



Я. М. Пелех, І. С. Будз, А. В. Кунинець, С. М. Ментинський, Б. М. Філь

Національний університет "Львівська політехніка", м. Львів, Україна

МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ПОЧАТКОВОЇ ЗАДАЧІ З ДВОСТОРОННЬОЮ ОЦІНКОЮ ЛОКАЛЬНОЇ ПОХИБКИ

Багато прикладних задач, наприклад для проектування радіоелектронних схем, автоматичних систем управління, розрахунку динаміки механічних систем, задачі хімічної кінетики загалом зводяться до розв'язування нелінійних диференціальних рівнянь і їх систем. Точні розв'язки досліджуваних задач можна отримати лише в окремих випадках. Тому потрібно використовувати наближені методи. Під час дослідження математичних моделей виникає потреба знаходити не тільки наближений розв'язок, але й гарантовану оцінку похибки результату. Використання традиційних двосторонніх методів Рунге-Кутта призводить до істотного збільшення обсягу обчислень. Ланцюгові (неперервні) дроби набули широкого застосування у прикладній математиці, оскільки вони за відповідних умов дають високу швидкість збіжності, монотонні та двосторонні наближення, мають слабку чутливість до похибки заокруглення. У роботі виведено методи типу Рунге-Кутта третього порядку точності для розв'язування початкової задачі для звичайних диференціальних рівнянь, що базуються на неперервних дробах. Характерною особливістю таких алгоритмів є те, що за певних значень відповідних параметрів можна отримати як нові, так і традиційні однокрокові методи розв'язання задачі Коші. Запропоновано розрахункові формули другого порядку точності, які на кожному кроці інтегрування дають змогу без додаткових звертань до правої частини диференціального рівняння отримати не тільки верхні та нижні наближення до точного розв'язку, а також дають інформацію про величину головного члена локальної похибки. Для практичної оцінки похибки на кожному кроці інтегрування у разі використання односторонніх формул типу Рунге-Кутта порядку p застосовують двосторонні обчислювальні формули порядку $(p-1)$. Зауважимо, що використовуючи запропоновані розрахункові формули в кожному вузлі сітки будуть отримані декілька наближень до точного розв'язку, порівняння яких дає корисну інформацію, зокрема в питанні вибору кроку інтегрування, або в оцінці точності результату.

Ключові слова: задача Коші; нелінійна апроксимація; ланцюгові дроби; двосторонні методи; хімічна кінетика; адсорбція.

Вступ. Математичне моделювання є одним із сучасних методів дослідження прикладних задач. Оскільки побудовані моделі, як правило, нелінійні і їх точні розв'язки можна отримати лише в окремих випадках, то потрібно використовувати наближені методи, які були б оптимальними за точністю та правильно відображали основні властивості поставлених задач.

Проблема побудови наближених методів розв'язання початкової задачі для звичайних диференціальних рівнянь, які мають двосторонню оцінку похибки результату, є актуальним завданням обчислювальної математики та комп'ютерного моделювання.

Аналіз літературних джерел. Дробово-раціональні наближення набули широкого застосування у приклад-

ній математиці, оскільки вони дають високу швидкість збіжності алгоритмів, монотонні та двосторонні наближення (Aptekarev & Yattselev, 2015; Brezinski & Redivo-Zaglia, 2015; Baker & Graves-Morris, 1986; Jones & Thron, 1985; Pelekh et al., 2019). У роботі (Zaiats, 2018) запропоновано ітераційний та прямий підходи до мінімізації похибки дискретизації числових методів другого порядку точності. Отримані різницеві формули застосовано до аналізу нелінійних систем коливної природи. Багато робіт присвячено побудові нелінійних методів розв'язання диференціальних рівнянь, використовуючи різні апроксиманти Паде (Butusov et al., 2019; Hofreither, 2019; Lozi, Pogonin & Pchelintsev, 2016; Nakatsukasa, Sete & Trefethen, 2018; Nepomuceno, Mendes, 2017;

Інформація про авторів:

Пелех Ярослав Миколайович, канд. фіз.-мат. наук, доцент, кафедра обчислювальної математики та програмування.

Email: pelekh_ya_m@ukr.net; <https://orcid.org/0000-0002-4339-8093>

Будз Ігор Степанович, канд. фіз.-мат. наук, доцент, кафедра обчислювальної математики та програмування.

Email: ihorbudz@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0002-5400-0984>

Кунинець Андрій Володимирович, канд. фіз.-мат. наук, асистент, кафедра обчислювальної математики та програмування.

Email: andriy.kunynets@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0003-2481-3236>

Ментинський Сергій Мирославович, ст. викладач, кафедра обчислювальної математики та програмування.

Email: serge.mentynsky@i.ua

Філь Богдан Миколайович, канд. фіз.-мат. наук, доцент, кафедра обчислювальної математики та програмування.

Email: bohdan.m.fil@lpnu.ua

Цитування за ДСТУ: Пелех Я. М., Будз І. С., Кунинець А. В., Ментинський С. М., Філь Б. М. Методи розв'язування початкової задачі з двосторонньою оцінкою локальної похибки. Науковий вісник НЛТУ України. 2019, т. 29, № 9. С. 153–160.

Citation APA: Pelekh, Ya. M., Budz, I. S., Kunynets, A. V., Mentynskiy, S. M., & Fil, B. M. (2019). Methods for solving the initial value problem with a two-sided estimate of the local error. *Scientific Bulletin of UNFU*, 29(9), 153–160. <https://doi.org/10.36930/40290927>

Ramos et al., 2017; Saravanan, Magesh & Christopher, 2018; Shmigelskiy, 2017; Vaibhav, 2018).

Під час дослідження математичних моделей виникає потреба знаходити не тільки наближений розв'язок, але й гарантовану оцінку похибки результату. Використання традиційних двосторонніх методів Рунге-Кутта (Bakhvalov, 1975, pp. 528-534; Gorbunov & Shakhov, 1963a, 1963b; Devyatko, 1963; Dobronets & Shaidurov, 1990, pp. 109-112; Krylov, Bobkov & Monastyrnyi, 1977, p. 59-72; Lyashko, Makarov & Skorobogat'ko, 1977, pp. 262-270; Salikhov, 1962, 1973) призводить до істотного збільшення обсягу обчислень, оскільки побудова верхніх і нижніх наближень до точного розв'язання вимагає додаткових звертань (обчислень) до правої частини диференціального рівняння.

У роботі виведено методи типу Рунге-Кутта третього порядку точності для розв'язування початкової задачі для звичайних диференціальних рівнянь, що базуються на неперервних дробах. Запропоновано розрахункові формули другого порядку точності, які на кожному кроці інтегрування дають змогу без додаткових звертань до правої частини диференціального рівняння отримати не тільки верхні та нижні наближення до точного розв'язку, а також дають інформацію про величину головного члена локальної похибки. Для практичної оцінки похибки на кожному кроці інтегрування, у разі використання односторонніх формул типу Рунге-Кутта порядку p , застосовують двосторонні обчислювальні формули порядку $(p-1)$.

Об'єктом дослідження є задача Коші для нелінійних диференціальних рівнянь.

