Вычислительные технологии **Том 12, № 5, 2007**

ИССЛЕДОВАНИЕ $(m, 2)$-МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ*

Е. А. Новиков
Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, Россия
e-mail: novikov@icm.krasn.ru

The $(m, 2)$-methods are investigated. It has been shown that the maximum order of accuracy for the L-stable $(m, 2)$-method is equal to four. The coefficients for the method of maximum accuracy are obtained.

Введение

При решении задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений широко используются методы типа Розенброка [1] благодаря простоте реализации и достаточно хорошим свойствам точности и устойчивости. Данные численные схемы получены из полуявных методов типа Рунге—Кутты, в которых для решения нелинейной системы алгебраических уравнений, возникающей при вычислении каждой стадии, применяется одна итерация метода Ньютона [2]. Все остальные проблемы решаются выбором величины шага интегрирования. Наибольшее распространение получили методы типа Розенброка, в которых при вычислении каждой стадии применяется одна и та же матрица Якоби. Известно (см., например, [2]), что в этом случае для m-стадийного метода Розенброка максимальный порядок точности равен $(m+1)$, причем схема максимального порядка может быть только A-устойчивой. Если отказаться от максимального порядка, то можно построить L-устойчивую численную формулу m-го порядка точности. В практических расчетах, как правило, отказываются от максимального порядка в пользу L-устойчивости. Заметим, что на основе методов типа Розенброка нельзя построить схему с замораживанием матрицы Якоби выше второго порядка точности [3], что ограничивает применение данных методов расчетами с небольшой точностью или задачами небольшой размерности.

В [4, 5] предложен класс (m, k)-методов, в которых нахождение стадий не связывается с обязательным вычислением правой части системы дифференциальных уравнений. Числа m и k означают число стадий и количество вычислений правой части на шаг интегрирования соответственно. Реализация (m, k)-методов так же проста, как и методов Розенброка, однако (m, k)-схемы имеют лучшие свойства точности и устойчивости.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 02-01-00523) и Президентской программы “Ведущие научные школы РФ” (грант № НШ-3428.2006.9).

В рамках (m,k)-методов значительно проще решается проблема замораживания матрицы Якоби и ее численной аппроксимации.

Здесь исследуются $(m,2)$-методы решения жестких систем, в которых на каждом шаге два раза вычисляется правая часть системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Показано, что максимальный порядок точности L-устойчивого $(m,2)$-метода равен четырем и построен L-устойчивый $(4,2)$-метод максимального порядка точности. Предложен способ линеаризации условий порядка по части коэффициентов, позволяющий упростить исследование (m,k)-методов.

1. Методы типа Розенброка

Далее будет рассматриваться задача Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$y' \;=\; f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \le t \le t_k, \tag{1}$$

где y и f — вещественные N-мерные векторные функции; t — независимая переменная, которая изменяется на заданном конечном интервале. Известно, что неавтономную систему введением дополнительной переменной можно привести к автономному виду. Поэтому рассмотрение (1) не снижает общности. Ниже потребуется представление точного решения $y(t_{n+1})$ задачи (1) в виде ряда Тейлора в окрестности точки t_n, которое имеет вид

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) \;&=\; y(t_n) + hf + \frac{h^2}{2} f'f + \frac{h^3}{6}[f'^2 f + f''f^2] + \\ &+\; \frac{h^4}{24}[f'^3 f + f'f''f^2 + 3f''f'f^2 + f'''f^3] + O(h^5), \end{aligned} \tag{2}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$.

Методы типа Розенброка применительно к задаче (1) имеют вид

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \\ D_{n,i} k_i = hf\left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j\right), \quad D_{n,i} = E - a_i h f'_n \left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} k_j\right), \end{gathered} \tag{3}$$

где h — шаг интегрирования; E — единичная матрица; $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ — матрица Якоби векторной функции $f(y)$; a_i, p_i, β_{ij} и γ_{ij}, $1 \le i \le m$, $1 \le j \le i-1$, — числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (3). В настоящее время методы типа Розенброка трактуются более широко [2].

Численные формулы (3) можно получить из класса полуявных методов типа Рунге—Кутты, если в них при вычислении каждой стадии ограничиться одной итерацией метода Ньютона. Однако в методах Розенброка при вычислении стадий необходимо решать только линейные системы алгебраических уравнений, в то время как в неявных или полуявных методах Рунге—Кутты требуется использовать итерационный процесс типа ньютоновского, что приводит к дополнительным проблемам при их реализации.

Наиболее эффективные реализации методов (3) возникают при $a_1 = a_2 = \cdots = a_m = a$ и $\gamma_{ij} = 0,\ 1 \le i \le m,\ 1 \le j \le i-1$. Соответствующие численные схемы имеют вид

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n k_i = hf\left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j\right), \quad D_n = E - ahf'_n(y_n). \tag{4}$$

В этом случае на каждом временно́м шаге требуется обращение одной матрицы D_n размерности N. Вместо обращения матрицы обычно решается линейная система алгебраических уравнений с применением LU-разложения матрицы D_n. Декомпозиция D_n на верхнюю и нижнюю треугольные матрицы приводит к порядка N^3 арифметических операций, в то время как последующее вычисление стадий стоит порядка N^2 операций. Поэтому в случае большой размерности задачи (1) время декомпозиции матрицы D_n практически полностью определяет общие вычислительные затраты. Рассмотрим в качестве примера одностадийный метод типа Розенброка

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1, \quad D_n k_1 = hf(y_n), \quad D_n = E - ahf'_n(y_n). \tag{5}$$

Требование второго порядка точности приводит к соотношениям $p_1 = 1$ и $ap_1 = 0.5$, в то время как условие L-устойчивости означает $a = 1$ и оно противоречит второму порядку. Поэтому в настоящее время наиболее известен набор коэффициентов $p_1 = a = 1$ L-устойчивого метода (5) первого порядка точности.

