\frac{1}{1+\alpha_i}f_{i,3}\right),$$
$$S_2(f)\int_{x_i}^{x_{i+1}}\psi_i(x)dx=h_i\left(\frac{\beta_i}{1+\beta_i}f_{i,3}+\frac{1}{1+\beta_i}f_{i,1}\right). \tag{17}$$

Існує такий проміжний вузол $x_{i,2}$ на кожному проміжку монотонності $[x_i,x_{i+1}]$ неперервної функції $f(x)$, що квадратурні формули (17) є оптимальними для позиномів, $\beta_i=1/\alpha_i$.

Доведення. Доведення теореми засноване на основі двох факторів для монотонних неперервних функцій: 1) для довільної внутрішньої точки $x_{i,1}<x_{i,2}<x_{i,3}$ вираз $\left(f(x_{i,3})-f(x_{i,1})\right)/\left(f(x_{i,2})-f(x_{i,1})\right)>1$; 2) існує завжди така внутрішня точка $x_{i,2}$, що $\int_{x_{i,1}}^{x_{i,3}}f(x)dx=h_i\cdot f(x_{i,2})$, $h_i=x_{i,3}-x_{i,1}$. Геометричний зміст оптимальних параметрів α,β: якщо неперервна функція $f(x)$ є монотонною і опуклою на $[a;b]$, то параметри α,β є відношенням площ фігур над кривою і під кривою монотонної неперервної функції $y=f(x)$, заключених в прямокутник $[a,b;f(a),f(b)]$.

Практична важливість квадратурних формул (17) для інтегрування неперервних, монотонних функцій, полягає у тому, що немає потреби кожен раз обчислювати інтеграл на проміжках розбиття. Обчислюються лише параметри α_i,β_i, і, якщо знайдена проміжна точка $x_{i,2}$ для якої $\beta_i\approx 1/\alpha_i$, то тим самим знайдені інтерполяційні позіноми (16), на основі яких можна будувати оптимальні квадратурні формули. Оскільки квадратурні формули (17) можуть давати одностороннє наближення, то оптимальна квадратурна формула будується на основі нерівності

$$S_{1,i}(f)=\int_{x_{i,1}}^{x_{i,2}}\varphi_i(x)dx+\int_{x_{i,2}}^{x_{i,3}}\psi_i(x)dx\le\int_{x_{i,1}}^{x_{i,3}}f(x)dx\le$$
$$\le\int_{x_{i,1}}^{x_{i,2}}\psi_i(x)dx+\int_{x_{i,2}}^{x_{i,3}}\varphi_i(x)dx=S_{2,i}(f).$$

За наближення значення інтегралу приймається $\left(S_{1,i}(f)+S_{2,i}(f)\right)/2$. Запишемо явні квадратурні формули:

$$S_{1,i}(f)=A_{1,i}+A_{2,i},\quad A_{1,i}=\Delta x_{i(2,1)}\left(\alpha_i f(x_{i,1})+f(x_{i,2})\right)/\left(1+\alpha_i\right),$$
$$A_{2,i}=\Delta x_{i(3,2)}\left(\beta_i f(x_{i,3})+f(x_{i,2})\right)/\left(1+\beta_i\right),\quad S_{2,i}(f)=B_{1,i}+B_{2,i}, \tag{18}$$
$$B_{1,i}=\left(\beta_i f(x_{i,3})\Delta x_{i(2,1)}-f(x_{i,2})\Delta x_{i(3,2)}+f(x_{i,1})\Delta x_{i(3,1)}\right)/\left(1+\beta_i\right),$$

$$B_{2,i} = B_{2,i} = \Big(f(x_{i,3})\Delta x_{i(3,1)} - f(x_{i,2})\Delta x_{i(2,1)} + \alpha_i f(x_{i,1}) \Big) / \left(1+\alpha_i\right),$$

де $\Delta x_{i(p,q)} = x_{i,p} - x_{i,q}$.