Предметом дослідження є початкова задача для нелінійних диференціальних рівнянь математичної моделі кінетики адсорбції речовин пористими адсорбентами.

Мета дослідження – розробити нові обчислювальні методи та алгоритми різного порядку точності для наближеного розв'язання задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь.

Завданням дослідження є побудова методу типу Рунге-Кутта третього порядку точності й двосторонніх методів другого порядку точності, що базуються на неперервних дробах і їх застосування для дослідження математичної моделі кінетики адсорбції речовин пористими адсорбентами.

Основний результат дослідження. У цій роботі виводяться числові алгоритми розв'язуванні задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь першого порядку:

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad x \in [x_0, x_0 + L], \quad (1)$$

де: $y(x)$ – дійсний m – компонентний вектор; f – дійсна векторна функція залежної та незалежної змінних, причому припускається, що функція f володіє необхідною для викладок гладкістю.

Побудовано двосторонні розрахункові формули, локальні похибки яких у кожній вузловій точці мали такий вигляд:

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \omega h^p K F(f) + O(h^{p+1}),$$

де: $y(x_{n+1})$ і y_{n+1} – відповідно точний і наближений розв'язки задачі (1); h – крок інтегрування; $F(f)$ – деякий диференціальний оператор, обчислений у точці (x_n, y_n) , K – константа; p – порядок точності; ω – параметр двосторонності.

Достовірність отриманих результатів підтверджено тим, що в часткових випадках отримано відомі традиційні (явні і неявні) числові методи розв'язування початкової задачі для звичайних диференціальних рівнянь і їх систем.

Метод третього порядку точності. Не обмежуючи загальності, будемо знаходити наближені розв'язки задачі (1) у скалярному випадку, оскільки на системи рівнянь вони переносяться покомпонентно. Використовуючи теорію побудови однокрокових методів Рунге-Кутта (Butcher, 2008; Dekker & Werner, 1988; Hairer, Norsett & Wanner, 1990), наближений розв'язок задачі (1) шукаємо у вигляді ланцюгового дроби (Pelekh, Mentynskiy & Pelekh, 2016):

$$y_{n+1}^{[k,l]} = y_n / D_n^{[k,l]}, \quad (2)$$

$$D_n^{[k,l]} = \sum_{i=0}^{k-1} d_{i,0} + \frac{d_{k,0}}{1 + \frac{d_{k,l-1}}{1 + \dots + \frac{d_{k,l-1}}{1 + d_{k,l}}}}. \quad (3)$$

Вирази для $d_{k,l}$ у випадку $k+l = \overline{1,4}$ ($k = \overline{1,4}$; $l = \overline{0,3}$) мають вигляд:

$$d_{0,0} = 1, \quad d_{i,0} = -\sum_{m=1}^i d_{i-m,0} \cdot \frac{\sigma_m}{y_n}, \quad i = \overline{1,4},$$

$$d_{v,1} = -\frac{d_{v+1,0}}{d_{v,0}}, \quad v = \overline{1,3}, \quad d_{\mu,2} = d_{\mu+1,1} - d_{\mu,1}, \quad \mu = \overline{1,2},$$

$$d_{1,3} = d_{1,2} \frac{d_{2,2}}{d_{1,2}}, \quad \sigma_m = h \sum_{i=1}^q a_{mi} k_i, \quad q = k+l, \quad (4)$$

$$k_i = f(x_n + \alpha_i h, y_n + h \sum_{j=1}^q \beta_{ij} k_j), \quad \alpha_i = \sum_{j=1}^q \beta_{ij}, \quad y_n \neq 0,$$

де: h – крок інтегрування ($h = x_{n+1} - x_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$); $a_{ij}, \alpha_i, \beta_{ij}$ – параметри.

Ці формули дають змогу будувати як явні ($\beta_{ij} = 0$, при $i \leq j$), так і неявні числові методи. Значення параметрів $a_{ij}, \alpha_i, \beta_{ij}$ зручно записувати у вигляді табл. 1.

Табл. 1. Запис параметрів для методів Рунге-Кутта

α_i	β_{ij}	a_{ij}
α_1	$\beta_{11} \dots \beta_{1v}$	$a_{11} \dots a_{1v}$
α_2	$\beta_{21} \dots \beta_{2v}$	$a_{21} \dots a_{2v}$
\vdots	\vdots	\vdots
α_v	$\beta_{v1} \dots \beta_{vv}$	$a_{v1} \dots a_{vv}$

Зауважимо, якщо покласти $a_{ij} = 0$ (при $i \geq 2$), то отримаємо коефіцієнти $a_{ij}, \alpha_i, \beta_{ij}$ таблиці Бутчера (Butcher, 2008). Запропоновані в роботі обчислювальні схеми дають змогу на кожному кроці отримувати не тільки наближений розв'язок, але і оцінку головного члена похибки $F(f)$ без додаткових звертань до правої частини диференціального рівнянь, що вигідно відрізняє ці схеми від традиційних двосторонніх алгоритмів (Gorbunov & Shakhov, 1963a, 1963b; Devyatko, 1963; Dobronets & Shaidurov, 1990, pp. 109-112; Krylov, Bobkov & Monastyrnyi, 1977, pp. 59-72; Shakhov, 1973).

Побудуємо методи третього порядку точності. Для цього розглянемо вирази (2)-(3) при $k+l = 3$ ($k = \overline{1,3}$; $l = \overline{0,2}$) тобто

$$y_{n+1}^{[k,l]} = \begin{cases} \frac{y_n}{d_{0,0} + d_{1,0} + d_{2,0} + d_{3,0}}, & \text{якщо } k = 3, l = 0; \\ \frac{y_n}{d_{0,0} + d_{1,0} + \frac{d_{2,0}}{1 + d_{2,1}}}, & \text{якщо } k = 2, l = 1; \\ \frac{y_n}{d_{0,0} + \frac{d_{1,0}}{1 + \frac{d_{1,1}}{1 + d_{1,2}}}}, & \text{якщо } k = 1, l = 2, \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{де: } d_{0,0} = 1, \quad d_{i,0} = -\sum_{m=1}^i d_{i-m,0} \cdot \frac{\sigma_m}{y_n}, \quad i = 1, 2, 3, \quad d_{1,1} = -\frac{d_{2,0}}{d_{1,0}},$$

$$d_{2,1} = -\frac{d_{3,0}}{d_{2,0}}, \quad d_{1,2} = d_{2,1} - d_{1,1}, \quad \sigma_m = h \cdot \sum_{i=1}^3 a_{mi} k_i,$$

$$k_i = f(x_n + \alpha_i h, y_n + h \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} k_j), \quad \alpha_i = \sum_{j=1}^3 \beta_{ij}. \quad (6)$$

Параметри $a_{mi}, \alpha_i, \beta_{ij} (m, i, j = 1, 2, 3)$ визначаються з умови, що

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{[k,l]} = O(h^4). \quad (7)$$

Розвинення $y(x_{n+1})$ в ряд Тейлора по степенях h в околі точки $x = x_n$ має вигляд

