

УДК: 519.62

Двухстадийные однократные ROW-методы с комплексными коэффициентами для автономных систем ОДУ

П. Д. Ширков^а, А. М. Зубанов

Филиал «Дмитров» Международного университета природы, общества и человека «Дубна»,
141800, Московская область, г. Дмитров, ул. Махалина, д. 15

E-mail: ^аpdshirkov@gmail.com

Получено 23 апреля 2010 г.

Для автономных систем ОДУ рассмотрено простейшее подмножество двухстадийных схем Розенброка с комплексными коэффициентами, численная реализация которых требует одного LU-разложения и одного вычисления Якобиана за шаг интегрирования.

Проведено теоретическое исследование точности и устойчивости таких методов. Получены новые A-устойчивые методы 3-го порядка точности с различными свойствами и возможностью простой оценки главного термина локальной погрешности, что необходимо для автоматического выбора шага. Проведено тестирование новых методов.

Ключевые слова: жесткие системы, схемы с комплексными коэффициентами, A-устойчивость

Two-stage single ROW methods with complex coefficients for autonomous systems of ODE

P. D. Shirkov, A. M. Zubanov

*Dmitrov Branch of Dubna International University for Nature, Society, and Man,
15 Makhalina str., Dmitrov, Moscow Region, 141800, Russia*

Abstract. – The basic subset of two-stage Rosenbrock schemes with complex coefficients for numerical solution of autonomous systems of ordinary differential equations (ODE) has been considered. Numerical realization of such schemes requires one LU-decomposition, two computations of right side function and one computation of Jacoby matrix of the system per one step. The full theoretical investigation of accuracy and stability of such schemes have been done. New A-stable methods of the 3-rd order of accuracy with different properties have been constructed. There are high order L-decremented schemes as well as schemes with simple estimation of the main term of truncation error which is necessary for automatic evaluation of time step. Testing of new methods has been performed.

Keywords: stiff systems, schemes with complex coefficients, A-stability

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2010, vol. 2, no. 1, pp. 19–32 (Russian).

Введение

Различные приложения науки и техники приводят к задаче Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{f}(t, \vec{u}), \vec{u}(0) = \vec{u}_0, \quad (1)$$

где $\vec{u} = (u_1, \dots, u_n)^T$, $\vec{f} = (f_1, \dots, f_n)^T$, $\vec{u}_0 = (u_{01}, \dots, u_{0n})^T \in R^n$.

Проблема численного решения задач такого типа подробно описана в литературе (см., например, [Хайрер и др. 1990; Хайрер, Ваннер 1999] и приведенную там библиографию).

Современная теория и практика численных методов для систем ОДУ наиболее полно отражена в [Хайрер и др., 1990; Хайрер, Ваннер, 1999; Деккер, Вервер, 1988; Butcher, 1987; Butcher, 2003] и выделяет среди многообразия схем, предложенных для задач вида (1), методы, сочетающие в себе одновременно требования высокой точности, устойчивости и эффективной программной реализации. К ним, в частности, относятся *одношаговые схемы Рунге–Кутты (РК)* и их различные модификация, например *методы Розенброка*, которые в ряде работ рассматриваются как методы с комплексными коэффициентами (см., например, [Ширков, 1987; Ширков, 1988; Ширков, 1992а; Guzhev, Shirkov, 1992]). В отличие от схем с действительными коэффициентами, такие методы даже при небольшом числе стадий имеют представителей высокого порядка точности и улучшенные свойства устойчивости, что делает их пригодными для сложных прикладных задач, например жестких¹. Примеры успешного использования таких схем можно найти в [Гужев и др., 1992; Днестровская и др., 1991].

В настоящей работе рассмотрены двухстадийные методы, которые в наиболее общем случае записываются в виде [Ширков, 1992, а]:

$$\begin{aligned} & \left[\vec{E} - \tau\alpha \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}(t + c_2\tau, \vec{y}(t)) \right] \vec{V} = \vec{f}(t + c_1\tau, \vec{y}(t)), \\ & \left[\vec{E} - \tau\beta \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}(t + c_4\tau, \vec{y}(t) + \tau \operatorname{Re}(\gamma \vec{V})) \right] \vec{W} = \vec{f}(t + c_3\tau, \vec{y}(t) + \tau \operatorname{Re}(\delta \vec{V})) + \\ & + \tau \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}(t + c_5\tau, \vec{y}(t) + \tau \operatorname{Re}(\mu \vec{V})) \cdot (\rho \vec{V}), \\ & \vec{y}(t + \tau) = \vec{y}(t) + \tau \operatorname{Re}(p \vec{V} + q \vec{W}), \end{aligned} \quad (2)$$

где \vec{E} – единичная матрица, а $\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}$ – матрица Якоби исходной системы (1), вычисляемая, вообще говоря, при различных значениях независимого переменного t и искомого решения, τ – локальный шаг сетки численного интегрирования задачи (1), $\vec{y}(t)$ – ее разностное решение; c_i – абсциссы (они имеют вещественные значения), $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \mu, \rho, p$ и q – комплексные коэффициенты схемы, а \vec{V}, \vec{W} – неизвестные стадии, принимающие комплексные значения. Для их нахождения на каждой стадии необходимо решать систему линейных уравнений размерности n .

Цель настоящей работы – провести всестороннее теоретическое исследование наиболее эффективного (с точки зрения численной реализации) подмножества схем семейства (2). Ограничимся здесь

¹ Здесь и далее под «жесткими» будем понимать такие задачи, решения которых содержат компоненты с сильно отличающимися скоростями изменения; при этом рассматриваемый процесс необходимо проследить в течение времени заметного изменения его «медленных» составляющих. Попытки строгого определения явления «жесткости» можно найти, например, в [Ракитский и др., 1979].