Чотириточкові квадратурні формули для неперервних опуклих функцій. Для підвищення точності наближення інтерполяційними функціями введемо в базис як степеневі доданки з цілими показниками, так і позіноміальні функції. Чотириточкові інтерполяційні позіноми задамо формулами:

$$\begin{aligned} &\xi_i(x_i, \overrightarrow{p_i}) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_{i+1})(x - x_i)^{\alpha_i}, \\ &\eta_i(x_i, \overrightarrow{q_i}) = c_i + d_i(x - x_i) + g_i(x - x_i)(x_{i+1} - x)^{\beta_i}, \end{aligned} \tag{19}$$

де параметри $\overrightarrow{p_i} = (a_i, b_i, c_i, \alpha_i)$, $\overrightarrow{q_i} = (c_i, d_i, g_i, \beta_i)$ визначається з умов інтерполяції $\xi_i = (x_k, \overrightarrow{p_i}) = f(x_k)$, $\eta_i = (x_k, \overrightarrow{q_i}) = f(x_k)$, де $x_k \in \left\{ x_i = x_{i,1} < x_{i,2} < x_{i,3} < x_{i,4} < x_{i+1} \right\}$.

Теорема 4. Якщо функція $f(x)$ на елементарних проміжках розбиття $[x_i; x_{i+1}]$ неперервна, монотонна і опукла, то вектори параметрів $\overrightarrow{p_i}, \overrightarrow{q_i}$ визначаються однозначно за формулами:

$$\alpha_i = \ln \frac{1-k_{2i}}{1-k_{1i}} A_i \Big/ \ln \frac{k_{1i}}{k_{2i}}, \; \beta_i = \ln \frac{k_{2i}}{k_{1i}} A_i \Big/ \ln \frac{1-k_{1i}}{1-k_{2i}}, \tag{20}$$

де позначено $k_{1i} = (x_{i,2} - x_{i,1})/(x_{i,4} - x_{i,1})$, $k_{2i} = (x_{i,3} - x_{i,1})/(x_{i,4} - x_{i,1})$, $A_i = (y_{i,2} - k_{1i} y_{i,4} - (1-k_{1i}) y_{i,1})/(y_{i,3} - k_{2i} y_{i,4} - (1-k_{2i}) y_{i,1})$, $x_{i,2}, x_{i,3}$ — внутрішні точки проміжка $[x_i; x_{i+1}]$.

За рахунок вибору внутрішніх вузлів $x_{i,2}; x_{i,3}$ можна дістати оптимальну квадратуру. Найпростішого вигляду квадратурна формула набуває у випадку, коли $x_{i,2}$ є середньою точкою. Квадратурні формули мають вигляд:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} u_i(x)dx = \frac{h_i}{\delta_i^2 + 3\delta_i + 2} \Big(\delta_i y_{i,1} + \Big(\delta_i^2 + \delta_i + 2 \Big) y_{i,2} + \delta_i y_{i,4} \Big),$$

де $\delta_i = \alpha_i$, якщо $u_i = \xi_i(x)$. Якщо $u_i = \eta_i(x)$, то $\delta_i = \beta_i$.

Доведення теореми випливає з того, що вираз A_i еквівалентний відношенню приростів розділених різниць опуклої, неперервної, монотонної функції, а тому величина A_i є додатною.

Якщо для погано обумовленої функції $f(x) = (1 - 3\ln x) \cdot x^{-4}$ на проміжку $[0.001; 1.396]$ за внутрішні вузли вибрати $x_{i,2} = 0.6985$, $x_{i,3} = 0.002$, то інтеграл обчиститься за один крок.

Ермітова сплайн-інтерполяція. Побудова сплайнів з мінімальною кривиною має важливе застосування для розв'язування практичних задач конструювання, квантової механіки, обчислювальної математики.

Постановка задачі. Задана ермітова сіткова функція $\{x_i, y(x_i), y'(x_i)\}$, $i = 0,1,...,n$, на сітці відрізка $[a;b]$: $a = x_0 < \; < ... < x_n = b$. Побудувати сплайн-функцію $\Phi(x)$ мінімальної кривини на кожному проміжку розбиття $[x_i; x_{i+1}]$, $i = 0,1,...,n-1$, за даними сіткової функції.

Оскільки побудова функції мінімальної кривини є складною задачею, то за міру наближення $\Phi(x)$ до кусково-лінійної функції на проміжках розбиття будемо визначати через показники α_i, β_i позіномів $\varphi_i(x), \psi_i(x)$:

$$\begin{aligned} \varphi_i(x, \overrightarrow{p_i}) &= a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^{\alpha_i}, \quad \overrightarrow{p_i} = (a_i, b_i, c_i, \alpha_i), \\ \psi_i(x, \overrightarrow{q_i}) &= d_i + e_i(x - x_{i+1}) + g_i(x_{i+1} - x)^{\beta_i}, \quad \overrightarrow{q_i} = (d_i, e_i, g_i, \beta_i), \end{aligned} \qquad (21)$$

де $i = \overline{0, n-1}$.