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hf + \frac{1}{2} h^2 Df + \frac{1}{6} h^3 \left(D^2 f + \frac{\partial f}{\partial y} Df \right) + \frac{1}{24} h^4 \left\{ D^3 f + \frac{\partial f}{\partial y} D^2 f + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 Df + 3Df \cdot D \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \right\} + O(h^5),$$

$$\text{де } D = \frac{\partial}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial y}, \quad D^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2f \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + f^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2},$$

$$D^3 = \frac{\partial^3}{\partial x^3} + 3f \frac{\partial^3}{\partial x^2 \partial y} + 3f^2 \frac{\partial^3}{\partial x \partial y^2} + f^3 \frac{\partial^3}{\partial y^3}.$$

Знайдемо умови, які мають задовольняти ці коефіцієнти для випадку $l = 2, k = 1$ ($y_{n+1}^{[1,2]}$). Підставивши замість d_{ij} відповідні вирази з (6) в (5), отримаємо після спрощень

$$y_{n+1}^{[1,2]} = y_n + \frac{R_{[1,2]}}{Q_{[1,2]}}, \quad (8)$$

де:

$$R_{[1,2]} = y_n \left[\left(\sum_{i=1}^3 a_{3i} k_i - \sum_{i=1}^3 a_{2i} k_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 a_{1i} k_i \right) - \left(\sum_{i=1}^3 a_{2i} k_i \right)^2 \right] + h \left(\sum_{i=1}^3 a_{1i} k_i \right)^3,$$

$$Q_{[1,2]} = y_n \left(\sum_{i=1}^3 a_{3i} k_i - \sum_{i=1}^3 a_{2i} k_i \right) \frac{1}{h} + \left\{ \left(\sum_{i=1}^3 a_{1i} k_i \right)^2 - \left(\sum_{i=1}^3 a_{1i} k_i \right) + \left(\sum_{i=1}^3 a_{2i} k_i + \sum_{i=1}^3 a_{3i} k_i \right) + \left(\sum_{i=1}^3 a_{2i} k_i \right)^2 \right\}.$$

Підставимо відповідні розвинення в ряд Тейлора по степенях h для

$$\left(\sum_{i=1}^3 a_{1i} k_i \right)^3, \quad \left(\sum_{i=1}^3 a_{\mu i} k_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 a_{\nu i} k_i \right),$$

$$\mu = 1, 2; \nu = \overline{1, 3}, \quad \text{а також для } \left(\sum_{i=1}^3 a_{\mu i} k_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 a_{\nu i} k_i \right),$$

$$(\mu = 1, 2; \nu = \overline{1, 3}) \text{ і } \left(\sum_{i=1}^3 a_{1i} k_i \right)^3 \text{ (тут позначено } \sum_i = \sum_{i=1}^3) \text{ в}$$

$R_{[1,2]}$ і $Q_{[1,2]}$, отримаємо:

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{[1,2]} = & \left\{ y_n \cdot f^2 \left[\left(\sum_i a_{3i} - \sum_i a_{2i} \right) \left(1 - \sum_i a_{1i} \right) \right. \right. \\ & + \left. \left(\sum_i a_{2i} \right)^2 \right] + h \cdot y_n \cdot f \cdot Df \left[\left(\sum_i a_{3i} \alpha_i - \sum_i a_{2i} \alpha_i \right) \left(1 - \sum_i a_{1i} \right) + \right. \\ & + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \alpha_i \right) + \left. \left(\sum_i a_{3i} - \sum_i a_{2i} \right) \left(\frac{1}{2} - \sum_i a_{1i} \alpha_i \right) \right] + \\ & + hf^3 \left[\left(\sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{1i} - \sum_i a_{2i} - \sum_i a_{3i} - \left(\sum_i a_{1i} \right)^2 \right) + \left(\sum_i a_{2i} \right)^2 \right] \\ & + h^2 y_n \cdot f \cdot D^2 f \left[\left(\sum_i a_{3i} - \sum_i a_{2i} \right) \left(\frac{1}{6} - \sum_i a_{1i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) + \right. \\ & + \left. \left(\sum_i a_{3i} \frac{\alpha_i^2}{2} - \sum_i a_{2i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) \left(1 - \sum_i a_{1i} \right) + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) \right] + \\ & + h^2 y_n \cdot f \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \cdot Df \left[\left(\sum_i a_{3i} - \sum_i a_{2i} \right) \left(\frac{1}{6} - \sum_i a_{1i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) + \right. \\ & + \left. \left(1 - \sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{3i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j - \sum_i a_{2i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) + \right. \\ & + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) \left. \right] + h^2 y_n (Df)^2 \left[\left(\sum_i a_{3i} \alpha_i - \sum_i a_{2i} \alpha_i \right) \times \right. \\ & \times \left. \left(\frac{1}{2} - \sum_i a_{1i} \alpha_i \right) + \left(\sum_i a_{2i} \alpha_i \right)^2 \right] + h^2 f^2 Df \times \\ & \times \left[\frac{1}{2} \left(\sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{1i} - \sum_i a_{2i} - \sum_i a_{3i} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_i a_{2i} \right)^2 + \left(\sum_i a_{1i} \alpha_i \right) \times \right. \\ & \times \left. \left(2 \sum_i a_{1i} - \sum_i a_{2i} - \sum_i a_{3i} - 3 \left(\sum_i a_{1i} \right)^2 \right) - \right. \\ & - \left. \left(\sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \alpha_i + \sum_i a_{3i} \alpha_i \right) \right] + h^3 y_n \cdot f \cdot D^3 f \times \\ & \times \left[\left(\sum_i a_{3i} - \sum_i a_{2i} \right) \left(\frac{1}{24} - \sum_i a_{1i} \frac{\alpha_i^3}{6} \right) + \left(\sum_i a_{3i} \frac{\alpha_i^3}{6} - \sum_i a_{2i} \frac{\alpha_i^3}{6} \right) \times \right. \\ & \times \left. \left(1 - \sum_i a_{1i} \right) + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \frac{\alpha_i^3}{6} \right) \right] + h^3 y_n \cdot f \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \cdot D^2 f \times \\ & \times \left[\left(\sum_i a_{3i} - \sum_i a_{2i} \right) \left(\frac{1}{24} - \sum_i a_{1i} \sum_j \beta_{ij} \frac{\alpha_j^2}{2} \right) + \right. \\ & + \left. \left(\sum_i a_{3i} \sum_j \beta_{ij} \frac{\alpha_j^2}{2} - \sum_i a_{2i} \sum_j \beta_{ij} \frac{\alpha_j^2}{2} \right) \left(1 - \sum_i a_{1i} \right) + \right. \\ & + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \sum_j \beta_{ij} \frac{\alpha_j^2}{2} \right) \left. \right] + h^3 y_n f \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 Df \times \\ & \times \left[\left(\sum_i a_{3i} - \sum_i a_{2i} \right) \left(\frac{1}{24} - \sum_i a_{1i} \sum_l \beta_{il} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) + \right. \\ & + \left. \left(\sum_i a_{3i} \sum_l \beta_{il} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j - \sum_i a_{2i} \sum_l \beta_{il} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) \left(1 - \sum_i a_{1i} \right) + \right. \\ & + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \sum_l \beta_{il} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) \left. \right] + h^3 y_n \cdot f \cdot Df \cdot D \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \times \\ & \times \left[\left(\sum_i a_{3i} - \sum_i a_{2i} \right) \left(\frac{3}{24} - \sum_i a_{1i} \alpha_i \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) + \left(\sum_i a_{3i} \alpha_i \sum_j \beta_{ij} \alpha_j - \right. \right. \\ & - \left. \left. \sum_i a_{2i} \alpha_i \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) \left(1 - \sum_i a_{1i} \right) + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \alpha_i \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) \right] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + y_n \cdot h^3 \cdot Df \cdot D^2 f \left[\left(\sum_i a_{3i} \alpha_i - \sum_i a_{2i} \alpha_i \right) \left(\frac{1}{6} - \sum_i a_{1i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) + \right. \\
& \left. + \left(\sum_i a_{3i} \frac{\alpha_i^2}{2} - \sum_i a_{2i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) \left(\frac{1}{2} - \sum_i a_{1i} \alpha_i \right) + 2 \left(\sum_i a_{2i} \alpha_i \right) \left(\sum_i a_{2i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) \right] \times \\
& \times h^3 \left(\frac{df}{dy} \right) (Df)^2 \left[\left(\sum_i a_{3i} \alpha_i - \sum_i a_{2i} \alpha_i \right) \left(\frac{1}{6} - \sum_i a_{1i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) + \right. \\
& \left. + \left(\frac{1}{2} - \sum_i a_{1i} \alpha_i \right) \left(\sum_i a_{3i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j - \sum_i a_{2i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) + \right. \\
& \left. + 2 \left(\sum_i a_{2i} \alpha_i \right) \left(\sum_i a_{2i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) \right] y_n + \\
& + h^3 \cdot f^2 \cdot D^2 f \left[\frac{1}{6} \left(\sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{1i} - \sum_i a_{2i} - \sum_i a_{3i} \right) + \right. \\
& \left. + \frac{1}{6} \left(\sum_i a_{2i} \right)^2 - \left(\sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \frac{\alpha_i^2}{2} + \sum_i a_{3i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) + \right. \\
& \left. + \left(\sum_i a_{1i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) \left(2 \sum_i a_{1i} - \sum_i a_{2i} - \sum_i a_{3i} - 3 \left(\sum_i a_{1i} \right)^2 \right) + \right. \\
& \left. + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \frac{\alpha_i^2}{2} \right) + h^3 \cdot f^2 \cdot \frac{df}{dy} \cdot Df \left[\frac{1}{6} \left(\sum_i a_{1i} \right) \times \right. \right. \\
& \left. \left. \times \left(\sum_i a_{1i} - \sum_i a_{2i} - \sum_i a_{3i} \right) \right] + \frac{1}{6} \left(\sum_i a_{2i} \right)^2 - \left(\sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{3i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j - \right. \right. \\
& \left. \left. - \sum_i a_{2i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) + \left(\sum_i a_{1i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) \left(2 \sum_i a_{1i} - \sum_i a_{2i} - \right. \right. \\
& \left. \left. - \sum_i a_{3i} - 3 \left(\sum_i a_{1i} \right)^2 \right) + 2 \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \sum_j \beta_{ij} \alpha_j \right) \right] + \\
& + h^3 f (Df)^2 \left[\left(\sum_i a_{1i} \alpha_i \right) \left(\sum_i a_{1i} \alpha_i - \sum_i a_{2i} \alpha_i - \sum_i a_{3i} \alpha_i + \right. \right. \\
& \left. \left. + \sum_i a_{1i} - 3 \left(\sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{1i} \alpha_i \right) - \frac{1}{2} \left(\sum_i a_{3i} + \sum_i a_{2i} \right) \right) - \right. \\
& \left. - \frac{1}{2} \left(\sum_i a_{1i} \right) \left(\sum_i a_{3i} \alpha_i + \sum_i a_{2i} \alpha_i \right) \left(\sum_i a_{2i} \alpha_i \right)^2 + \right. \\
& \left. + \left(\sum_i a_{2i} \right) \left(\sum_i a_{2i} \alpha_i \right) \right] + O(h^4) \} / Q_{[1,2]}. \quad (9)
\end{aligned}$$