методами, предназначенными для автономных задач ($\vec{f} = \vec{f}(\vec{u})$); в этом случае можно считать, что $c_i = 0, i = 1, \dots, 5$) и трудоемкость которых при переходе со слоя на слой определяется только:

- одним *LU*-разложением (такие методы по аналогии с неявными методами Рунге–Кутты [Деккер, Вервер, 1988] будем называть *однократными*),
- одним вычислением матрицы Якоби,
- двумя вычислениями правой части системы (1).

При таких условиях часть коэффициентов определяется сразу:

$$\beta = \alpha, \gamma = \rho = 0. \quad (3)$$

Заметим, что методы Розенброка с комплексными коэффициентами вида (2) для автономных задач с двумя *LU*-разложениями рассмотрены в [Ширков, 1992a]. В работе [Лимонов и др., 2009] приводятся те же схемы, но в записи их коэффициентов используется больше значащих цифр. Неполное исследование схем семейства (2) для неавтономных задач для случая $\rho = 0$ дано в [Ширков, 1987].

Точность и устойчивость

Условия порядка. Учитывая результаты работ [Ширков, 1987; Ширков, 1992a], запишем условия аппроксимации для методов (2), (3) до 4-го порядка включительно (опуская стандартный путь их получения, основанный на технике разложения в ряд Тейлора):

первый порядок аппроксимации ($O(\tau)$)

$$1 = \operatorname{Re}(p + q); \quad (4.1)$$

второй порядок аппроксимации ($O(\tau^2)$)

$$\frac{1}{2} = \operatorname{Re}[\alpha \cdot (p + q)] + \operatorname{Re}(\delta) \cdot \operatorname{Re}(q); \quad (4.2)$$

третий порядок аппроксимации ($O(\tau^3)$)

$$\frac{1}{3} = [\operatorname{Re}(\delta)]^2 \cdot \operatorname{Re}(q); \quad (4.3a)$$

$$\frac{1}{6} = \operatorname{Re}[\alpha^2 \cdot (p + q)] + \operatorname{Re}(\delta) \cdot \operatorname{Re}(\alpha \cdot q) + \operatorname{Re}(q) \cdot \operatorname{Re}(\alpha \cdot \delta); \quad (4.3b)$$

четвертый порядок аппроксимации ($O(\tau^4)$)

$$\frac{1}{4} = [\operatorname{Re}(\delta)]^3 \cdot \operatorname{Re}(q); \quad (4.4a)$$

$$\frac{1}{8} = [\operatorname{Re}(\alpha \cdot \delta)] \cdot \operatorname{Re}(q) \cdot \operatorname{Re}(\delta); \quad (4.4b)$$

$$\frac{1}{12} = [\operatorname{Re}(\delta)]^2 \cdot \operatorname{Re}(\alpha \cdot q); \quad (4.4c)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{24} = & \operatorname{Re}[\alpha^3 \cdot (p + q)] + \operatorname{Re}(\alpha \cdot q) \cdot \operatorname{Re}(\alpha \cdot \delta) + \\ & + \operatorname{Re}(\alpha^2 \cdot q) \cdot \operatorname{Re}(\delta) + \operatorname{Re}(q) \cdot \operatorname{Re}(\alpha^2 \cdot p). \end{aligned} \quad (4.4d)$$

Отметим здесь особо необходимость в двух вычислениях правой части. Если ограничиться одним, то придется положить $\delta = 0$, что неминуемо влечет невозможность построения метода 3-го порядка точности (4.3а). А для достижения 2-го порядка даже в неавтономном случае достаточно 1 стадии [Ширков, 1987].

Справедливо следующее утверждение, ограничивающее максимальный порядок точности семейства схем (2), (3).

Теорема 1. *Двухстадийные схемы Розенброка с комплексными коэффициентами с одним LU-разложением, одним вычислением матрицы Якоби и двумя вычислениями правой части системы (1) не могут иметь порядок выше третьего.*

Доказательство. Для того чтобы метод имел 4-й порядок, необходимо одновременное выполнение всех восьми соотношений (4.1)–(4.4), которые образуют систему из 8 нелинейных уравнений относительно величин: $\text{Re}(\alpha)$, $\text{Im}(\alpha)$, $\text{Re}(\delta)$, $\text{Im}(\delta)$, $\text{Re}(p)$, $\text{Im}(p)$, $\text{Re}(q)$, $\text{Im}(q)$. Покажем, что эта система противоречива.

Учтём, что уравнения (4.3а), (4.4а) и (4.1) сразу дают:

$$\delta_0 \equiv \text{Re}(\delta) = \frac{3}{4}; \quad q_0 \equiv \text{Re}(q) = \frac{16}{27}; \quad p_0 \equiv \text{Re}(p) = \frac{11}{27}. \quad (5)$$

Положим теперь

$$\alpha_0 \equiv \text{Re}(\alpha) = w, \quad \alpha_1 \equiv \text{Im}(\alpha) = v. \quad (6)$$

Тогда из (4.4b), (4.4c) и (4.2) следует, что:

$$\delta_1 \equiv \text{Im}(\delta) = \frac{24w-9}{32v}; \quad q_1 \equiv \text{Im}(q) = \frac{16w-4}{27v}; \quad p_1 \equiv \text{Im}(p) = \frac{22w+5}{54v}. \quad (7)$$

После подстановки полученных соотношений в (4.3b) получим, что

$$v^2 = -w^2 + \frac{1}{9} \cdot w + \frac{1}{9} \geq 0. \quad (8)$$

Тогда (с учётом (5)–(8)) последнее из уравнений системы (4.4d) даёт $w = -\frac{1081}{2521}$, что противоречит (8). Теорема доказана.

Следовательно, для получения методов с приемлемыми свойствами придется отказаться либо от всей группы уравнений (4.4), либо от её части. Значит, можно привлечь к рассмотрению какие-то другие требования на свойства схем, например – устойчивости.

А-устойчивость и затухание. Эти свойства были введены с целью повышения надежности алгоритмов для случая сложных задач, например жестких.