2. Класс (m,k)-методов

Прежде чем формулировать класс (m,k)-методов в общем виде, рассмотрим следующую численную формулу:

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2, \quad D_n k_1 = hf(y_n), \quad D_n k_2 = k_1. \tag{6}$$

В случае большой размерности задачи (1) после введения дополнительной стадии k_2 не происходит существенного увеличения вычислительных затрат на фоне декомпозиции матрицы D_n, т. е. вычислительные затраты для численных формул (5) и (6) различаются несущественно. В то же время при $p_1 = a$, $p_2 = 1 - a$, где a есть корень уравнения

$$a^2 - 2a + 0.5 = 0, \tag{7}$$

метод (6) имеет второй порядок точности и является L-устойчивым. Это было использовано при описании класса (m,k)-методов. Уравнение (7) имеет два корня $a_1 = 1 - 0.5\sqrt{2}$ и $a_2 = 1 + 0.5\sqrt{2}$. Обычно для практических расчетов применяется корень $a = 1 - 0.5\sqrt{2}$, потому что в этом случае меньше коэффициент в локальной ошибке. Заметим, что в отличие от (5) контролировать точность вычислений и выбор величины шага интегрирования численной схемы (6) можно проверкой неравенства $||k_2 - k_1|| \le \varepsilon$, где $||\cdot||$ — некоторая норма в R^N, ε – требуемая точность интегрирования.

Класс (m,k)-методов [4, 5] вводится следующим образом. Пусть заданы целые положительные числа m и k, $k \le m$. Обозначим через M_m множество целых чисел i, $1 \le i \le m$, а через M_k и J_i — подмножества из M_m вида

$$\begin{gathered} M_k = \{m_i \in M_m | 1 = m_1 < m_2 < \cdots < m_k \le m\}, \\ J_i = \{m_{j-1} \in M_m | j > 1, m_j \in M_k, m_j \le i\}, \quad 2 \le i \le m. \end{gathered} \tag{8}$$

Тогда (m,k)-методы можно представить в виде

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n = E - ahf'_n, \\ D_n k_i = hf\left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j\right) + \sum_{j\in J_i} \alpha_{ij} k_j, \quad i \in M_k, \\ D_n k_i = k_{i-1} + \sum_{j\in J_i} \alpha_{ij} k_j, \quad i \in M_m \setminus M_k. \end{gathered} \tag{9}$$

Множество J_i, $2 \le i \le m$, служит для устранения “лишних” коэффициентов α_{ij}, за счет которых нельзя повлиять на свойства точности и устойчивости (9) и которые линейно выражаются через другие коэффициенты. Отметим, что рассмотрение $\sum_{i=1}^{j-1} \alpha_{ij} k_j$ вместо $\sum_{j\in J_i} \alpha_{ij} k_j$ приводит к существенным трудностям при построении конкретных численных формул именно по причине наличия “лишних” коэффициентов. Заметим также, что в традиционных одношаговых методах для описания вычислительных затрат на шаг интегрирования достаточно одной константы m — числа стадий, ибо в данных методах каждая стадия сопровождается обязательным вычислением правой части задачи (1). В методах (9) есть два вида стадий — для некоторых требуется вычисление правой части, а для других не требуется. В результате в (9) для описания вычислительных затрат на шаг требуются две постоянные m и k. Затраты на шаг следующие: один раз вычисляется матрица Якоби и осуществляется декомпозиция матрицы D_n, k раз вычисляется функция f и m раз выполняется обратный ход в методе Гаусса. В случае $k = m$ и $\alpha_{ij} = 0$ численные схемы (9) совпадают с методами типа Розенброка. В остальных случаях это другие методы, обладающие лучшими свойствами по сравнению с (3).

3. Максимальный порядок точности $(m,2)$-методов

Рассмотрим $(m,2)$-методы следующего вида:

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n = E - ahf'_n, \\ D_n k_1 = hf(y_n), \quad D_n k_i = k_{i-1}, \quad 2 \le i \le s_1 - 1, \\ D_n k_{s_1} = hf\left(y_n + \sum_{j=1}^{s_1-1} \beta_{s_1,j} k_j\right) + \alpha_{s_1,s_1-1} k_{s_1-1}, \\ D_n k_i = k_{i-1} + \alpha_{i,s_1-1} k_{s_1-1}, \quad s_1 + 1 \le i \le m, \end{gathered} \tag{10}$$

где s_1 и m, $s_1 \le m$, — произвольные целые постоянные. Нетрудно видеть, что (10) описывают всевозможные варианты $(m,2)$-методов.