Прирівнявши до нуля коефіцієнти при h^i ($i=1,2,3$) знайдемо умови, які повинні задовольняти параметри a_{ij} , α_i , β_{ij} ($i, j=1,2,3$), щоб $y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{[1,2]} = O(h^4)$.

Розглянемо спочатку випадок, коли $a_{2i}=0$, $a_{3i}=0$, ($i=1,2,3$). Виходячи з умов апроксимації, після очевидних спрощень, отримаємо систему нелінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^3 a_{1i} \alpha_i^{k+1} = \frac{1}{k+1}, & k=0,1,2, \\ \sum_{i=1}^3 a_{1i} \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} \alpha_j = \frac{1}{6}, \\ \alpha_i = \sum_{j=1}^3 \beta_{ij}, & i=1,2,3. \end{cases} \quad (10)$$

Параметри a_{li} , α_i , β_{ij} ($i, j=1,2,3$), ($k=1, l=2$), що визначаються з цієї системи, сукупно з формулами (5)-

(6) описують як явні (при $\beta_{ij}=0$, якщо $i \leq j$), так і неявні традиційні методи Рунге-Кутта такого вигляду:

$$y_{n+1} = y_n + h(a_{11}k_1 + a_{12}k_2 + a_{13}k_3),$$

$$k_i = f(x_n + \alpha_i h, y_n + h(\beta_{i1}k_1 + \beta_{i2}k_2 + \beta_{i3}k_3)), \quad i=1,2,3.$$

Випишемо для прикладу декілька відомих наборів значень параметрів a_{li} , α_i , β_{ij} (табл. 2-5):

Табл. 2. Значення параметрів для явних методів

α_i	β_{ij}	a_{ij}
0	0 0 0	1/6 4/6 1/6
1/2	1/2 0 0	0 0 0
1	-1 2 0	0 0 0

Табл. 3. Значення параметрів для напів'явних методів

α_i	β_{ij}	a_{ij}
0	0 0 0	1/4 3/4 0
2/3	1/3 1/3 0	0 0 0
0	0 0 0	0 0 0

Табл. 4. Значення параметрів для неявних діагональних методів

α_i	β_{ij}	a_{ij}
$(3+\sqrt{3})/6$	$(3+\sqrt{3})/6$ 0 0	1/2 1/2 0
$(3-\sqrt{3})/6$	$-\sqrt{3}/3$ $(3+\sqrt{3})/6$ 0	0 0 0
0	0 0 0	0 0 0

Табл. 5. Значення параметрів для неявних методів

α_i	β_{ij}	a_{ij}
$1/2 + \sqrt{3}/6$	1/4 $1/4 + \sqrt{3}/6$ 0	1/2 1/2 0
$1/2 - \sqrt{3}/6$	$1/4 - \sqrt{3}/6$ 1/4 0	0 0 0
0	0 0 0	0 0 0

Побудуємо явні нелінійні розрахункові формули.

