УДК 519.622

ПОСТРОЕНИЕ МНОГОЧЛЕНОВ УСТОЙЧИВОСТИ МЕТОДОВ ТИПА РУНГЕ-КУТТА ПЕРВОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

Рыбков М.В.
научный руководитель д-р физ.-мат. наук Новиков Е.А.
Сибирский федеральный университет

Введение. При численном исследовании жестких задач вида

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

где y и f – гладкие вещественные N-мерные вектор функции, t – независимая переменная, все большее внимание привлекают явные методы [1–3]. Однако области устойчивости известных численных схем слишком малы. Здесь разработан алгоритм определения коэффициентов полиномов устойчивости, при которых метод имеет заданную форму и размер области устойчивости. Построенные многочлены можно применять для повышения эффективности известных методов типа Рунге-Кутта и для построения алгоритмов интегрирования с расширенными областями устойчивости.

Для численного решения жестких задач в [2] предлагается применять явные методы вида

$$y_{n+1} = y_n + \sum\nolimits_{i=1}^{m} p_{mi} k_i\,,\; k_i = hf(t_n + \alpha_i h, y_n + \sum\nolimits_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j\,)\,, \quad (2)$$

где k_i, $1 \le i \le m$, – стадии метода, p_{mi}, α_{ij} и β_{ij} – коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости схемы (2). Устойчивость методов обычно исследуется на линейном уравнении $y' = \lambda y$, $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$. Применяя (2) для решения этого уравнения, имеем

$$y_{n+1} = Q_m(z) y_n\,,\; z = h\lambda\,,\; Q_m(z) = 1 + \sum\nolimits_{i=1}^{m} c_{mi} z^i\,. \quad (3)$$

В [2] показана связь коэффициентов метода (2) и коэффициентов многочлена (3). Численная формула (2) будет иметь первый порядок точности, если $\sum\nolimits_{j=1}^{m} b_{1j} p_{mj} = 1$. Требование второго порядка точности (2) означает выполнение условий $\sum\nolimits_{j=1}^{m} b_{1j} p_{mj} = 1$ и $\sum\nolimits_{j=2}^{m} b_{2j} p_{mj} = 0.5$. Отсюда следует, что для построения m-стадийных методов первого и второго порядков точности следует положить $c_{m1}=1$ и $c_{m1}=1$, $c_{m2}=0.5$, соответственно. Для того чтобы определить коэффициенты метода (2) требуются коэффициенты многочленов устойчивости. Здесь рассмотрена задача получения таких коэффициентов многочлена устойчивости, чтобы область устойчивости схемы имела заданную, естественно "разумную", форму и размер.

Многочлены устойчивости на интервале [γ,0]. Пусть заданы два числа k и m, $k \le m$. Рассмотрим многочлены вида

$$Q_{m,k}(x) = 1 + \sum\nolimits_{i=1}^{k} c_i x^i + \sum\nolimits_{i=k+1}^{m} c_i x^i\,, \quad (4)$$

где коэффициенты c_i, $1 \le i \le k$, заданы, а c_i, $k+1 \le i \le m$, − свободные. Обычно c_i, $1 \le i \le k$, определяются из требований аппроксимации. Поэтому для определенности ниже будем предполагать, что $c_i = 1/i!$, $1 \le i \le k$.

Обозначим экстремальные точки (4) через x_1, … , x_{m-1}, причем $x_1 > x_2 > \ldots > x_{m-1}$. Неизвестные коэффициенты c_i, $k+1 \le i \le m$, определим из условия, чтобы многочлен (4) в экстремальных точках x_i, $k \le i \le m-1$, принимал заданные значения, то есть $Q_{m,k}(x_i) = F_i$, $k \le i \le m-1$, где $F(x)$ есть некоторая заданная функция, $F_i = F(x_i)$. Для этого на x_i, $k \le i \le m-1$, и c_j, $k+1 \le j \le m$, рассмотрим следующую алгебраическую систему уравнений

$$Q_{m,k}(x_i) = F_i\,,\; Q'_{m.k}(x_i) = 0\,,\; k \le i \le m-1\,,\; Q'_{m.k} = \sum\nolimits_{i=1}^{m} i c_i x^{i-1}\,. \quad (5)$$

Перепишем (5) в виде, удобном для расчетов на ЭВМ. Для этого обозначим через y, z, g и r векторы с координатами

$$y_i = x_{k+i-1}\,,\ z_i = c_{k+i}\,,\ g_i = F_{k+i-1} - 1 - \sum_{j=1}^{k} c_j y_i^j\,,\ r_i = -\sum_{j=1}^{k} j c_j y_i^{j-1}\,,\ 1 \le i \le m-k\,, \tag{6}$$