Теорема. *Пусть в (9) имеет место $k = 2$. Тогда при любом выборе множеств (8) и при любом числе стадий m нельзя построить $(m,2)$-метод выше четвертого порядка точности.*

Без потери общности для простоты доказательство проведем для скалярной задачи (1), точное решение $y(t_{n+1})$ которой можно записать в виде

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) &= y(t_n) + hf + \frac{h^2}{2} f'f + \frac{h^3}{6}[f'^2 f + f''f^2] + \frac{h^4}{24}[f'^3 f + 4f'f''f^2 + f'''f^3] + \\ &+ \frac{h^5}{120}[f'^4 f + 4f'f'''f^3 + 5f'^2 f'' f^2 + f''^2 f^3 + f^{IV} f^4] + O(h^6), \end{aligned} \tag{11}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$.

Рассмотрим $(m,2)$-методы (10). Учитывая

$$D_n^{-1} = E + ahf'_n + a^2h^2f'^2_n + a^3h^3f'^3_n + a^4h^4f'^4_n + O(h^5), \tag{12}$$

имеем, что второе вычисление функции $f(y)$ будет осуществляться в точке

$$y_{n,c} = y_n + \sum_{j=1}^{s_1-1} \beta_{s_1,j}k_j = y_n + \sum_{i=1}^{4} c_i h^i f'^{(i-1)}_n f_n + O(h^5),$$

где $c_i,\ 1 \le i \le 4$, определяются через коэффициенты схемы (10), а элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n. Теперь, учитывая (11) и (12), для доказательства теоремы достаточно того, что в представлении функции $f(y_{n,c})$ в виде ряда Тейлора по степеням h не содержится слагаемого $h^5 f''^2_n f^3_n$. Разлагая $f(y_{n,c})$ в ряд Тейлора в окрестности точки y_n до членов с h^5 включительно, имеем

$$\begin{aligned} f(y_{n,c}) &= hf_n + c_1h^2f'_nf_n + h^3[c_2f'^2_nf_n + 0.5f''_nf^2_n] + h^4[c_3f'^3_nf_n + c_1c_2f'_nf''_nf^2_n + \frac{c_1^3}{6}f'''_nf^3_n] + \\ &+ h^5[c_4f'^4_nf_n + c_1c_3f'^2_nf''_nf^2_n + 0.5c_1^2c_2f'_nf'''_nf^3_n + \frac{c_1^4}{24}f^{IV}_nf^4_n] + O(h^6), \end{aligned}$$

что завершает доказательство.

4. $\boldsymbol{A}$-устойчивый $(\boldsymbol{m}, \mathbf{2})$-метод четвертого порядка

Выберем сначала множества (8) следующим образом:

$$M_m = \{1,2,\ldots,m\}, \quad M_k = \{1,2\}, \quad J_i = \{1\}, \ \ 2 \le i \le m,$$

т. е. рассмотрим численные схемы вида

$$\begin{aligned} &y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_ik_i, \quad D_n = E - ahf'_n, \\ &D_nk_1 = hf(y_n), \\ &D_nk_2 = hf(y_n + \beta_{21}k_1) + \alpha_{21}k_1, \\ &D_nk_i = k_{i-1} + \alpha_{i1}k_1, \quad 3 \le i \le m. \end{aligned} \tag{13}$$

Случай 1. Пусть $m = 2$. Подставим разложения в виде рядов Тейлора для k_1 и k_2 в первую формулу (13). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая ряды для точного (2) и приближенного y_{n+1} решений до членов с h^3 включительно, получим условия третьего порядка точности схемы (13), т. е.

$$\begin{aligned} &1)\ p_1 + (1+\alpha_{21})p_2 = 1; \\ &2)\ ap_1 + (a + \beta_{21} + 2a\alpha_{21})p_2 = 0.5; \\ &3)\ a^2p_1 + (a^2 + 2a\beta_{21} + 3a^2\alpha_{21})p_2 = 1/6; \\ &4)\ 3\beta_{21}^2p_2 = 1. \end{aligned} \tag{14}$$

Исследуем совместность (14). Умножим первое уравнение (14) на $2a$, а второе на -1 и сложим. Затем умножим первое соотношение на $3a^2$, а третье на -1 и сложим. Будем иметь

$$ap_1 + ap_2 - \beta_{21}p_2 = 2a - 0.5, \quad 2a^2p_1 + 2a^2p_2 - 2a\beta_{21}p_2 = 3a^2 - 1/6.$$

Теперь, умножая первое из полученных равенств на $-2a$ и складывая со вторым, получим

$$a^2 - 6a + 1 = 0. \tag{15}$$

Пусть β_{21} свободный коэффициент. Тогда из последнего уравнения (14) выразим p_2, из первого и второго соотношений, которые теперь линейны относительно p_1 и α_{21}, вычислим оставшиеся коэффициенты. В результате запишем

$$p_1 = 0.5[\beta_{21}(12a\beta_{21} - 3\beta_{21} + 2) - 2a], \quad p_2 = \frac{1}{3\beta_{21}^2},$$
$$\alpha_{21} = 0.5\beta_{21}(3\beta_{21} - 6a\beta_{21} - 2)/a, \tag{16}$$

где a определяется из уравнения (15).