Теорема 5. Якщо сіткова функція $\{x_i, y(x_i), y'(x_i)\}$, $i = 0,1,...,n-1$ на кожному проміжку розбиття $[x_i; x_{i+1}]$ визначає опуклу функцію: $y'_i < \left(y_{i+1} - y_i\right)/h_i < y'_{i+1}$ або $y'_{i+1} < \left(y_{i+1} - y_i\right)/h_i < y'_i$, $h_i = x_{i+1} - x_i$, то існують сплайни з базисними функціями φ_i, ψ_i, параметри $\overrightarrow{p_i}, \overrightarrow{q_i}$ визначаються формулами:

$$a_i = y_i, \quad b_i = y'_i, \quad c_i = \frac{y'_{i+1} - y'_i}{\alpha_i} \cdot h_i^{1-\alpha_i},$$

$$\alpha_i = (y'_{i+1} - y'_i) / \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - y'_i \right), \quad \beta_i = (y'_{i+1} - y'_i) / \left(y'_{i+1} - \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} \right),$$

$$d_i = y_{i+1}, \quad e_i = y'_{i+1}, \quad g_i = \frac{y'_{i+1} - y'_i}{\beta_i} \cdot h_i^{1-\beta_i}, \quad i = 0,1,...,n-1.$$

Існування позіномів з базисними функціями φ, ψ геометрично означає, що сіткова функція $\{x_i, y(x_i), y'(x_i)\}$ задає криві, що проходять через вершини (x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1}) основи трикутника і дотикаються його бічних сторін, з кутовими коефіцієнтами y'_i , y'_{i+1}. Виконавши опуклу комбінацію позіномів $\lambda_i \varphi_i(x) + (1 - \lambda_i)\psi_i(x)$, $0 \le \lambda_i \le 1$, можна ставити задачу про побудову найкращого наближення гладкої функції в класі позіномів за умови мінімізації похибки $\min \left\| \Phi(x, \vec{\lambda}) - f(x) \right\|$ на опуклій замкненій множині $\Omega = \left\{ \vec{\lambda} : 0 \le \lambda_i \le 1, i = 0,1,...,n-1 \right\}$, де $\Phi(x, \vec{\lambda}) = \psi_i(x) + \lambda_i(\psi_i(x) - \varphi_i(x))$, $x \in [x_i; x_{i+1}]$, $i = 0,1,...,n-1$, — ермітів сплайн.

Невласні інтеграли. Нехай на проміжку $\left(a;b\right]$ функція $f(x)$ неперервна, монотонна і необмежена в єдиній точці a, необхідно дослідити на збіжність невласний інтеграл $\int_a^b f(x)dx$. Апроксимуємо підінтегральну функцію $f(x)$ поліномом $\varphi(x) = \gamma(x-a)^{\alpha} + \eta$ в околі $\left(a, a+\varepsilon\right)$, вибравши за вузлові точки $\left\{ a + \dfrac{\varepsilon}{4}, a + \dfrac{\varepsilon}{2}, a + \varepsilon \right\}$ [11]. Параметр α визначиться формулою: $\alpha = \ln(p-1) / \ln 0.5$, де

$$p = \left(f\left(a + \varepsilon / 4\right) - f(a+\varepsilon) \right) / \left(f\left(a + \varepsilon / 2\right) - f(a+\varepsilon) \right).$$

Інтеграл розбігається, якщо $\alpha \le -1$ і збігається, якщо $\alpha > -1$.

Приклад 3. Дослідити на збіжність $\int_0^1 \left(1 - \ln x\right) / x^2 dx$, $\int_0^1 \ln x dx$. Оскільки $a = 0$, то за інтерполяційні вузли виберемо $\left\{ \varepsilon / 4, \varepsilon / 2, \varepsilon \right\}$. Для $\varepsilon \to 0$ значення виразу p для $f(x) = (1 - \ln x) / x^2$ прямує до 5. тому $\alpha = \ln 4 / \ln 0.5 = -2$. Отже, перший невласний інтеграл розбігається. Для другого інтегралу $\alpha = 0$ – другий інтеграл збігається.