В этом разделе описаны некоторые понятия теории устойчивости одношаговых методов, которые понадобятся для сравнения различных схем.

Для анализа устойчивости методов для автономных задач используется модельная линейная задача [Деккер, Вервер, 1988]

$$f(u) = \lambda \cdot u; \quad n = 1. \quad (9)$$

Если применить любой s -стадийный одношаговый метод (Рунге–Кутты или Розенброка) к задаче (9), то разностное решение может быть представлено в виде

$$y(t + \tau) = R(z) \cdot y(t); \quad z = \tau \cdot \lambda, \quad (10)$$

где $R(z)$ – рациональная функция, называемая *функцией устойчивости* метода [Хайрер, 1999]. При этом в случае s -стадийных схем с комплексными коэффициентами $R = P_{2s}(z)/Q_{2s}(z)$, где $P_{2s}(z)$ и $Q_{2s}(z)$ – многочлены степени $2s$.

Определение 1. *Метод называется А-устойчивым, если $|R(z)| \leq 1$ для всех $\text{Re}(z) \leq 0$. В этом случае функция устойчивости также называется А-устойчивой.*

Из *A-устойчивости* метода следует, что $|y(t+\tau)| \leq |y(t)|$ для любой пары (τ, λ) , удовлетворяющей условию $\tau\lambda = z$. Таким образом, разностное решение повторяет свойство монотонности (невозрастания при $\lambda \leq 0$) точного решения соответствующей модельной задачи (9).

Для жестких задач (см., например, [Хайрер, 1999; Гужев и др., 1992; Shirkov, 1994]) полезно иметь схемы с более сильным свойством устойчивости, которое повторяет поведение точного экспоненциального решения модельной задачи (9) при $\tau\lambda \rightarrow -\infty$.

Определение 2. Метод называется *L-устойчивым*, если он *A-устойчив* и $|R(z)| \rightarrow 0$ при $\text{Re}(z) \rightarrow -\infty$. В этом случае функция устойчивости (9) также называется *L-устойчивой*. При этом будем говорить, что метод имеет порядок *L-затухания*, равный m , если $|R(z)| = O(|z|^{-m})$ при $|z| \rightarrow \infty$ (для обозначения этого свойства ниже используется сокращенная запись вида *L-m*).

Существует некоторое противоречие между эффективной реализацией метода, его порядком точности, свойствами *A-устойчивости* и *L-затухания* [Ширков, 1992б; Ширков, 2001]. Так, среди неявных методов Рунге–Кутты есть подмножества *A-устойчивых* методов с 1 и 2 порядком *L-затухания* [Хайрер и др., 1990; Хайрер, Ваннер, 1999]: это методы Радю и Лобатто. Для диагонально-неявных методов Рунге–Кутты (и как следствие – для ROW-методов, являющихся подмножеством методов типа Розенброка) достигим только 1-й порядок *L-затухания*. В [Ширков, 1992а] для случая методов Розенброка с комплексными коэффициентами получены *A*(α)-устойчивые схемы с высоким порядком точности и затухания, однако они требуют двух (2) *LU*-разложений на каждый шаг численного интегрирования.

Для схем исходного семейства (2), (3) функция устойчивости имеет вид:

$$R(z) = \frac{1 - A_1 \cdot z + A_2 \cdot z^2 - A_3 \cdot z^3 + A_4 \cdot z^4}{(1 - \alpha \cdot z)^2 \cdot (1 - \alpha^* \cdot z)^2}, \quad \alpha^* = \text{Re}(\alpha) - \text{Im}(\alpha) \cdot i. \quad (11)$$

Здесь действительные коэффициенты A_i задаются равенствами:

$$A_1 = 2 \cdot \text{Re}(\alpha + \alpha^*) - \text{Re}(p + q); \quad (12.1)$$

$$A_2 = (|\alpha|^2 - \text{Re}(\alpha^* \cdot p)) + (|\alpha|^2 - \text{Re}(\alpha^* \cdot q)) + (\text{Re}(\alpha + \alpha^*) - \text{Re}(p)) \cdot (\text{Re}(\alpha + \alpha^*) - \text{Re}(q)) + \text{Re}(\delta - p) \cdot \text{Re}(q); \quad (12.2)$$

$$A_3 = (|\alpha|^2 - \text{Re}(\alpha^* \cdot p)) \cdot (\text{Re}(\alpha + \alpha^*) - \text{Re}(q)) + (|\alpha|^2 - \text{Re}(\alpha^* \cdot q)) \cdot (\text{Re}(\alpha + \alpha^*) - \text{Re}(p)) + \text{Re}(\alpha^* \cdot (\delta - p)) \cdot \text{Re}(q) + \text{Re}(\alpha^* \cdot q) \cdot \text{Re}(\delta - p); \quad (12.3)$$

$$A_4 = (|\alpha|^2 - \text{Re}(\alpha^* \cdot p)) \cdot (|\alpha|^2 - \text{Re}(\alpha^* \cdot q)) + \text{Re}(\alpha^* \cdot (\delta - p)) \cdot \text{Re}(\alpha^* \cdot q). \quad (12.4)$$

Кроме функции устойчивости, рассмотрим также так называемую функцию внутренней устойчивости, которая играет важную роль в исследовании устойчивости нелинейных систем [Деккер, Вернер, 1988] в том случае, когда классическая константа Липшица нелинейной части слабо зависит от свойств жесткости исходной задачи. Для схем семейства (2), (3) эта функция имеет вид:

$$R_{in}(z) = \frac{1 - (\text{Re}(\alpha + \alpha^*) - \text{Re}(\delta)) \cdot z + (|\alpha|^2 - \text{Re}(\alpha^* \cdot \delta)) \cdot z^2}{(1 - \alpha \cdot z) \cdot (1 - \alpha^* \cdot z)}. \quad (13)$$

А-устойчивые методы 1-го и 2-го порядка L -затухания

Изучим возможность существования А-устойчивых L -затухающих схем среди методов семейства (2), (3).