Исследуем устойчивость схемы (13) на линейном скалярном уравнении:

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0, \quad t \geq 0. \tag{17}$$

При $m = 2$, применяя (13) для решения (17), получим

$$y_{n+1} = Q(x)y_n, \quad Q(x) = \frac{1 + (1 - 2a)x + (a^2 - 2a + 0.5)x^2}{(1 - ax)^2}, \quad x = h\lambda. \tag{18}$$

При получении (18) использовались соотношения (16). Из (18) следует, что условие L-устойчивости схемы (13) имеет вид выражения (7), которое противоречит (15), т. е. при $m = 2$ метод (13) третьего порядка точности L-устойчивым не является. Уравнение (15) имеет два вещественных корня: $a_1 = (6+\sqrt{12})/12$ и $a_1 = (6-\sqrt{12})/12$. Нетрудно убедиться, что при $a_1 = (6+\sqrt{12})/12$ численная схема (13) с коэффициентами (16) является A-устойчивой.

Свободный коэффициент β_{21} можно использовать для минимизации главного члена локальной ошибки. При условии $4\beta_{21}^3 p_2 = 1$ слагаемое с элементарным дифференциалом $h^4 f''' f^3$ в локальной ошибке отсутствует. Используя это соотношение, окончательно получим коэффициенты A-устойчивого метода (13) третьего порядка точности с минимальной локальной ошибкой, которые имеют вид

$$a = \frac{6 + \sqrt{12}}{12}, \quad p_1 = \frac{76a - 3}{54a}, \quad p_2 = \frac{16}{27}, \quad \beta_{21} = \frac{3}{4}, \quad \alpha_{21} = \frac{3 - 54a}{32a}.$$

Случай 2. Исследуем схему (13) при $m = 3$. Подставим разложения в виде рядов Тейлора для k_1, k_2 и k_3 в первую формулу (13). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая ряды для точного (2) и приближенного y_{n+1} решений до членов с h^3 включительно, получим условия третьего порядка точности схемы (13), т. е.

$$\begin{aligned}
&1)\ p_1 + (1 + \alpha_{21})p_2 + (1 + \alpha_{21} + \alpha_{31})p_3 = 1,\\
&2)\ ap_1 + (a + \beta_{21} + 2a\alpha_{21})p_2 + (2a + \beta_{21} + 3a\alpha_{21} + 2a\alpha_{31})p_3 = 0.5,\\
&3)\ a^2 p_1 + (a^2 + 2a\beta_{21} + 3a^2\alpha_{21})p_2 + (3a^2 + 3a\beta_{21} + 6a^2\alpha_{21} + 3a^2\alpha_{31})p_3 = 1/6,\\
&4)\ 3\beta_{21}^2(p_2 + p_3) = 1.
\end{aligned} \tag{19}$$

Применяя (13) для решения (17), получим условие L-устойчивости

$$a(p_1 + p_2) - a^2 - \beta_{21}p_2 = 0. \tag{20}$$

Выражение для функции устойчивости не приводится в силу ее громоздкости.

Исследуем совместность (19) и (20). Умножим первое уравнение (19) на $6a^2$, а второе на $-3a$ и сложим. Затем умножим первое уравнение (19) на $3a^2$, а третье на -1 и сложим. В результате получим

$$3a^2p_1 + 3a^2p_2 - 3a\beta_{21}p_2 - 3a^2\alpha_{21}p_3 - 3a\beta_{21}p_3 = 6a^2 - 1.5a,$$
$$2a^2p_1 + 2a^2p_2 - 2a\beta_{21}p_2 - 3a^2\alpha_{21}p_3 - 3a\beta_{21}p_3 = 3a^2 - 1/6.$$

Умножим второе из полученных равенств на -1 и сложим с первым. Учитывая (20), получим условие L-устойчивости схемы (13), т. е.

$$6a^3 - 18a^2 + 9a - 1 = 0. \tag{21}$$

Отметим, что (21) есть известное уравнение L-устойчивости трехстадийных схем, т. е. при одинаковом числе стадий функции устойчивости методов типа Розенброка и (m,k)-схем совпадают.

Пусть α_{21} и β_{21} являются свободными коэффициентами. Умножим первое уравнение (19) на $-2a$ и сложим со вторым, учитывая (20). Из полученного соотношения выразим p_3. Затем последовательно определим из четвертого равенства (19) коэффициент p_2, из (20) — p_1, из первого уравнения (19) — α_{31}. В результате будем иметь

$$p_1 = \frac{ac_3 + c_4 - c_5}{c_3}, \quad p_2 = \frac{2c_2 - 3\beta_{21}^2c_1}{6\beta_{21}^2c_2}, \quad p_3 = \frac{c_1}{2c_2},$$
$$\alpha_{31} = \frac{2c_2[(1-a)c_3 - c_4 + c_5 - 2ac_2(1+\alpha_{21})]}{c_2c_3},$$

где коэффициент a определяется из условия L-устойчивости (21),

$$c_1 = 1 - 4a + 2a^2, \quad c_2 = \beta_{21} + a\alpha_{21}, \quad c_3 = 6ac_2\beta_{21}^2,$$
$$c_4 = 2c_2(\beta_{21} - a), \quad c_5 = 3c_1\beta_{21}^2(\beta_{21} - a).$$

Таким образом, при $m = 3$ можно построить L-устойчивую численную формулу (13) третьего порядка точности. Легко убедиться, что при любом значении m нельзя построить L-устойчивую схему (13) четвертого порядка. Для этого достаточно записать условия аппроксимации четвертого порядка и требование L-устойчивости. Простейшее исследование полученной нелинейной системы алгебраических уравнений показывает ее несовместность. Однако если не требовать L-устойчивости, то можно построить метод (13) четвертого порядка точности.