Дослідимо випадок, коли: $\sum_{i=1}^3 a_{1i} = 1$, але $\sum_{i=1}^3 a_{1i} \alpha_i \neq \frac{1}{2}$. З рівнянь для коефіцієнтів при $y_n \cdot f^2$ і hf^3 знайдемо, що $\sum_{i=1}^3 a_{2i} = 0$, $\sum_{i=1}^3 a_{3i} = 0$, і тоді з рівнянь для коефіцієнтів при $h^2 \cdot f^2 \cdot Df$, $h^2 \cdot y_n (Df)^2$ випливає, що

$$\sum_{i=1}^3 a_{3i} \alpha_i = 0, \quad \sum_{i=1}^3 a_{1i} \alpha_i + \sum_{i=1}^3 a_{2i} \alpha_i = \frac{1}{2}.$$

Враховуючи ці співвідношення, остаточно система алгебраїчних рівнянь набуває вигляду

$$\begin{cases} 1 - \sum_{i=1}^3 a_{1i} = 0, \quad \sum_{i=1}^3 a_{2i} = 0, \quad \sum_{i=1}^3 a_{3i} = 0, \\ \frac{1}{2} - \sum_{i=1}^3 a_{1i} \alpha_i - \sum_{j=1}^3 a_{2i} \alpha_i = 0, \quad \sum_{i=1}^3 a_{1i} \alpha_i = 0, \\ \frac{1}{6} - \sum_{m=1}^3 \sum_{i=1}^3 a_{mi} \frac{\alpha_i^2}{2} = 0, \quad \alpha_i = \sum_{j=1}^3 \beta_{ij}, \quad (i=1, \overline{3}), \\ \frac{1}{6} - \sum_{m=1}^3 \sum_{i=1}^3 a_{mi} \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} \alpha_j = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Коефіцієнти для явних методів ($\beta_{ij}=0$, якщо $i \leq j$, $\alpha_i=0$) мають три сімейства розв'язків:

- 1) Якщо $\alpha_2 \cdot \alpha_3 (\alpha_3 - \alpha_2) \left(\alpha_2 - \frac{2}{3} \right) \neq 0$, то $(a_{22}, a_{23}, a_{33}, \alpha_2, \alpha_3$ – параметри):

$$\beta_{21} = \alpha_2, \quad \beta_{32} = \frac{\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)}{\alpha_2(2 - 3\alpha_2)}, \quad \beta_{31} = \alpha_3 - \beta_{32},$$

$$a_{11} = 1 + \frac{2 - 3(\alpha_2 + \alpha_3)}{6\alpha_2\alpha_3} - a_{33} \frac{\alpha_3 - \alpha_2}{\alpha_2} + a_{22} + a_{23}, \quad (12)$$

$$a_{12} = \frac{3\alpha_3 - 2}{6\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2)} + a_{33} \frac{\alpha_3}{\alpha_2} - a_{22}, \quad a_{13} = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)} - a_{23} - a_{33},$$

$$a_{21} = -(a_{22} + a_{23}), \quad a_{31} = a_{33} \frac{\alpha_3 - \alpha_2}{\alpha_2}, \quad a_{32} = -a_{33} \frac{\alpha_3}{\alpha_2},$$

2) Якщо $\alpha_2 = \alpha_3$, то маємо чотирипараметричну множину розрахункових формул:

$$a_{11} = \frac{1}{4} + a_{22} + a_{23}, \quad a_{12} = \frac{3}{4} - \frac{1}{4\beta_{32}} - a_{22} + a_{33},$$

$$a_{13} = \frac{1}{4\beta_{32}} - a_{23} - a_{33}, \quad a_{21} = -(a_{22} + a_{23}), \quad (13)$$

$$a_{31} = 0, \quad a_{32} = -a_{33}, \quad \alpha_2 = \alpha_3 = \frac{2}{3}, \quad \beta_{21} = \frac{2}{3}, \quad \beta_{31} = \frac{2}{3} - \beta_{32},$$

де $\beta_{32} \neq 0$, a_{22}, a_{23}, a_{33} – вільні параметри.

3) Якщо $\alpha_2 = 2/3$ то сукупність розв'язків має такий вигляд:

$$\alpha_2 = \frac{2}{3}, \quad \beta_{21} = \frac{2}{3}, \quad \alpha_3 = 0, \quad \beta_{31} = -\beta_{32},$$

$$a_{11} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{1}{\beta_{32}} \right) + a_{22} + a_{23} + a_{33}, \quad a_{12} = \frac{3}{4} - a_{22}, \quad (14)$$

$$a_{13} = \frac{1}{4\beta_{32}} - a_{23} - a_{33}, \quad a_{21} = -a_{22} - a_{23}, \quad a_{31} = -a_{33}, \quad a_{32} = 0,$$

де $\beta_{32} \neq 0$ і a_{22}, a_{23}, a_{33} – параметри.

Зокрема, якщо покласти $a_{ij} = 0$ для $i \leq j$ отримаємо відповідно такі значення параметрів (табл. 6, 7):

1а)

$$\beta_{21} = \alpha_2, \quad \beta_{32} = \frac{\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)}{\alpha_2(2 - 3\alpha_2)}, \quad \beta_{31} = \alpha_3 - \beta_{32}.$$

$$a_{11} = 1, \quad a_{12} = 0, \quad a_{13} = 0, \quad a_{21} = -\frac{1}{2\alpha_2},$$

$$a_{22} = \frac{1}{2\alpha_2}, \quad a_{23} = 0, \quad a_{31} = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_2\alpha_3}, \quad (15)$$

$$a_{32} = \frac{3\alpha_2 - 2}{6\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2)}, \quad a_{33} = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)}.$$

2а)

Табл. 6. Значення параметрів a_{ij} , α_i , β_{ij} при $\alpha_2 = \alpha_3$ ($\beta_{32} \neq 0$).

α_i	β_{ij}			a_{ij}			
0	0	0	0	1	0	0	(16)
2/3	2/3	0	0	-3/4	3/4	0	
2/3	2/3 - β_{32}	β_{32}	0	0	-1/(4 β_{32})	1/(4 β_{32})	

3а)

Табл. 7. Значення параметрів при $\alpha_2 = 2/3$; $\alpha_2 \neq \alpha_3$ ($\beta_{32} \neq 0$).

α_i	β_{ij}			a_{ij}			
0	0	0	0	1	0	0	(17)
2/3	2/3	0	0	-3/4	3/4	0	
0	- β_{32}	β_{32}	0	-1/(4 β_{32})	0	1/(4 β_{32})	

Наведемо, як приклад, один набір значень коефіцієнтів для неявних схем:

$$a_{11} = 1, \quad a_{21} = -\frac{1}{2\alpha_2}, \quad a_{22} = \frac{1}{2\alpha_2}, \quad a_{12} = a_{13} = a_{23} = 0,$$

$$a_{31} = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_2}, \quad a_{32} = \frac{3\alpha_2 - 2}{6\alpha_2(1 - \alpha_2)}, \quad a_{33} = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_3(1 - \alpha_2)},$$

$$\alpha_1 = 0, \quad \beta_{1j} = 0 \quad (j = 1, 2, 3), \quad \beta_{21} = \alpha_2, \quad \beta_{31} = 1 - \beta_{32} - \beta_{33}, \quad (18)$$

$$\alpha_3 = 1, \quad \beta_{32} = \frac{1 - \alpha_2 + \beta_{33}(3\alpha_2 - 2)}{\alpha_2(2 - 3\alpha_2)},$$

β_{33} і α_2 – параметри, при яких $\alpha_2(1 - \alpha_2)(2 - 3\alpha_2) \neq 0$.