А-устойчивый метод с первым порядком затухания. Добавим к системе (4.1), (4.2), (4.3), (4.4a)–(4.4c) условие 1-го порядка затухания ($A_4 = 0$)

$$(|\alpha|^2 - \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot p)) \cdot (|\alpha|^2 - \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot q)) + \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot (\delta - p)) \cdot \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot q) = 0. \quad (14)$$

С учетом соотношений (5)–(8), которым должны удовлетворять коэффициенты метода, (14) преобразуется к квадратному уравнению

$$1016 \cdot w^2 - 484 \cdot w + 39 = 0,$$

с двумя действительными корнями, не противоречащими уравнению (8)

$$w_1 = \frac{121 + \sqrt{4735}}{508}; \quad w_2 = \frac{121 - \sqrt{4735}}{508},$$

однако второй из них приводит к методу, который не является А-устойчивым. Его рассматривать не будем.

Используя первое значение корня уравнения (14) и равенства (5), последовательно из соотношений (8), (6) и (7) получим два комплексно сопряженных набора коэффициентов (табл. 1). Здесь и далее J – Якобиан системы.

На (рис. 1) изображены изолинии множеств $|R(x + i \cdot y)| = 1$ (рис. 1a) и $|R_{in}(x + i \cdot y)| = 1$ (рис. 1б) для функции устойчивости и функции внутренней устойчивости этого метода соответственно. Так как полюса обеих комплексных функций $R(z)$ и $R_{in}(z)$ лежат в положительной полуплоскости ($x > 0$), то вне замкнутых множеств $|R(z)| < 1$ и $|R_{in}(z)| < 1$. Следовательно, обе функции А-устойчивы.

Таблица 1

Коэффициенты метода № 1 и его свойства

порядок	3 (уточненный – 4)	e_{loc}	$C_1 \tau^4 J^3 f + O(\tau^5)$
		C_1	0.1541653283405416
$R(z)$	<i>А-устойчива, L-1</i>	$R_{in}(z)$	<i>А-устойчива</i>
α_0	$\frac{121 + \sqrt{4735}}{508}$	p_0	11/27
α_1	$\frac{\pm \sqrt{145148 - 1670\sqrt{4735}}}{1524}$	p_1	$\frac{\pm(2601 + 11\sqrt{4735})}{9\sqrt{145148 - 1670\sqrt{4735}}}$
δ_0	3/4	q_0	16/27
δ_1	$\frac{\pm 9(-139 + 2\sqrt{4735})}{8\sqrt{145148 - 1670\sqrt{4735}}}$	q_1	$\frac{16(-6 + \sqrt{4735})}{9\sqrt{145148 - 1670\sqrt{4735}}}$

Таким образом, построена А-устойчивая схема 3-го порядка точности и первого порядка затухания. Ее локальная погрешность имеет вид

$$\overline{e_{loc}} = C_1 \cdot \tau^4 \left(\frac{\partial \overline{f}}{\partial u} \right)^3 \overline{f} + O(\tau^5), \quad C_1 = 0.1541653283405416092890 \quad (15)$$

(все знаки в записи десятичных дробей здесь и далее являются верными).

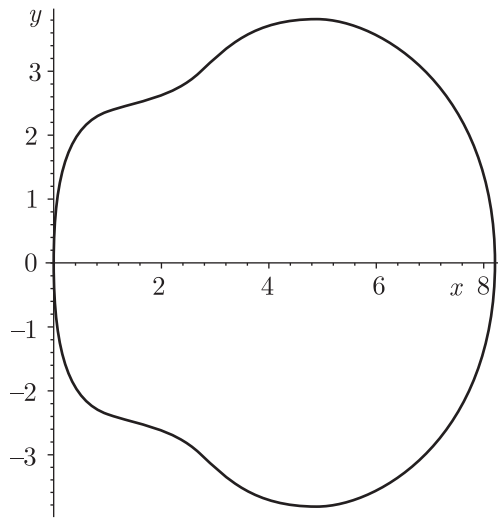


Рис. 1а. Изолиния $|R(z)| = 1$ (метод № 1)

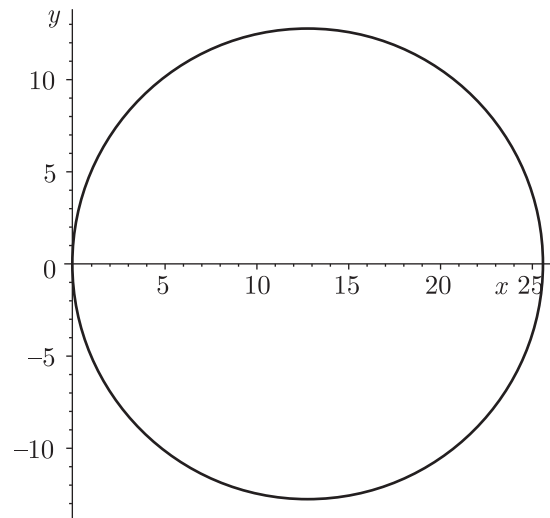


Рис. 1б. Изолиния $|R_{in}(z)| = 1$ (метод № 1)

Оценка (15) может не только использоваться для контроля погрешности и автоматического выбора шага численного интегрирования, но и для повышения точности численного расчета (см., например, [Кочетков, Ширков, 2001; Ширков, 2008]). Действительно, уточняя искомый вектор $\bar{y}(t)$ по правилу

$$\bar{y}_*(t + \tau) = \bar{y}(t + \tau) + C_I \cdot \tau^4 \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial u} \right)^3 \bar{f},$$

фактически получим метод 4-го порядка. Его численная реализация на каждом шаге требует 3-х умножений матрицы на вектор. Такие схемы названы в [Кочетков, Ширков, 2001] *методами с точной оценкой локальной погрешности*.