Случай 3. Пусть $m = 4$, т. е. рассмотрим численную схему вида

$$\begin{aligned} &y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{4} p_ik_i, \quad D_n = E - ahf'_n, \\ &D_nk_1 = hf(y_n), \quad D_nk_2 = hf(y_n + \beta_{21}k_1) + \alpha_{21}k_1, \\ &D_nk_3 = k_2 + \alpha_{31}k_1, \quad D_nk_4 = k_3 + \alpha_{41}k_1. \end{aligned} \tag{22}$$

Подставим разложения k_i, $1 \le i \le 4$, в виде рядов Тейлора по степеням h в первую формулу (22). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая точное решение (2) и полученное представление приближенного решения y_{n+1} до членов с h^4 включительно, получим условия четвертого порядка точности, т. е.

$$\begin{aligned}
&1)\ p_1 + (1+\alpha_{21})p_2 + (1+\alpha_{21}+\alpha_{31})p_3 + (1+\alpha_{21}+\alpha_{31}+\alpha_{41})p_4 = 1,\\
&2)\ ap_1 + (a+\beta_{21}+2a\alpha_{21})p_2 + (2a+\beta_{21}+3a\alpha_{21}+2a\alpha_{31})p_3 +\\
&\qquad +(3a+\beta_{21}+4a\alpha_{21}+3a\alpha_{31}+2a\alpha_{41})p_4 = 0.5,\\
&3)\ a^2p_1 + (a^2+2a\beta_{21}+3a^2\alpha_{21})p_2 + (3a^2+3a\beta_{21}+6a^2\alpha_{21}+3a^2\alpha_{31})p_3 +\\
&\qquad +(6a^2+4a\beta_{21}+10a^2\alpha_{21}+6a^2\alpha_{31}+3a^2\alpha_{41})p_4 = 1/6,\\
&4)\ \beta_{21}^2(p_2+p_3+p_4) = 1/3,\\
&5)\ a\beta_{21}^2(p_2+p_3+p_4) = 1/8,\\
&6)\ a\beta_{21}^2(0.5p_2+p_3+1.5p_4) = 1/24,\\
&7)\ \beta_{21}^3(p_2+p_3+p_4) = 1/4,\\
&8)\ a^3p_1 + a^2(a+3\beta_{21}+4a\alpha_{21})p_2 + a^2(4a+6\beta_{21}+10a\alpha_{21}+4a\alpha_{31})p_3 +\\
&\qquad +a^2(10a+10\beta_{21}+2a\alpha_{21}+10a\alpha_{31}+4a\alpha_{41})p_4 = 1/24.
\end{aligned} \tag{23}$$

Так как система алгебраических уравнений (23) является нелинейной относительно коэффициентов α_{ij}, то ее исследование представляется достаточно трудоемкой задачей. Поэтому перепишем схему (22) в таком виде, чтобы условия аппроксимации имели линейный вид относительно α_{ij}. Для этого рассмотрим следующую вспомогательную схему:

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{7} c_i d_i, \quad D_n = E - ahf'_n,\\
&D_n d_1 = hf(y_n), \quad D_n d_5 = hf(y_n + \beta_{21}k_1),\\
&D_n d_i = d_{i-1}, \quad 2 \le i \le 4, \quad 6 \le i \le 7.
\end{aligned} \tag{24}$$

Подставляя $d_i,\ 1 \le i \le 7$, в (22), получим

$$\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + p_1d_1 + (\alpha_{21}p_2+\alpha_{31}p_3+\alpha_{41}p_4)d_2 + (\alpha_{21}p_3+\alpha_{31}p_4)d_3 +\\
&+ \alpha_{21}p_4d_4 + p_2d_5 + p_3d_6 + p_4d_7.
\end{aligned}$$

Отсюда видим, что коэффициенты методов (22) и (24) связаны соотношениями

$$\begin{aligned}
&p_1 = c_1, \quad p_2 = c_5, \quad p_3 = c_6, \quad p_4 = c_7, \quad \alpha_{21}p_4 = c_4,\\
&\alpha_{21}p_3 + \alpha_{31}p_4 = c_3, \quad \alpha_{21}p_2 + \alpha_{31}p_3 + \alpha_{41}p_4 = c_2,
\end{aligned}$$

последовательным исключением разрешая которые относительно p_i и α_{ij}, будем иметь

$$\begin{aligned}
&p_1 = c_1, \quad p_2 = c_5, \quad p_3 = c_6, \quad p_4 = c_7 \quad \alpha_{21} = c_4/c_7,\\
&\alpha_{31} = (c_3c_7 - c_4c_6)/c_7^2, \quad \alpha_{41} = (c_2c_7^2 - c_4c_5c_7 - c_3c_6c_7 + c_4c_6^2)/c_7^2.
\end{aligned} \tag{25}$$