через $E_1,\ldots,E_5$ − диагональные матрицы с элементами на диагонали вида

$$e_1^{ii} = k+i\,,\ e_2^{ii} = 1/y_i\,,\ ,\ e_4^{ii} = \sum_{j=2}^{k} j(j-1)c_j y_i^{j-2} + \sum_{j=1}^{m-k}(k+j)(k+j-1)z_j y_i^{k+j-2}\,,$$

$$e_3^{ii} = \sum_{j=1}^{k} j c_j y_i^{j-1} + \sum_{j=1}^{m-k}(k+j)z_j y_i^{k+j-1}\,,\ e_5^{ii} = (-1)^{k+i-1},\ \ 1 \le i \le m-k, \tag{7}$$

а через A – матрицу с элементами $a_{ij}=y_i^{k+j}$, $1\le i,j\le m-k$.

Ниже индексы и аргументы опущены для упрощения записи. С использованием введенных обозначений задачу (5) можно записать в виде

$$Az - g = 0\,,\ E_2 A E_1 z - r = 0\,. \tag{8}$$

Система (8) плохо обусловлена, что приводит к трудностям при использовании для ее решения метода простой итерации. Для сходимости метода Ньютона требуются хорошие начальные условия, что в данном случае есть трудновыполнимая проблема. Если в (5) положить $F_i=(-1)^i$, $k\le i\le m-1$, то есть поставить задачу нахождения полинома с максимальным размером интервала устойчивости, то вопрос о вычислении начального условия y^0 решается достаточно просто с использованием значений экстремальных точек многочлена Чебышева, рассматриваемого на отрезке $[-2m^2,0]$, где m есть степень (4). Их можно вычислить по формуле

$$y_i = m^2[\cos(i\pi/m) - 1]\,,\ 1 \le i \le m-1\,. \tag{9}$$

Подставляя (9) в первую формулу (8), получим коэффициенты полинома Чебышева, для которого $|Q_{m1}(x)|\le 1$ при $x\in[-2m^2,0]$. При любом k в качестве начальных условий можно взять (9) и, как показывают расчеты, имеется хорошая сходимость. Если же $F_i\ne(-1)^i$, $k\le i\le m-1$, то выбор начальных условий является сложной задачей.

Опишем способ решения (8), который не нуждается в хороших начальных условиях. Для численного решения (8) используем метод установления, который заключается в том, что для стационарной задачи строится нестационарный процесс, решение которого с течением времени устанавливается к решению исходной задачи. Итак, рассмотрим задачу Коши

$$y' = E_5(E_2 A E_1 A^{-1} g - r),\ y(0) = y_0\,, \tag{10}$$

где элементы матрицы E_5 определены в (7). Ясно, что после определения стационарной точки (10) коэффициенты полинома устойчивости можно вычислить из первой системы (8). Заметим, что при использовании матрицы E_5 все собственные числа матрицы Якоби задачи (10) имеют отрицательные вещественные части, то есть задача (10) устойчивая. Из результатов расчетов следует, что (10) является жесткой задачей. Методы решения таких задач предполагают вычисление матрицы Якоби, что в случае (10) связано с трудностями. Поэтому для ее решения используем метод второго порядка точности с численным вычислением и замораживанием матрицы Якоби [6−7], который применительно к задаче $y'=f(y)$, $y(0)=y_0$, имеет вид

$$y_{n+1} = y_n + ak_1 + (1-a)k_2,\ D_n = E - ah_n A_n, D_n k_1 = h_n f(y_n), D_n k_2 = k_1. \tag{11}$$

Здесь $a=1-0.5\sqrt{2}$, k_1 и k_2 − стадии метода, E − единичная матрица, h_n − шаг интегрирования, A_n − матрица, представимая в виде $A_n=f_n'+h_nR_n+O(h_n^2)$, $f_n'=\partial f(y_n)/\partial y$ − матрица Якоби системы (1), R_n − не зависящая от шага интегрирования произвольная матрица. Так как при записи схемы (11) матрица R_n произвольная, то вопрос о замораживании и численной аппроксимации матрицы Якоби можно рассматривать одновременно [8]. Для контроля точности схемы (11) можно применять неравенство [9]

$$\varepsilon(j_n) = \| D_n^{1-j_n}(k_2 - k_1) \| \le a\varepsilon/|a - 1/3|,\ 1 \le j_n \le 2\,, \tag{12}$$