При значеннях (18) формула (5) у випадку $k=1, l=2$ має функцію стійкості:

$$S_{[1,2]}(\lambda h, \beta_{33}) = \frac{1 - \lambda h \left(\beta_{33} - \frac{1}{3} \right)}{1 - \lambda h \left(\frac{2}{3} + \beta_{33} \right) + (\lambda h)^2 \left(\frac{1}{6} + \beta_{33} \right) - \frac{1}{2} \beta_{33} (\lambda h)^3}$$

$$\text{тобто } S_{[1,2]} \left(\lambda h, \frac{1}{3} \right) = \left[\frac{0}{3} \right]_{\text{exp}} (\lambda h), \quad \text{і } S_{[1,2]} \left(\lambda h, \frac{1}{12} \right) = \left[\frac{1}{3} \right]_{\text{exp}} (\lambda h).$$

Метод з двосторонньою оцінкою локальної похибки. Побудуємо тепер явні двосторонні формули. Для цього розглянемо формули (5)-(6) при $k=3, l=0$ і $\alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}$, ($i=1, 2, 3$). Покладемо $a_{11} = 1, a_{12} = a_{13} = a_{23} = 0$.

Випишемо три сімейства параметрів, які дають двосторонню оцінку розв'язку в кожній вузловій точці:

$$\text{I. } a_{21} = -\frac{1 + \omega}{2\alpha_2}, \quad a_{22} = \frac{1 + \omega}{2\alpha_2}, \quad a_{31} = \frac{2 + 3(\omega\alpha_3 - \alpha_2)}{6\alpha_2\alpha_3},$$

$$a_{32} = \frac{3\alpha_2 - 2 - 3\omega(\alpha_3 - \alpha_2)}{6\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2)}, \quad a_{33} = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)}, \quad (19)$$

$$\beta_{21} = \alpha_2, \quad \beta_{32} = \frac{\alpha_3 \cdot \alpha_3 - \alpha_2}{\alpha_2 \cdot 2 - 3\alpha_2}, \quad \beta_{31} = \alpha_3 - \beta_{32},$$

причому $\alpha_2 \cdot \alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)(2 - 3\alpha_2) \neq 0$.

II. Якщо $\alpha_2 = \alpha_3$ отримаємо:

$$a_{21} = -\frac{3}{4}(1 + \omega), \quad a_{22} = \frac{3}{4}(1 + \omega), \quad a_{31} = \frac{3}{4}\omega, \quad a_{32} = -\frac{3}{4}\omega - a_{33},$$

$$\alpha_2 = \alpha_3 = \frac{2}{3}, \quad \beta_{21} = \frac{2}{3}, \quad \beta_{31} = \frac{2}{3} - \frac{1}{4a_{33}}, \quad \beta_{32} = \frac{1}{4a_{33}}, \quad (20)$$

де a_{33} – довільне відмінне від нуля число.

III. Якщо $\alpha_2 = 2/3$, то

$$a_{21} = -\frac{3}{4}(1 + \omega), \quad a_{22} = \frac{3}{4}(1 + \omega), \quad a_{31} = -\frac{3}{4} - a_{33},$$

$$a_{32} = -\frac{3}{4}\omega, \quad \alpha_2 = \frac{2}{3}, \quad \alpha_3 = 0, \quad \beta_{21} = \frac{2}{3}, \quad (21)$$

$$\beta_{31} = -\frac{1}{4a_{33}}, \quad \beta_{32} = \frac{1}{4a_{33}}, \quad a_{33} \text{ – параметр } (a_{33} \neq 0).$$

Локальна похибка цих формул має вигляд:

$$R^{[3,0]} = \omega h^3 f \frac{Df}{y_n - hf} + O(h^4) \cong \omega h^2 k_1 \frac{\tilde{a}_{21}k_1 + \tilde{a}_{22}k_2}{y_{n-1}} + O(h^4).$$

Пари формул, що відповідають двом значенням ω , які відрізняються лише знаком, складають формули двостороннього методу, оскільки одна з них дає верхнє, а друга – нижнє наближення до точного розв'язку задачі (1). За наближений розв'язок приймаємо півсуму двосторонніх наближень. Модульний характер запропонованих методів дає можливість в кожній точці інтегрування отримати кілька наближень до точного розв'язку.

Числові результати. Кінетика адсорбції речовин пористими адсорбентами пов'язана з дифузією речовини у двох середовищах – у пористому просторі адсор-

бента і в адсорбованій фазі (дифузії по стінках пор). Відповідна математична модель описується диференціальним рівнянням (Akselrud & Altshuler, 1983):

$$\frac{\partial(C+C_a)}{\partial t} = D_c \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) + D_a \left(\frac{\partial^2 C_a}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial C_a}{\partial r} \right) \quad (22)$$

$$C|_R = \text{const}, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=0} = \left. \frac{\partial C_a}{\partial r} \right|_{r=0} = 0,$$

де: C – концентрація адсорбованої речовини у пористому просторі адсорбента; C_a – концентрація тієї ж речовини в адсорбованій фазі; D_c – коефіцієнт дифузії речовини в адсорбованому просторі; D_a – коефіцієнт дифузії, адсорбованої на стінках пор речовини; R – радіус; r – рухомий радіус; t – час. Зв'язок між C і C_a описує рівняння рівноваги

$$C = \frac{C_1 C_a}{C_\infty - C_a}, \quad (23)$$

де: C_∞ – адсорбована ємність (концентрація адсорбованої речовини, яка була б при $C \rightarrow \infty$); C_1 – концентрація речовини, за якої в адсорбованій фазі досягається місткість $\frac{1}{2} C_\infty$. Після введення безрозмірних величин

$$X = \frac{C_a}{C_\infty}, \quad Y = \frac{C}{C_\infty}, \quad \delta = \frac{C_1}{C_\infty}, \quad \alpha = \frac{D_a}{D_c}, \quad \tau = \frac{D_c t}{R^2}, \quad \phi = \frac{r}{R}, \quad (24)$$

рівняння (22) має вигляд

$$\frac{\partial(X+Y)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \frac{2}{\phi} \cdot \frac{\partial Y}{\partial \phi} + \alpha \left(\frac{\partial^2 X}{\partial \phi^2} + \frac{2}{\phi} \cdot \frac{\partial X}{\partial \phi} \right). \quad (25)$$

З рівняння рівноваги (23) і співвідношень (24) знайдемо, що

$$Y = \frac{\delta X}{1-X}. \quad (26)$$

Підставляючи значення Y із (26) в (25), отримаємо задачу

$$\frac{\partial X}{\partial \tau} = \frac{\delta + \alpha(1-X)^2}{\delta + (1-X)^2} \left(\frac{\partial^2 X}{\partial \phi^2} + \frac{2}{\phi} \frac{\partial X}{\partial \phi} \right) + \frac{2\delta}{(1+X)^3 + \delta(1-X)} \left(\frac{\partial X}{\partial \phi} \right)^2, \quad (27)$$

$$\left. \frac{\partial X}{\partial \phi} \right|_{r=0} = 0, \quad X(0, \phi) = 0, \quad X(\tau, 1) = \frac{\text{const}}{\delta + \text{const}}$$

Значення параметрів α і β змінюються в інтервалах $0 < \alpha \leq 10^{-2}$, $10^{-2} \leq \delta \leq 10^{-4}$.