Теперь перейдем к исследованию численной схемы (24). Для этого разложим стадии $d_i,\ 1 \le i \le 7$, в ряды Тейлора в окрестности точки y_n до членов с h^4 включительно и подставим в первую формулу (24). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая полученное представление приближенного решения y_{n+1} с точным (2), получим условия четвертого порядка точности для (24), т. е.

$$
\begin{aligned}
&1)\ \sum_{i=1}^{7} c_i = 1,\\
&2)\ a(c_1+2c_2+3c_3+4c_4)+(a+\beta_{21})c_5+(2a+\beta_{21})c_6+(3a+\beta_{21})c_7=0.5,\\
&3)\ a^2(c_1+3c_2+6c_3+10c_4)+(a^2+a\beta_{21})c_5+(3a^2+3a\beta_{21})c_6+(6a^2+\\
&\qquad +4a\beta_{21})c_7=1/6,\\
&4)\ \beta_{21}^2(c_5+c_6+c_7)=1/3,\\
&5)\ a^3(c_1+4c_2+10c_3+20c_4)+(a^3+3a^2\beta_{21})c_5+(4a^3+6a^2\beta_{21})c_6+\\
&\qquad +(10a^3+10a^2\beta_{21})c_7=1/24,\\
&6)\ a\beta_{21}^2(c_5+c_6+c_7)=1/8,\\
&7)\ a\beta_{21}^2(0.5c_5+c_6+1.5c_7)=1/24,\\
&8)\ \beta_{21}^3(c_5+c_6+c_7)=1/4.
\end{aligned}
\tag{26}
$$

Исследуем совместность (26). Из четвертого и шестого уравнений получаем $a=3/8$, из четвертого и восьмого имеем $\beta_{21}=3/4$. Подставляя полученные значения a и β_{21} в шестое и седьмое уравнения (26), запишем

$$
c_5+c_6+c_7=16/27, \quad 0.5c_5+c_6+1.5c_7=16/81. \tag{27}
$$

Пусть c_7 есть свободный коэффициент. Тогда, подставляя соотношения (27) в первое, второе, третье и пятое уравнения (26), имеем

$$
\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 6 & 10 \\ 1 & 4 & 10 & 20 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} =
\begin{pmatrix} +11/27 \\ -20/81 \\ -80/81 - c_7 \\ -128/81 - 5c_7 \end{pmatrix}.
$$

Из данной линейной системы определим c_i, $1 \le i \le 4$, а из (27) — коэффициенты c_5 и c_6. В результате имеем

$$
\begin{aligned}
&a=3/8, \quad \beta_{21}=3/4, \quad c_1=(60-81c_7)/81, \quad c_2=(18-324c_7)/81,\\
&c_3=(405c_7-64)/81, \quad c_4=(19-162c_7)/81, \quad c_5=(64+81c_7)/81,\\
&c_6=-(16+162c_7)/81.
\end{aligned}
\tag{28}
$$

Подставляя данные значения в (25), получим коэффициенты численной схемы (22), при которых она имеет четвертый порядок точности. Отметим, что описанный способ исследования схемы (22) может быть применен для изучения других (m,k)-методов, в частности, приведенных выше. В этом случае относительно коэффициентов α_{ij} условия аппроксимации линеаризуются, что значительно упрощает исследование.

Из приведенных выше рассуждений следует, что в классе (m,k)-методов с двумя вычислениями правой части задачи (1) на шаге интегрирования можно построить метод четвертого порядка точности. Однако он не обладает требуемыми свойствами устойчивости, что приводит к очевидным трудностям при решении жестких систем. Оказывается, если по-другому организовать вычисления, то при $k=2$ можно построить L-устойчивую численную схему четвертого порядка.

5. L-устойчивый $(4,2)$-метод четвертого порядка

Выберем множества (8) следующим образом:

$$M_m = \{1, 2, \ldots, m\}, \quad M_k = \{1, 3\}, \quad J_i = \{2\}, \quad 3 \leq i \leq m,$$

т. е. рассмотрим численные схемы вида

$$\begin{aligned} &y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n = E - ahf'_n, \\ &D_n k_1 = hf(y_n), \quad D_n k_2 = k_1, \quad D_n k_3 = hf(y_n + \beta_{31} d_1 + \beta_{32} k_2) + \alpha_{32} k_2, \\ &D_n k_i = k_{i-1} + \alpha_{i2} k_2, \quad 4 \leq i \leq m. \end{aligned} \tag{29}$$

Пусть $m = 4$. Подставим разложения $k_i,\ 1 \leq i \leq 4$, в виде рядов Тейлора в первую формулу (29). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая полученное представление с рядом Тейлора для точного решения до членов с h^4 включительно, получим условия четвертого порядка точности схемы (29), т. е.