где ε – требуемая точность интегрирования, $\|\cdot\|$ – некоторая норма в R^N, а целочисленная переменная j_n выбирается наименьшей, при которой выполняется неравенство (12). Шаг численного дифференцирования s_j, $1\le j\le N$, выбирается по формуле $s_j=\max\{10^{-14},\ 10^{-7}|y_j|\}$.Теперь j-й столбец a_n^j матрицы A_n вычисляется по формуле $a_n^j=[f(y_1,\ldots,\ y_j+s_j,\ldots,y_N)-\ f(y_1,\ldots,\ y_j,\ldots,y_N)]/s_j$, $1\le j\le N$, то есть для задания A_n требуется N вычислений правой части задачи (10). Попытка использования прежней матрицы D_n осуществляется после каждого успешного шага интегрирования. Для того чтобы не испортить свойства устойчивости численной схемы, при замораживании матрицы D_n величина шага интегрирования тоже остается постоянной. Размораживание матрицы происходит в следующих случаях: 1) нарушена точность расчетов, 2) число шагов с замороженной матрицей достигло заданного максимального числа I_h, 3) прогнозируемый шаг больше последнего успешного в Q_h раз.

Результаты расчетов. Из анализа графических изображений областей устойчивости следует, что форма, размер и структура области устойчивости зависят от расположения корней многочлена устойчивости (4) в комплексной плоскости $\{h\lambda\}$. На расположение корней можно влиять выбором функции F. При решении задач вида (1), собственные числа матрицы Якоби которых имеют большие мнимые части и решения которых носят осциллирующий характер, часто не требуется значительное расширение интервала устойчивости. В этом случае шаг из условия точности выбирается достаточно малым, и поэтому расширение области устойчивости требуется в основном по мнимой оси. В случае наличия чисто мнимых собственных чисел нужно, чтобы на некотором участке мнимой оси выполнялось условие $|Q_{mk}(x)|=1$. При повышении порядка точности, то есть с ростом k, это условие выполняется само собой. Для методов низкого порядка расширения области устойчивости по мнимой оси можно добиться за счет выбора коэффициентов c_i, $k+1\le i\le m$, таким образом, чтобы корни многочлена устойчивости были комплексными. В зависимости от того, как он расположен относительно комплексных корней, изменяется размер, форма и структура области устойчивости. Нетрудно показать, что с ростом m коэффициенты многочлена устойчивости стремятся к нулю. В [2] коэффициенты c_i, $k+1\le i\le m$, получены до $m=13$.

Многочлены устойчивости на интервале [−1,1]. В настоящее время разрабатывается алгоритм построения многочленов с заданными свойствами на промежутке $[-1,1]$. В этом случае коэффициенты c_i убывают не так быстро, и можно построить многочлены при достаточно больших значениях m. Ниже описан алгоритм построения многочленов, которые соответствуют методам первого порядка точности. Обозначим через γ_m длину интервала устойчивости m-стадийной явной формулы типа Рунге-Кутта, то есть на интервале $[\gamma_m,0]$ выполняется условие $|Q_{m,k}(x)|\le 1$. Тогда заменой переменных $x=1-2z/\gamma_m$ переведем интервал $[\gamma_m,0]$ в $[-1,1]$. При этом получим многочлен

$$Q_m(z)=\sum_{i=0}^{m} d_i z^i\ . \tag{13}$$

Тогда коэффициенты d_i, $0\le i\le m$ многочлена (13) связаны с коэффициентами c_i, $0\le i\le m$, многочлена (4) связаны соотношением $c=UVd$, где $d=(d_0,\ \ldots,\ d_m)^T$, $c=(c_0,\ \ldots,\ c_m)^T$, матрица U − диагональная матрица с элементами на главной диагонали вида $u^{ii}=(-2/\gamma_m)^{i-1}$, $1\le i\le m+1$, а элементы v^{ij} матрицы V задаются формулами $v^{1j}=1$, $1\le j\le m+1$; $v^{i,j}=v^{i,j-1}+\ v^{ji-1,j-1}$, $2\le i\le j\le m+1$; $v^{i,j}=0$, $i>j$. Нетрудно видеть, что V представляет собой «треугольник Паскаля», элементы которого легко вычисляются по рекуррентной формуле. Поэтому после построения многочлена (13), с помощью $c=UVd$ легко вычислить коэффициенты многочлена (4). Теперь перейдем к построению многочлена (13). Обозначим экстремальные точки (13) через $z_1,\ \ldots\ ,\ z_{m-1}$, причем $z_1>z_2>\ldots>z_{m-1}$. Коэффициенты d_i, $0\le i\le m$, определим из условия, чтобы многочлен (13) в экстремальных точках z_i, $1\le i\le m-1$, принимал заданные значения, то есть $Q_m(z_i)=F_i$, $1\le i\le m-1$, где $F(x)$ есть некоторая заданная функция, $F_i=F(z_i)$. Для этого на z_i, $1\le i\le m-1$, и d_j, $0\le j\le m$, рассмотрим следующую алгебраическую систему уравнений