Якщо функція $f(x)$ монотонна на проміжку $\left[a; \infty\right)$ (або $\left(-\infty; a\right]$), то або шляхом заміни змінної перейти до невласного інтегралу другого роду або функцію $f(x)$ апроксимувати іншою інтегровною функцією, яка відображає поведінку $f(x)$.

Приклад 4. Вивести аналітичну формулу для інтегралу похибки $erf(x) = \Phi(x) = \gamma \int_0^x e^{-t^2} dt$, $\gamma = 2 / \sqrt{\pi}$. Апроксимуємо функцію $f(t) = e^{-t^2}, t \in\ge \left[0; \infty\right)$ функцією $\varphi(t) = a(t - t_0) e^{-\beta(t-t_0)^2}$ з умов: 1) $\int_0^{\infty} \varphi(t)dt = \sqrt{\pi} / 2$; 2) $\max \left| e^{-x^2} - \varphi(x) \right| \to \min, x \in \left[0; \infty\right)$. Оскільки задача є нелінійною, то для визначення параметрів a, x_0, β використали імітаційне моделювання. В результаті отримали формулу:

$$\Phi(x) = \gamma \int_0^x e^{-t^2} dt \approx 1 - e^{-\beta x^2} e^{-\gamma x}, \ \beta = 0.721221301,$$

яка на проміжку $\left[0; \infty\right)$ наближує $\Phi(x)$ з похибкою $\varepsilon < 0.005$.

Висновки

1. Для апроксимації розв'язків жорстких ЗДР без сингулярностей запропоновані гіперболічні многочлени, які осцилюють на малих проміжках і асимптотично монотонно згасають на нескінченності.
2. Для інтегрування погано обумовлених функцій запропоновані оптимальні квадратурні формули.

Список використаних джерел:

1. Холл Дж. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Дж. Холл, Дж. Уатт. — М. : Мир, 1979. — 311 с.
2. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи / Э. Хайрер, Г. Ваннер. — М. : Мир, 1999. — 685 с.
3. Каханер Д. Численные методы и программное обеспечение / Д. Каханер, К. Моулер, С. Неш. — М. : Мир, 2001. — 575 с.
4. Gear C. W. Algorithm 407, DIFSUB for solution of ordinary differential equations / C. Gear // Communications of the ACM, Volume 14, Issue 3, March 1971. — P. 186–190.
5. Альшина Е. А. Диагностика особенностей точного решения при расчетах с контролем точности / Е. Альшина, Н. Калиткин, П. Корякин // ЖВМ и МФ. — 2005. — Т. 45, № 10. — С. 1837–1847.
6. Ортега Дж. Итерационные методы решения систем уравнений со многими неизвестными / Дж. Ортега, В. Рейнболт. — М. : Мир, 1975.
7. Абрамчук В. С. Ефективні ітераційні методи розв'язування систем лінійних рівнянь / В. С. Абрамчук, І. В. Абрамчук, А. Вешемірський // Вісник Львівського університету. Сер. прикладна математика та інформатика. — 2007. — Вип. 12. — С. 5–12.
8. Никольский С. М. Квадратурные формулы / С. М. Никольский. — М. : Наука, 1974. — 223 с.
9. Корнейчук Н. П. О новых результатах по экстремальным задачам теории квадратур / Н. П. Корнейчук // В книге С. М. Никольский. Квадратурные формулы, 1974.
10. Сенета Е. Правильно меняющиеся функции / Е. Сенета. — М. : Наука, 1985. — 139 с.
11. Абрамчук І. В. Інтегрування погано зумовлених функцій / І. В. Абрамчук // Вісник ВПІ. — 1999. — № 5. — С. 120–126.
12. Абрамчук В. С. Обобщенные интерполяционные многочлены / В. С. Абрамчук, С. И. Ляшко, В. В. Скопецкий // Кибернетика и системный анализ. — 1997. — № 1. — С. 84–90.

The problems of approximate solution of stiff differential equations and integration of ill-conditioned functions are researched.

Key words: *stiff problem, hyperbolic polynomial, adaptive quadrature formula.*

Отримано: 28.03.2012