$$\begin{aligned} &1)\ p_1 + p_2 + (1 + \alpha_{32}) p_3 + (1 + \alpha_{32} + \alpha_{42}) p_4 = 1, \\ &2)\ a p_1 + 2a p_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32}) p_3 + (2a + \beta_{31} + \\ &\quad + \beta_{32} + 4a\alpha_{32} + 3a\alpha_{42}) p_4 = 0.5, \\ &3)\ a^2 p_1 + 3a^2 p_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32}) p_3 + (3a^2 + \\ &\quad + 3a\beta_{31} + 4a\beta_{32} + 10a^2\alpha_{32} + 6a^2\alpha_{42}) p_4 = 1/6, \\ &4)\ a^3 p_1 + 4a^3 p_2 + (a^3 + 3a^2\beta_{31} + 6a^2\beta_{32} + 10a^3\alpha_{32}) p_3 + \\ &\quad + (4a^3 + 6a^2\beta_{31} + 10a^2\beta_{32} + 20a^3\alpha_{32} + 10a^3\alpha_{42}) p_4 = 1/24, \\ &5)\ (\beta_{31} + \beta_{32})^2 (p_3 + p_4) = 1/3, \\ &6)\ a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})(p_3 + p_4) = 1/8, \\ &7)\ a(\beta_{31} + \beta_{32})^2 (0.5 p_3 + p_4) = 1/24, \\ &8)\ (\beta_{31} + \beta_{32})^3 (p_3 + p_4) = 1/4. \end{aligned} \tag{30}$$

Применяя (29) для решения (17), получим условие L-устойчивости, которое имеет вид

$$a(a - p_1) + (\beta_{31} - a) p_3 = 0.$$

Алгебраическая система (30) является нелинейной относительно коэффициентов α_{ij}, что приводит к определенным трудностям с ее исследованием. Поэтому при изучении методов (29) поступим по аналогии с изучением численной схемы (22). Для этого рассмотрим следующую вспомогательную схему:

$$\begin{aligned} &y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{6} c_i d_i, \quad D_n = E - ahf'_n, \\ &D_n d_1 = hf(y_n), \quad D_n d_2 = d_1, \quad D_n d_3 = hf(y_n + \beta_{31} d_1 + \beta_{32} d_2), \\ &D_n d_4 = d_2, \quad D_n d_5 = d_3, \quad D_n d_6 = d_4. \end{aligned} \tag{31}$$

Подставляя $d_i,\ 1 \leq i \leq 6$, в (29), получим

$$y_{n+1} = y_n + p_1 d_1 + p_2 d_2 + p_3 d_3 + (\alpha_{32} p_3 + \alpha_{42} p_4) d_4 + p_4 d_5 + \alpha_{32} p_4 d_6.$$

Отсюда видим, что коэффициенты методов (29) и (31) связаны соотношениями

$$p_1 = c_1, \quad p_2 = c_2, \quad p_3 = c_3, \quad p_4 = c_5, \quad \alpha_{32} = c_6/c_5, \quad \alpha_{42} = (c_4 c_5 - c_3 c_6)/c_5^2. \quad (32)$$

Теперь перейдем к изучению метода (31). Подставим разложения $d_i,\ 1 \le i \le 6$, в виде рядов Тейлора в первую формулу (31). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая полученное представление с рядом Тейлора для точного решения до членов с h^4 включительно, получим условия четвертого порядка точности схемы (31), т. е.

$$\begin{aligned}
&1)\ \sum_{i=1}^{6} c_i = 1,\\
&2)\ ac_1 + 2ac_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32})c_3 + 3ac_4 + (2a + \beta_{31} + \beta_{32})c_5 + 4ac_6 = 0.5,\\
&3)\ a^2c_1 + 3a^2c_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32})c_3 + 6a^2c_4 + (3a^2 + 3a\beta_{31} +\\
&\quad +4a\beta_{32})c_5 + 10a^2c_6 = 1/6,\\
&4)\ (\beta_{31} + \beta_{32})^2(c_3 + c_5) = 1/3,\\
&5)\ a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})(c_3 + c_5) = 1/8,\\
&6)\ a(\beta_{31} + \beta_{32})^2(0.5c_3 + c_5) = 1/24,\\
&7)\ (\beta_{31} + \beta_{32})^3(c_3 + c_5) = 1/4,\\
&8)\ a^3c_1 + 4a^3c_2 + (a^3 + 3a\beta_{31} + 6a\beta_{32})c_3 + 10a^3c_4 + (4a^3 + 6a^2\beta_{31} +\\
&\quad +10a^2\beta_{32})c_5 + 20a^3c_6 = 1/24.
\end{aligned} \qquad (33)$$

Исследуем совместность (33). Из четвертого и седьмого уравнений имеем

$$\beta_{31} + \beta_{32} = 3/4, \quad c_3 + c_5 = 16/27. \qquad (34)$$

Тогда из пятого и шестого соотношений (33) получим β_{32} и c_3 соответственно. Из (34) выразим β_{31} и c_5. Учитывая первое уравнение (33), подставим полученные выражения для β_{31}, β_{32}, c_3 и c_5 во второе, третье и восьмое равенства (33). Получим линейную систему алгебраических уравнений относительно c_2, c_4 и c_6, которая имеет вид

$$ac_2 + 2ac_4 + 3ac_6 = -(22a + 5)/54, \quad 2a^2c_2 + 7a^2c_4 + 16a^2c_6 = (64a^2 + 29a - 30)/54,$$
$$a^2c_2 + 3a^2c_4 + 6a^2c_6 = (32a^2 - 11a - 6)/54.$$