$$Q_m(z_i)=F_i\,,\ Q'_m(z_i)=0\,,\ 1\le i\le m-1\,;\ Q'_m(z)=\sum_{i=1}^{m} i d_i z^{i-1}\,, \tag{14}$$

причем выполнены условия нормировки $Q_m(-1)=(-1)^m$ и $Q_m(1)=1$.

Перепишем (14) в виде, удобном для расчетов на ЭВМ. Для этого обозначим через y, w, g и r векторы с координатами

$$y_j = z_j,\ r_j = 0,\ 1 \le j \le m-1;\ w_i = d_{i-1},\ 1 \le i \le m+1;$$

$$g_i = F_i,\ 1 \le i \le m-1;\ g_i = 1,\ i = m;\ g_i = (-1)^m,\ i = m+1; \tag{15}$$

через E_1, E_2 – соответственно матрицы размерности $(m+1)\times(m+1)$ и $(m-1)\times(m+1)$ с элементами на главной диагонали вида

$$e_1^{jj} = j-1,\ 1 \le j \le m+1;\ e_2^{ii} = 1/y_i,\ 1 \le i \le m-1, \tag{16}$$

а через A – матрицу размерности $(m+1)\times(m+1)$ с элементами

$$a^{ij} = y_i^{j-1},\ 1 \le i \le m-1,\ 1 \le j \le m+1;\ a^{m,j} = 1,\ a^{m+1,j} = (-1)^{j+1},\ 1 \le j \le m+1. \tag{17}$$

С использованием (15) – (17) задачу (14) можно записать в виде

$$Aw - g = 0,\ E_2 A E_1 w - r = 0. \tag{18}$$

Для численного решения (18) используется метод установления, описанный выше. Определив коэффициенты многочлена (13), с помощью соотношения $c=UVd$ вычисляем коэффициенты многочлена (4). Значение γ_m находим из условия, что искомый многочлен соответствует методу интегрирования первого порядка точности, то есть имеет место $c_1=1$. Выписав вторую строку соотношения $c=UVd$ и сделав необходимые алгебраические преобразования, получим

$$\gamma_m = \left\{-2\sum_{j=1}^{m+1} v_{2j} d_j\right\} / c_1 .$$

Заключение. С помощью описанной схемы получены коэффициенты многочленов до степени m=20 включительно, соответствующих методам первого порядка точности. В настоящее время создается алгоритм построения многочленов, соответствующих методам произвольного порядка точности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 11-01-00106).

Литература:

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

[2] Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997.

[3] Лебедев В.И. Явные разностные схемы с переменными шагами по времени для решения жестких систем уравнений // Препринт ОВМ АН СССР №177. − 1987.

[4] Новиков В.А., Новиков Е.А. Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // ДАН СССР, 1984. Т. 277, №5. С. 1058−1062.

[5] Новиков А.Е., Новиков Е.А. Алгоритм переменного порядка и шага на основе стадий метода Дорманда-Принса восьмого порядка точности // Вычислительные методы и программирование, 2007. Т.8, №2. С. 317−325.

[6] Новиков А.Е., Новиков Е.А. L-устойчивый (2,1)-метод решения жестких неавтономных задач // Вычислительные технологии, 2008. №13. С.477−482.

[7] Новиков Е.А., Шитов Ю.А. Алгоритм интегрирования жестких систем на основе (m,k)-метода второго порядка точности с численным вычислением матрицы Якоби // Препринт ВЦ СО АН СССР №20, Красноярск. 1988. 23с.

[8] Новиков А.Е., Новиков Е.А. Численное решение жестких задач с небольшой точностью // Матем. моделирование, 2010. Т.22, №1. С. 46−56.

[9] Новиков А.Е., Новиков Е.А., Рыбков М.В. Построение многочленов устойчивости с заданными свойствами // Ресурсосберегающие технологии: Прил. к “Вестнику КрасГАУ”, 2012. Вып. 8. С. 127–132.