А-устойчивый метод со вторым порядком затухания. Чтобы построить такой метод, откажемся от условия (4.3b). Формально можно получить метод 2-го порядка, но используя технику работ [Кочетков, Ширков, 2001; Ширков, 2008], описанную выше, фактически за счет дополнительных вычислительных затрат (связанных с умножением матрицы Якоби на вектор правых частей) его последовательные уточнения будут иметь соответственно 3-й и 4-й порядок точности.

Добавим к системе (4.1), (4.2), (4.3a), (4.4a)–(4.4c) условие 1-го порядка (14) и 2-го порядка затухания ($A_3 = 0$):

$$\begin{aligned} & (|\alpha|^2 - \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot p)) \cdot (\operatorname{Re}(\alpha + \alpha^*) - \operatorname{Re}(q)) + \\ & (|\alpha|^2 - \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot q)) \cdot (\operatorname{Re}(\alpha + \alpha^*) - \operatorname{Re}(p)) + \\ & + \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot (\delta - p)) \cdot \operatorname{Re}(q) + \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot q) \cdot \operatorname{Re}(\delta - p) = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Тогда с учетом соотношений (5)–(7) условия (14) и (16) преобразуются в систему двух уравнений относительно величин v и w

$$\begin{cases} v^4 + (2 \cdot w^2 - 2 \cdot w + \frac{1}{18}) \cdot v^2 + w^4 - 2 \cdot w^3 + \frac{11}{6} \cdot w^2 - \frac{5}{9} \cdot w + \frac{1}{24} = 0; \\ (4 \cdot w - 1) \cdot v^2 + 4 \cdot w^3 - 5 \cdot w^2 + \frac{17}{9} \cdot w - \frac{5}{18} = 0. \end{cases}$$

Исключая v^2 из второго и подставляя его значение в первое, получим систему независимых уравнений для определения неизвестных величин v и w

$$\begin{cases} v^2 = \frac{72 \cdot w^3 - 90 \cdot w^2 + 34 \cdot w - 5}{18 \cdot (4 \cdot w - 1)} \geq 0; \\ 8064 \cdot w^4 - 9216 \cdot w^3 + 3912 \cdot w^2 - 788 \cdot w + 67 = 0. \end{cases} \quad (17)$$

Легко показать, что второе из уравнений имеет только два действительных корня:

$$w_1 = 0.2855614274375089530561;$$

$$w_2 = 0.4860352758841230179855,$$

каждый из которых не противоречит первому уравнению (17).

Используя полученные значения и равенства (5), последовательно из соотношений (6) и (7) получим две пары комплексно сопряженных наборов коэффициентов, один из которых (соответствующий значению w_2) приведен в (табл. 2).

На (рис. 2) изображены изолинии множеств $|R(x + i \cdot y)| = 1$ (рис. 2а) и $|R_{in}(x + i \cdot y)| = 1$ (рис. 2б) для функции устойчивости и функции внутренней устойчивости этого метода. Так как полюса обеих комплексных функции $R(z)$ и $R_{in}(z)$ лежат в положительной полуплоскости ($x > 0$), то вне замкнутых множеств $|R(z)| < 1$ и $|R_{in}(z)| < 1$. Следовательно, обе функции *A-устойчивы*.

Таблица 2

Коэффициенты метода № 2 и его свойства

Порядок	2 (уточненный – 3, 4)	e_{loc}	$C_1 \tau^3 J^2 f + C_2 \tau^4 J^3 f + O(\tau^5)$
C_1	0.1575404516953678	C_2	0.4457029993477909
$R(z)$	<i>A-устойчива, L-2</i>	$R_{in}(z)$	<i>A-устойчива</i>
α_0	0.4860352758841230	p_0	11/27
α_1	± 0.2939816200809222	p_1	± 0.9885208611650410
δ_0	$\frac{3}{4}$	q_0	16/27
δ_1	± 0.2832709639812494	q_1	± 0.4757874184140441

Таким образом, построена *A-устойчивая* схема 2-го порядка точности и 2-го порядка затухания. Ее локальная погрешность имеет вид

$$\overline{e_{loc}} = C_{II,1} \tau^3 \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial u} \right)^2 \bar{f} + C_{II,2} \tau^4 \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial u} \right)^3 \bar{f} + O(\tau^5), \quad (18)$$

$$C_{II,1} = 0.1575404516953678247848,$$

$$C_{II,2} = 0.4457029993477909179587.$$

Оценка (18) может быть использована для контроля погрешности метода, автоматического выбора шага численного интегрирования и для повышения точности численного расчета. Уточняя искомый вектор $\bar{y}(t)$ по правилам:

$$\overline{y_{II,1}}(t + \tau) = \bar{y}(t + \tau) + C_{II,1} \tau^3 \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial u} \right)^2 \bar{f}, \quad (19.1)$$

$$\overline{y_{II,2}}(t + \tau) = \bar{y}(t + \tau) + C_{II,1} \tau^3 \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial u} \right)^2 \bar{f} + C_{II,2} \tau^4 \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial u} \right)^3 \bar{f}, \quad (19.2)$$

получим методы 3-го и 4-го порядка точности. Их численная реализация на каждом шаге дополнительно требует соответственно 2-х и 3-х умножений матрицы на вектор.