Внаслідок розв'язання задачі (27) встановлено розподіл концентрацій в об'ємі пористої частинки адсорбента. Однак через малість розміру цієї частинки (її діаметр ≈ 3 мм) експериментально можна лише встановити місткість адсорбованої речовини в частинці у кожний момент часу. Тому безпосередній інтерес визначає інтеграл

$$W = 3 \int_0^1 X \phi^2 d\phi. \quad (28)$$

Задача (27) зводиться до системи звичайних диференціальних рівнянь. Використовуючи запропоновані числові методи знайдено наближені розв'язки, а потім, використовуючи формулу Сімпсона, обчислено інтеграл (28). Зауважимо, що спроби розв'язати задачу з використанням програми DIFSUB (Gol'berg, Zakharov & Filippov, 1976) не дали позитивних результатів. Наприклад, при $X(\tau, 1) = 0,99$; $\delta = 10^{-2}$; $\alpha > 5 \cdot 10^{-3}$, отримали від'ємні значення концентрації, чого не спостерігалось при використанні числових методів, що базуються на неперервних дробах. Обчислено шукані кінетичні характеристики, що дають змогу прогнозувати хід адсор-

бції. Як приклад, на рисунку показано зміну W від τ залежно від α (при $x(\tau, 1) = 0,99$, $\delta = 0,01$ і $X(\tau, 1) = 0,4$, $\delta = 0,01$ відповідно).

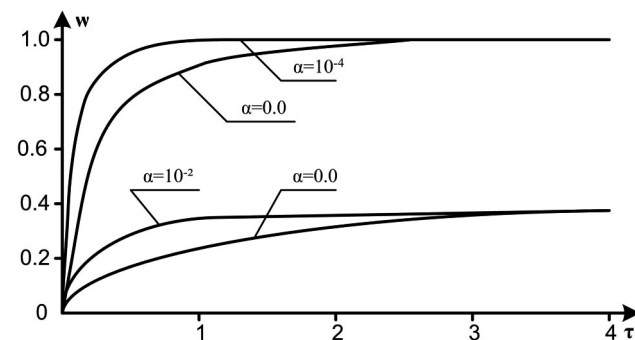


Рисунок. Залежність W від τ і від α

Результати обчислень показали, що із збільшенням α адсорбція відбувається швидше; якщо $\alpha=0$, то до збільшення δ процес малочутливий, але, якщо $\alpha \neq 0$, то із збільшенням δ адсорбція сповільнюється. Це дає можливість раціонально встановити той час, за який доцільно контактувати частинки адсорбента із середовищем, із якого адсорбується цільовий компонент.

Висновки:

- Для знаходження наближеного розв'язку задачі Коші побудовано три сімейства числових методів, що базуються на використанні ланцюгових дробів: при $\alpha_2 \cdot \alpha_3 (\alpha_3 - \alpha_2) (\alpha_2 - 2/3) \neq 0$ – формули (12), при $\alpha_2 = \alpha_3$ – формули (13), при $\alpha_2 = 2/3$, $\alpha_2 \neq \alpha_3$ – формули (14).
- Запропоновано набір коефіцієнтів для неявного методу типу Рунге-Кутта (формули (18)) і виписано функцію стійкості для цього методу.
- Побудовано явні двосторонні формули типу Рунге-Кутта (формули (19)-(21)), які у кожній точці інтегрування дають наближення до точного розв'язку зверху і знизу, а також величину головного члена похибки без додаткових звертань (обчислень) до правої частини диференціального рівняння.
- Виведені двосторонні формули (19)-(21) дають змогу на кожному кроці інтегрування зменшити кількість звертань до правої частини диференціального рівняння на 25% порівняно з традиційними методами Рунге-Кутта.
- Запропоновано числові методи, які реалізовані у вигляді підпрограм для ПК, використані для розв'язання задачі хімічної кінетики (27) та отримано якісні і кількісні характеристики досліджуваного процесу (див. рисунок).
- За використання сконструйованих алгоритмів в кожній точці отримуються декілька наближень до точного розв'язку, що дають інформацію щодо вибору кроку інтегрування і оцінки точності результату.
- Запропоновані числові методи можна використовувати під час складання пакетів прикладних програм для розв'язування звичайних диференціальних рівнянь та їх систем.

References

- Akselrud, G. A., & Altshuler, M. A. (1983). *Vvedeniye v kapilyarno-khimicheskuyu tekhnologiyu*. Moscow: Chemistry, 263 p. [In Russian].
- Aptekarev, A. I., & Yattselev, M. L. (2015). Pade approximants for functions with branch points-strong asymptotics of Nuttall – Stahl polynomials. *Acta Math.*, 215, 217–280.