Разрешив данную систему, из первого уравнения (33) получим c_1. В конечном результате будем иметь

$$\begin{aligned}
&c_1 = \frac{76a^2 - 29a + 3}{27a^2}, \quad c_2 = \frac{-146a^2 + 89a - 12}{27a^2}, \quad c_3 = \frac{32a - 4}{27a},\\
&c_4 = \frac{72a^2 - 59a + 10}{18a^2}, \quad c_5 = \frac{4 - 16a}{27a}, \quad c_6 = \frac{-18a^2 + 19a - 4}{18a^2},\\
&\beta_{31} = \frac{48a - 9}{32a}, \quad \beta_{32} = \frac{9 - 24a}{32a}.
\end{aligned} \qquad (35)$$

Применяя (31) для решения (17), получим условие L-устойчивости

$$a(c_1 + c_3) - a^2 - c_3\beta_{31} = 0.$$

Функция устойчивости не приводится в силу ее громоздкости. Подставляя сюда значения коэффициентов (35), можно записать

$$24a^4 - 96a^3 + 72a^2 - 16a + 1 = 0. \tag{36}$$

Заметим снова, что (36) есть известное уравнение L-устойчивости четырехстадийных схем, т. е. при одинаковом числе стадий функции устойчивости методов типа Розенброка и (m, k)-схем совпадают. Подставляя теперь (35) в (32), получим коэффициенты схемы (29), т. е.

$$\begin{aligned}
&p_1 = \frac{76a^2 - 29a + 3}{27a^2}, \quad p_2 = \frac{146a^2 + 89a - 12}{27a^2}, \quad p_3 = \frac{32a - 4}{27a}, \\
&p_4 = \frac{4 - 16a}{27a}, \quad \beta_{31} = \frac{48a - 9}{32a}, \quad \beta_{32} = \frac{9 - 24a}{32a}, \\
&\alpha_{32} = \frac{-54a^2 + 57a - 12}{8a - 32a^2}, \quad \alpha_{42} = \frac{-864a^3 + 828a^2 - 288a + 36}{a(4 - 16a)^2},
\end{aligned} \tag{37}$$

при которых она имеет четвертый порядок точности. Коэффициент a определяется из условия L-устойчивости (36). Данное уравнение имеет корни $a_1 = 0.10643879214266$, $a_2 = 0.22042841025921$, $a_3 = 0.57281606248213$ и $a_4 = 3.10031673511599$. Для расчетов рекомендуется $a = 0.57281606248213$, а соответствующие коэффициенты имеют вид

$$\begin{aligned}
a &= +0.57281606248213, & p_1 &= +1.27836939012447, \\
p_2 &= -1.00738680980438, & p_3 &= +0.92655391093950, \\
p_4 &= -0.33396131834691, & \beta_{31} &= +1.00900469029922, \\
\beta_{32} &= -0.25900469029921, & \alpha_{32} &= -0.49552206416578, \\
\alpha_{42} &= -1.28777648233922.
\end{aligned}$$

Заключение

Из приведенных выше рассуждений можно сделать следующие выводы.

Во-первых, свойства устойчивости (m, k)-методов зависят от выбора множеств (8), или, что то же самое, от способа реализации численных схем. Это следует из сравнения численных формул (13) и (29).

Во-вторых, при $k = 2$ в классе (m, k)-методов можно построить численную схему, которая по свойствам точности не уступает неявному методу типа Рунге—Кутты с двумя вычислениями правой части задачи (1), а при линейном анализе устойчивости она также не хуже. В то же время при записи (29) сразу заложен способ ее реализации, т. е. до начала расчетов можно оценить вычислительные затраты на шаг интегрирования. Что касается неявных методов типа Рунге—Кутты, то для них вычислительные затраты в сильной степени зависят от способа реализации. Использование двухстадийной схемы вовсе не означает, что на каждом шаге будет два раза вычисляться правая часть задачи (1). Поэтому на некоторых задачах (m, k)-методы выгоднее неявных численных формул типа Рунге—Кутты.

В-третьих, при двух вычислениях функции $f(y)$ задачи (1) можно построить L-устойчивый $(4, 2)$-метод четвертого порядка точности, в то время как соответствующий L-устойчивый метод типа Розенброка (3) может быть только второго порядка точности. В случае достаточно высокой точности расчетов и большой размерности задачи (1), когда декомпозиция матрицы Якоби фактически определяет общие вычислительные затраты, а обратный ход в методе Гаусса не оказывает существенного влияния, $(4, 2)$-метод будет эффективнее.

Список литературы

[1] Rosenbrock H.H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. 1963. N 5. P. 329–330.

[2] Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.

[3] Новиков Е.А., Новиков В.А., Юматова Л.А. Замораживание матрицы Якоби в методах типа Розенброка второго порядка точности // ЖВМ и МФ. 1987. Т. 27, № 3. С. 385–390.

[4] Новиков Е.А. Об одном классе одношаговых безытерационных методов решения жестких систем // Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики, Новосибирск, 1987. С. 138–139.

[5] Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И. Одношаговые безытерационные методы решения жестких систем // Докл. АН СССР. 1988. Т. 301, № 6, С. 1310–1314.

Поступила в редакцию 18 апреля 2007 г.