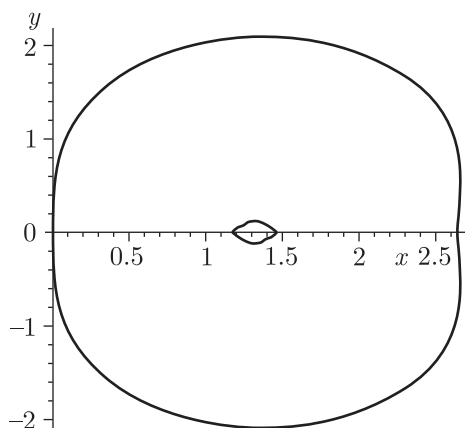


Рис. 2а. Изолиния $|R(z)| = 1$ (метод № 2)

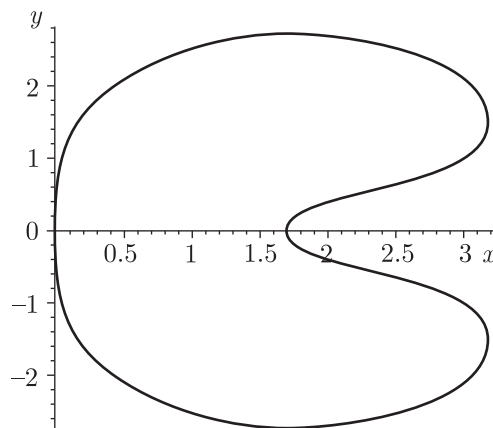


Рис. 2б. Изолиния $|R_m(z)| = 1$ (метод № 2)

A-устойчивый метод с первым порядком затухания обеих функций устойчивости. Чтобы построить такой метод, добавим к системе (4.1), (4.2), (4.3а), (4.4а)–(4.4с) условие 1-го порядка затухания функции устойчивости (14) и функции внутренней устойчивости (13):

$$|\alpha|^2 - \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot \delta) = 0. \quad (20)$$

Тогда с учетом соотношений (5)–(7) это условие преобразуется к виду:

$$v^2 = -w^2 + \frac{3}{2} \cdot w - \frac{9}{32} \geq 0. \quad (21)$$

Следовательно, соотношение (14) принимает вид уравнения

$$\frac{37}{36} \cdot w^2 - \frac{217}{288} \cdot w + \frac{323}{3072} = 0,$$

решением которого являются два простых рациональных корня:

$$w_1 = \frac{3}{16} \text{ и } w_2 = \frac{323}{592}.$$

Так как первый из них противоречит уравнению (21), то используем значение w_2 и равенства (5) для получения из соотношений (6) и (7) пары комплексно сопряженных наборов коэффициентов (табл. 3).

Таблица 3

Коэффициенты метода № 3 и его свойства

порядок	2 (уточненный – 3, 4)	e_{loc}	$C_1 \tau^3 J^2 f + C_2 \tau^4 J^3 f + O(\tau^5)$
C_1	0.3654279279279279	C_2	0.8569018921949978
$R(z)$	<i>A-устойчива, L-1</i>	$Rin(z)$	<i>A-устойчива, L-1</i>
α_0	$\frac{323}{592}$	p_0	11/27
α_1	$\pm \frac{\sqrt{83927}}{592}$	p_1	$\pm \frac{5033\sqrt{83927}}{2266029}$
δ_0	$\frac{3}{4}$	q_0	16/27
δ_1	$\pm \frac{303\sqrt{83927}}{335708}$	q_1	$\pm \frac{2800\sqrt{83927}}{2266029}$

Можно показать, что функция устойчивости и функция внутренней устойчивости этого метода являются *A-устойчивыми* (это простое обоснование опустим).

Таким образом, построена *A-устойчивая* схема 2-го порядка точности и 1-го порядка затухания как функции устойчивости, так и функции внутренней устойчивости. Её локальная погрешность имеет вид (18) с константами, приведенными в (табл. 3).

Уточняя (как и ранее) искомый вектор $\bar{y}(t)$ по правилам (19.1) и (19.2) получаем соответственно методы 3-го и 4-го порядка точности.

A-устойчивый метод 3-го порядка L-затухания

Все методы предыдущего раздела имели порядок затухания не выше второго, но позволяли просто оценивать локальную погрешность и на её основе повышать порядок точности схемы и строить стратегии выбора шага численного интегрирования. Изучим, какой максимальный порядок затухания может иметь метод 3-го порядка точности.

Формально имеется достаточное количество переменных (напомним, что их 8) для того, чтобы удовлетворить 4-м уравнениям порядка (4.1)–(4.3) и 4-м условиям максимального порядка затухания ($A_i = 0$, $i = 1, 2, 3, 4$). Однако фактически эти соотношения противоречивы. Покажем это.

Введем в рассмотрение дополнительные величины. Пусть:

$$X = \operatorname{Re}(\alpha \cdot p); Y = \operatorname{Re}(\alpha \cdot q); Z = \operatorname{Re}(\alpha \cdot \delta). \quad (22)$$

Тогда, используя обозначения (6), получим

$$\begin{cases} \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot p) = 2 \cdot w \cdot (1 - q_0) - X; \\ \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot q) = 2 \cdot w \cdot q_0 - Y; \\ \operatorname{Re}(\alpha^* \cdot \delta) = 2 \cdot w \cdot \delta_0 - Z. \end{cases} \quad (23)$$

Эти соотношения будем использовать для определения мнимых частей коэффициентов p , q и δ .

Из соотношений (4.2), (4.3b) выразим величины Y и Z через X , v , w , q_0 , δ_0 и (с учётом (23)) подставим в условия *L-затухания* 2-го ($A_3 = 0$, (16)) и 3-го ($A_2 = 0$) порядка. Получим два уравнения, связывающие величины v и w :

$$\begin{cases} (4 \cdot w - 2) \cdot v^2 + 4 \cdot w^3 - 6 \cdot w^2 + 2 \cdot w - \frac{1}{6} = 0; \\ 2 \cdot v^2 + 6 \cdot w^2 - 4 \cdot w + \frac{1}{2} = 0. \end{cases}$$

Система легко решается:

$$\begin{cases} v^2 = -3 \cdot w^2 + 2 \cdot w - \frac{1}{4} \geq 0; \\ 8 \cdot w^3 + 8 \cdot w^2 - 3 \cdot w + \frac{1}{3} = 0, \end{cases} \quad (24)$$

при этом второе уравнение имеет единственный действительный корень (и он не противоречит первому уравнению)

$$w = 0.1867308533646001344323. \quad (25)$$

Однако это значение противоречит условию *L-затухания* 4-го ($A_1 = 0$) порядка. Тем самым доказана следующая теорема.