- Baker, G. A., & Graves-Morris, Jr. P. (1996). *Pade Approximants*. (2nd ed.). Cambridge: Cambridge University Press.
- Bakhvalov, N. S. (1975). *Chislennyye metody*. (Vol. 1). Moscow: Science, 632 p. [In Russian].
- Brezinski, C., & Redivo-Zaglia, M. (2015). New representations of Pade, Pade-type, and partial Pade approximants. *J. Comput. Appl. Math.*, 284, 69–77.
- Butcher, J. C. (2008). *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*, London: Wiley & Sons.
- Butusov, D., Karimov, A., Tutueva, A., Kaplun, D., & Nepomuceno, E. (2019). The Effects of Padé Numerical Integration in Simulation of Conservative Chaotic Systems. *Entropy*, 21(4), 362–369. <https://doi.org/10.3390/e21040362>
- Dekker, K., & Werner, J. (1988). *Stability of Runge-Kutta Methods for Stiff Differential Equations*. Moscow: Mir. [Russian translation].
- Devyatko, V. I. (1963). O dvustoronnem priblizhenii pri chislennom integrirovanii differentsialnykh uravneniy. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*, 3(2), 254–265. [In Russian].
- Dobronets, B. S., & Shaydurov, V. V. (1990). *Dvustoronniye chislennyye metody*. Novosibirsk: Science, 206 p. [In Russian].
- Golberg, S. M., Zakharov, S. S., & Filippov, S. S. (1976). *O nekotorykh chislennykh metodakh resheniya zhestkikh sistem obyknovennykh differentsialnykh uravneniy*. Preprint. Moscow: IPM AN SSSR, №12, 48 p. [In Russian].
- Gorbunov, A. D., & Shakhov, Yu. A. (1963a). O priblizhennom reshenii zadachi Koshi dlya obyknovennykh differentsialnykh uravneniy s napered zadannym chislom vernykh znakov. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*, 3(2), 239–253. [In Russian].
- Gorbunov, A. D., & Shakhov, Yu. A. (1963b). O priblizhennom reshenii zadachi Koshi dlya obyknovennykh differentsialnykh uravneniy s napered zadannym chislom vernykh znakov. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*, 4(2), 426–433. [In Russian].
- Hairer, E., Norsett, S. P., & Wanner, G. (1990). *Solving Ordinary Differential Equations: Nonstiff Problems*. Berlin: Springer.
- Hofreither, C. A., (2019). *Unified View of Some Numerical Methods for Fractional Diffusion*. RICAM. Austrian Academy of Sciences. Report № 12, 21 p.
- Jones, W., & Tron, W. (1985). *Continued Fractions. Analytic Theory and Applications*. Moscow: Mir. [Russian translation].
- Krylov, V. I., Bobkov, V. V., & Monastyrnyy, P. I. (1977). *Vychislitel'nyye metody*. (Vol. 2). Moscow: Science, 400 p. [In Russian].
- Lozi, R., Pogonin, V. A., & Pchelintsev, A. N. (2016). A new accurate numerical method of approximation of chaotic solutions of dynamical model equations with quadratic nonlinearities. *Chaos Soliton. Fract.*, 91, 108–114. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2016.05.010>
- Lyashko, I. I., Makarov, V. L., & Skorobogatko, A. A. (1977). *Metody vychisleniy*. Kyiv: Higher school, 408 p. [In Russian].
- Nakatsukasa, Y., Sete, O., & Trefethen, L. N. (2018). The AAA Algorithm For Rational Approximation. *Siam J. Sci. Comput. Society For Industrial And Applied Mathematics*. 40(3), A1494–A1522. <https://doi.org/10.1137/16M1106122>
- Nepomuceno, E. G., & Mendes, E. M. (2017). On the analysis of pseudo-orbits of continuous chaotic nonlinear systems simulated using discretization schemes in a digital computer. *Chaos Soliton. Fract.*, 95, 21–32. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2016.12.002>
- Pelek, Ya. M., Mentynskiy, S. M., & Pelek, R. Ya. (2016). Nonlinear numerical methods for the solution of initial value problem for ordinary differential equations. *Scientific Bulletin of Mukachevo State University. Journal of Scientific Articles*, 20(15), 65–75.
- Pelek, Ya., Mentynskiy, S., Maherovska, T., Stolyarchuk, R., Kunynets, A., & Pakholok, B. (2019). Simulation and analysis of the magnetic field distribution in a magneto-solid layer. *The Experience of Designing and Application of CAD Systems. CADSM 2019: Proceedings of 15th International Conference*, Polyana-Svalyava, 5/36-5/40. Ukraine.
- Ramos, H., Singh, G., Kanwar, V., & Bhatia, S. (2017). An embedded 3 (2) pair of nonlinear methods for solving first order initial-value ordinary differential systems. *Numer. Algorithms*, 75, 509–529. <https://doi.org/10.1007/s11075-016-0209-5>
- Salikhov, N. I. (1962). O polyarnykh metodakh resheniya zadachi Koshi dlya sistem obyknovennykh differentsialnykh uravneniy. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*, 2(4), 515–528. [In Russian].
- Saravana, A., Magesh, N., & Christopher, A. J. (2018). A new computational method for smooth solution of first order nonlinear Cauchy problem. *International Journal of Advances in Mathematics*, 5, 14–24.
- Shakhov, Y. A. (1973). Solution of the Cauchy problem with a preassigned number of correct signs for an ordinary differential equation. Questions in computational mathematics. *Proceedings of the Computer Center of the Academy of Sciences of the Georgian SSR*, 12(1), 105–117. Tbilisi. [In Russian].
- Shmigelskiy, Y. A. (2017). Numerical simulation of dynamic systems by rectangular methods. *Computer simulation and software of information systems and technology: Materials of all Ukraine scientific conference*, (pp. 86–88). Rivne: Nuwee.
- Vaibhav, V. (2018). Higher order convergent fast nonlinear Fourier transform. *IEEE Photonics Technol. Lett.*, 30(8), 700–703. <https://doi.org/10.1109/LPT.2018.2812808>
- Zaiats, V., & Zaiats, M. (2018). Numerical Methods of second order with minimal error of discretization and their application to the analysis of high-quality systems. *Perspective Technologies and Methods in MEMS Design. MEMSTECH: Proceedings of 14th International Conference*, (pp. 264–267). Polyana-Lviv.

Ya. M. Pelek, I. S. Budz, A. V. Kunynets, S. M. Mentynskiy, B. M. Fil

Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine

METHODS FOR SOLVING THE INITIAL VALUE PROBLEM WITH A TWO-SIDED ESTIMATE OF THE LOCAL ERROR

Many applied problems, for example, when designing electronic circuits, automatic control systems, calculating the dynamics of mechanical systems, chemical kinetics problems, in the general case are reduced to solving nonlinear differential equations and their systems. The order of the system of differential equations depends on the selected model. Exact solutions to the studied problems can be obtained only in individual cases. Therefore, it is necessary to use approximate methods. In the study of mathematical models, there is a need to find not only an approximate solution, but also a guaranteed estimate of the error. S.A. Chaplygin has developed the basic principles for constructing bilateral methods that belong to the group of analytical methods and allows constructing two sequences of curves on each integration segment that approximate the desired integral curve from above and below. However, this method imposes rather strong restrictions on the right side of the differential equation and, in addition, it is difficult to implement on a PC. In computational mathematics, methods of a slightly different type are considered that are not strictly two-sided, but provide an approximation to the exact solution with a deficiency and an excess (upper and lower approximations) in the sense of the main member of the local error. These methods belong to the group of numerical methods, are easily implemented on a PC, and are more universal. In this case, the choice h and p (h – the integration step, p – the accuracy order of the numerical method) can be controlled by comparing, for example, the value of the main term of the error with the error value of the obtained approximation to the solution and monitoring these approximations with the requirements for the accuracy of the result. The use of traditional two-sided Runge-Kutta methods leads to a significant increase in the volume of calculations, since the construction of upper and lower approximations to the exact solution requires additional calls to the right side of the differential equation and, in addition, these methods do not

estimate the main member of the local error. Fractional-rational approximations are widely used in applied mathematics, since under appropriate conditions they give a high convergence rate, monotonous and two-sided approximations, and have a weak sensitivity to rounding error. In this paper a methods of the third order of accuracy for solving the Cauchy problem for ordinary differential equations are proposed. Calculated formulas of the second order of accuracy are derived, which allow one to obtain upper and lower approximations to the exact solution at each nodal point without additional calculations right-side of the differential equation and also estimate the magnitude of the main member of the local error. In the proposed approach, using only three calls to the right side of the differential equation, a method of third order of accuracy is constructed, as well as upper and lower approximations to the exact solution of the second order of accuracy. For the practical estimation of the error at each integration point in the case of using formulas of the Runge-Kutta type of the third order of accuracy, two-sided second order computational formulas are used. Note that when using the proposed calculation formulas in each grid node, several approximations to the exact solution will be obtained, the comparison of which gives useful information, in particular, in the question of choosing the integration step or in assessing the accuracy of the result.

Keywords: Cauchy problem; nonlinear approximation; continued fractions; bilateral methods; chemical kinetics; adsorption.