Теорема 2. Двухстадийные схемы Розенброка с комплексными коэффициентами с одним LU -разложением, одним вычислением матрицы Якоби и двумя вычислениями правой части системы (1) не могут одновременно иметь 3-й порядок точности и 4-й порядок L -затухания.

Построим теперь схемы третьего порядка L -затухания. Пока не определены значения двух параметров – q_0 , δ_0 и вспомогательной величины X . Первые два связаны соотношением (4.3а). В качестве недостающего условия возьмем соотношение (14) (оно связано с 1-м порядком L -затухания) и уравнение (20), обеспечивающее 1-й порядок затухания функции внутренней устойчивости.

Решим уравнение (4.3а) относительно q_0 , а уравнение (20) относительно X . Тогда (с учётом (22) и (23)) уравнение (14) преобразуется к виду:

$$(8 \cdot w^2 - 8 \cdot w + 1)(B_3 \cdot \delta_0^3 + B_2 \cdot \delta_0^2 + B_1 \cdot \delta_0 + B_0) = 0. \quad (26)$$

Здесь

$$\begin{aligned} B_3 &= 24 \cdot w^2 - 3; & B_2 &= -24 \cdot w^2 + 12 \cdot w + 3; \\ B_1 &= -8 \cdot w; & B_0 &= -8 \cdot w^2 + 8 \cdot w - 1. \end{aligned}$$

В силу (25) первый множитель (26) отличен от нуля; это уравнение имеет единственный действительный корень

$$\delta_0 = 1.65484443851685150677714.$$

Теперь последовательно можно вычислить значения всех коэффициентов (табл. 4). Полученная схема также является A -устойчивой (обоснование этого факта опустим), в то время как ее функция внутренней устойчивости (несмотря на 1-й порядок L -затухания!) устойчива только на ограниченном множестве (внутренняя часть овала (рис. 3)). Это ее главный недостаток. Другим ее недостатком является отсутствие простого способа оценки локальной погрешности. Для этого придётся, например, сгущать сетку интегрирования и пользоваться локальной экстраполяцией Рунге–Ричардсона.

Таблица 4

Коэффициенты метода № 4 и его свойства

порядок	3	e_{loc}	-
$R(z)$	A -устойчива, L -3	$Rin(z)$	НЕ A -устойчива, L -1
α_0	0.1867308533646001	p_0	0.8782793127461838
α_1	± 0.1373188695496175	p_1	± 0.8030721661968408
δ_0	1.6548444385168515	q_0	0.1217206872538162
δ_1	± 1.8590717466829718	q_1	± 0.01138505040995394

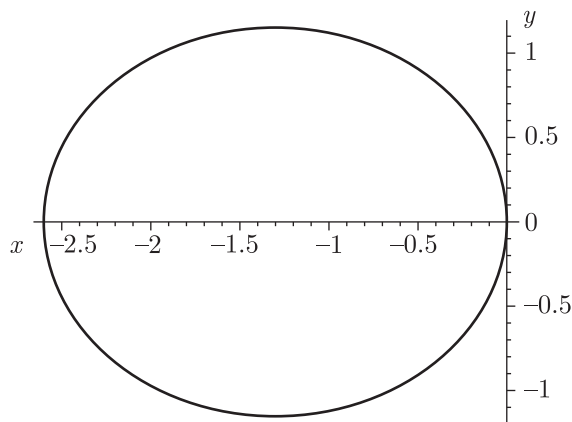


Рис. 3. Область устойчивости функции $R_m(z)$ (метод № 4)

Нелинейный тест

Построенные методы (в силу свойств устойчивости) представляют практический интерес и требуют детального численного тестирования, хотя можно предположить, что схема № 1 будет иметь некоторые преимущества по сравнению с остальными.

Для демонстрации надежности полученных методов были проведены тестовые расчеты на примере нелинейной системы Ван-дер-Поля:

$$\begin{aligned}\frac{du_1}{dt} &= u_2, u_1(0) = 2; \\ \frac{du_2}{dt} &= \mu \cdot (1 - u_1^2) \cdot u_2 - u_1, u_2(0) = 0.\end{aligned}$$

Фрагмент численного решения системы для $\mu = 100$ («жесткость» решения порядка 10^4) в окрестности переходного участка приведен на рис. 4 (по горизонтальной оси отложено время, по вертикальной – компоненты решения.)

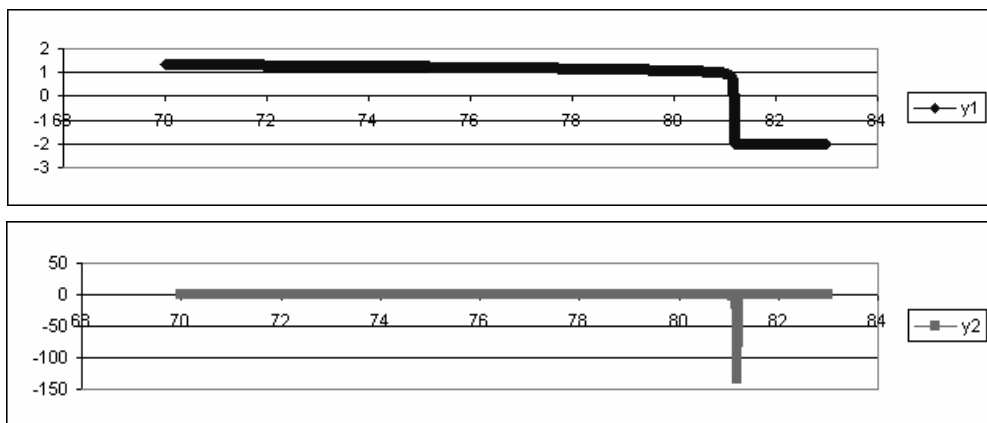


Рис. 4. Модель Ван-дер-Поля ($\mu = 100$): решение в окрестности пограничного слоя

Изучалось прохождение методом пограничного слоя и адекватность работы стратегии выбора шага, основанной на представлении главного термина локальной погрешности в виде (15), (18) и (19). Как и ожидалось, наиболее надежные и адекватные результаты были получены методом № 1. В частности, при выходе из пограничного слоя у этого метода практически отсутствовали осцилляции в значениях выбираемого шага. Они проявлялись лишь при грубых значениях требуемой точности ($\varepsilon \sim 10^{-3}$; см. рис. 5).

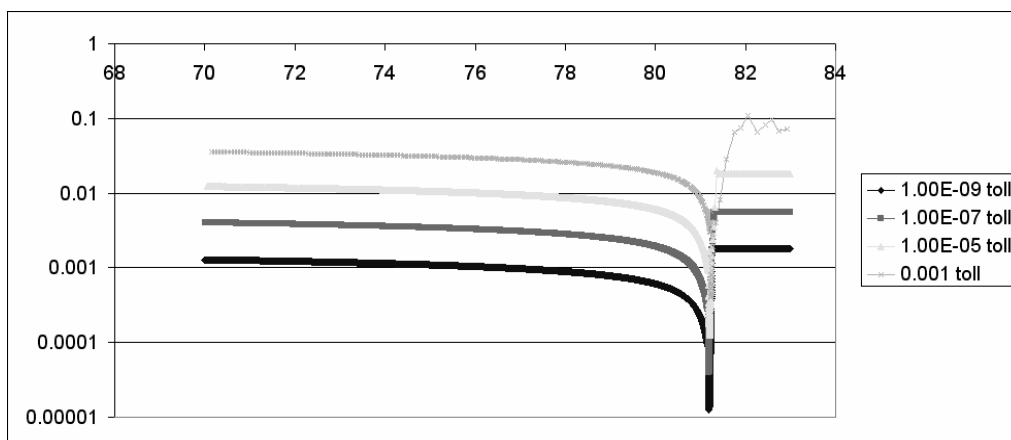


Рис. 5. Модель Ван-дер-Поля, ($\mu = 100$): эволюция шага в окрестности пограничного слоя

На (рис. 5) для модели Ван-дер-Поля ($\mu = 100$) приведена эволюция шага, полученная методом № 1 (табл. 1) в окрестности пограничного слоя. По горизонтальной оси отложено время, по вертикальной – величина шага интегрирования. Различные кривые соответствуют различным значениям задаваемой погрешности (большой погрешности соответствует кривая, которая лежит выше).

Список литературы

- Гужев Д. С., Зайферт П., Калиткин Н. Н., Ширков П. Д. Численные методы для задач химической кинетики с диффузией // «Математическое моделирование». – 1992. – Т. 4, № 1. – С. 98–110.
- Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге–Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. – М.: «Мир», 1988.
- Днестровская Е. Ю., Гужев Д. С., Калиткин Н. Н., Ритус И. В. Численные методы для задач химической кинетики с диффузией // М.: Препринт ВЦММ АН СССР. – 1991. – № 12. – С. 12.
- Кочетков К. А., Ширков П. Д. L -затухающие ROW-методы с точной оценкой локальной погрешности // Математическое моделирование. – 2001. – Т. 13, № 08. – С. 38–43.
- Лимонов А. Г., Альшин А. Б., Альшина Е. А. Двухстадийные комплексные схемы Розенброка для жестких систем // «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.» – 2009. – Т. 49, № 2. – С. 270–287.
- Ракитский Ю. В., Устинов С. М., Черноуцкий И. Г. Численные методы решения жестких систем. – М.: «Наука», 1979.
- Хайрер Э., Норсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: «Мир», 1990.
- Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: «Мир», 1999.
- Ширков П. Д. Разностные схемы для численного интегрирования неавтономных жестких ОДУ // «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.» – 1987. – Т. 27, № 1. – С. 131–135.
- Ширков П. Д. Схемы Розенброка с комплексными коэффициентами для жестких систем ОДУ // «Численное решение ОДУ», Москва, ИПМ им. М. Келдыша АН СССР. – 1988. – С. 11–17.
- Ширков П. Д. Оптимальные L -затухающие двухстадийные схемы Розенброка с комплексными коэффициентами для ОДУ // «Математическое моделирование». – 1992. – Т. 4, № 8. – С. 47–57.
- Ширков П. Д. L -устойчивость диагонально-неявных схем Рунге–Кутты и методов Розенброка // «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.» – 1992. № 9. – С. 1422–1432.
- Ширков П. Д. AN -устойчивость ROW методов // Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. – 2001. – № 16. – С. 20.
- Ширков П. Д. Одношаговые методы интегрирования систем ОДУ с точной оценкой локальной погрешности // Системный анализ в науке и образовании [Электронный ресурс]. / Электрон. журн. – 2008. Вып. 2. – URL: <http://www.sanse.ru>.
- Butcher J. The numerical Analysis of Ordinary Differential Equations. (Runge – Kutta and General Linear Methods). – Great Britain: J. Wiley and Sons Ltd. – 1987. – P. 512.
- Butcher J. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. – Great Britain: J. Wiley. – 2003. – P. 440

Guzhev D. S., Shirkov P. D. Rosenbrock Schemes with complex coefficients for stiff differential equations // Mathematical Modeling and Applied Mathematics. / Proc. of IMACS International Conference, Moscow, USSR; Amsterdam: Elsevier Sci. Publ. – 1992. – Pp. 215–220.

Shirkov P. D. Some topics about *L*-decrementation of one step methods // The University of Trondheim, Norway, preprint. – 1994. – № 2/1994. – Pp. 13.