ОДНОШАГОВЫЕ МЕТОДЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ СИСТЕМ ОДУ С ТОЧНОЙ ОЦЕНКОЙ ЛОКАЛЬНОЙ ПОГРЕШНОСТИ

Ширков Петр Дмитриевич
Международный университет природы, общества и человека «Дубна», филиал «Дмитров», e-mail: pdshirkov@front.ru)

В статье рассматриваются одношаговые методы численного интегрирования задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений, для которых в явном виде можно получить значение главного слагаемого в разложении локальной погрешности. Для семейств методов Рунге-Кутты и Розенброка получены конкретные схемы различного порядка точности, в том числе – удовлетворяющие специальным свойствам устойчивости, которые делают их пригодными для численного решения задач специального типа (например, жестких). Построены схемы нового типа, занимающие по трудоемкости промежуточное состояние между явными методами Рунге-Кутта и методами Розенброка.

Ключевые слова: одношаговые методы для систем ОДУ, оценка локальной погрешности, автоматический выбор шага.

§1. Введение

1.1. ЗАДАЧА КОШИ ДЛЯ СИСТЕМ ОДУ

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

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{f}\left(t,\ \vec{u}\right),\ \vec{u}(0) = \vec{u_0}\ , \tag{1}$$

где $\vec{u} = \left(u_1,\ \ldots,\ u_n\right)^T,\ \vec{f} = \left(f_1,\ \ldots,\ f_n\right)^T,\ \vec{u_0} = \left(u_{01},\ \ldots,\ u_{0n}\right)^T \in R^n$.

Проблема численного решения задач такого типа подробно описана в литературе (см., например [1,2] и приведенную там библиографию) и связана:

с особенностью поведения решения системы (1);

с выбором схемы численного интегрирования, адекватной специфике исходной задачи;

с оценкой погрешности и стратегией выбора шага, обеспечивающей гарантированную точность интегрирования.

1.2. МЕТОДЫ РУНГЕ-КУТТЫ.

Современная теория и практика численных методов для систем ОДУ наиболее полно отражена в [1-4] 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 относятся *одношаговые схемы Рунге-Кутты (РК)*, которые в наиболее общем случае записываются в виде:

$$\vec{K_i} = \vec{f}\left(t + c_i\tau,\ \vec{y}(t) + \tau\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\vec{K_j}\right),\ i = 1,\ \ldots,\ s; \tag{2}$$

$$\vec{y}(t+\tau) = \vec{y}(t) + \tau\sum_{j=1}^{s} b_j\vec{K}_j\ ,$$

где s — количество стадий, τ – локальный шаг сетки численного интегрирования задачи (1), $\vec{y}(t)$ — ее разностное решение; c_i (абсциссы), a_{ij} и b_j (веса) — коэффициенты схемы, а $\vec{K}_j$ — неизвестные стадии, геометрический смысл которых — направление движения вдоль траектории решения.

Соотношения (2) являются, вообще говоря, неявными алгебраическими уравнениями размерности n×s относительно неизвестных стадий $\vec{K}_j$. Если $a_{ij} = 0$ при $j \ge i$, то стадии находятся по явным формулам и метод называется явным (ERK). Такие схемы наиболее просты при численной реализации, однако их область применимости весьма ограничена. Они, например, не пригодны для сильно жестких1 задач, дифференциально-алгебраических систем, для задач, в которых требуется сохранение интегралов движения, и некоторых других [2].

Если $a_{ij} = 0$ при $j > i$, то такой метод называется диагонально-неявным (DIRK) методом и для перехода на новый слой необходимо последовательно (s раз) решать системы нелинейных уравнений размерности n. Наименее трудоемкий DIRK метод получается, если $a_{ii} = a_{jj}$ для любых i и j. В этом случае для развязки счета (например, в модифицированных Ньютоновских итерациях) достаточно использовать лишь одно LU — разложение при переходе на новый временной слой. Эти методы называют однократно неявными.

Для построения РК схем Дж. Бутчером [3] была разработана удобная форма представления методов (в виде таблицы Бутчера):

$$\begin{array}{c|ccccc} c_1 & a_{11} & . & . & . & a_{1s} \\ . & . & . & & & . \\ . & . & & . & & . \\ . & . & & & . & . \\ c_s & a_{s1} & . & . & . & a_{ss} \\ \hline & b_1 & . & . & . & b_s \end{array} \qquad (3)$$

и построен формализм (так называемые *деревья Бутчера* и *упрощающие условия Бутчера*), облегчающие процедуру получения и исследования методов. Так, например, некоторые свойства устойчивости (в том числе B — устойчивость [4]) непосредственно определяются на основе простого анализа коэффициентов таблицы (3).

Наиболее известным методом Рунге-Кутты, широко применяемым для нежестких и не осциллирующих задач, является явная 4-х стадийная схема 4-го порядка точности, коэффициенты которой задаются матрицей следующего вида

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & & & \\ 0.5 & 0.5 & 0 & & \\ 0.5 & 0 & 0.5 & 0 & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \qquad (4)$$

При построении схем с конкретными значениями коэффициентов (которые выбираются так, чтобы метод имел приемлемый порядок точности и был устойчивым [1-4]) обычно требуют выполнения некоторых вспомогательных условий (упрощающих условий Бутчера). Самое простое из них имеет вид

$$c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\,; \qquad (5)$$

оно необходимо и достаточно для того, чтобы метод имел одинаковый порядок точности на автономной $\left(\vec{f} = \vec{f}\left(\vec{u}\right)\right)$ и неавтономной $\left(\vec{f} = \vec{f}\left(t,\ \vec{u}\right)\right)$ задаче (1) (см., например, [4]).

В §2 описаны новые явные методы 3-го и 4-го порядка точности, полученные автором [6] (один из них публикуется впервые), и проведено их сравнение с методами, широко используемыми на практике.

1.3. МЕТОДЫ РОЗЕНБРОКА

Чтобы упростить процедуру перехода на новый временной слой, Розенброк [7] предложил записать одну Ньютоновскую итерацию для определения неизвестных значений стадий в *DIRK* методе (2) и расставить в полученной записи свободные коэффициенты. При этом (как было показано, например, в [8]) вид получаемой схемы будет зависит от выбора начальных приближений для неизвестных векторов стадий $\vec{K}_j$, $j = 1\ldots s$. В наиболее общем случае для их определения приходится решать s систем линейных уравнений размерности n:

$$\begin{gathered}\left[\vec{E} - \tau\gamma_i \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}\left(t + c_{1,i}\tau, \vec{y}(t) + \tau\sum_{j=1}^{i-1} a_{1,ij}\overrightarrow{K_j}\right)\overrightarrow{K_i}\right] \\ = \vec{f}\left(t + c_{2,i}\tau, \vec{y}(t) + \tau\sum_{j=1}^{i-1} a_{2,ij}\overrightarrow{K_j}\right) + \tau\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}\left(t + c_{3,i}\tau, \vec{y}(t) + \tau\sum_{j=1}^{i-1} a_{3,ij}\overrightarrow{K_j}\right)\sum_{j=1}^{i-1}\gamma_{ij}\overrightarrow{K_j}\end{gathered} \tag{6}$$

$i = 1, \ldots, s$;

где $\vec{E}$ — единичная матрица, а $\dfrac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}$ — *матрица Якоби* исходной системы (1), вычисляемая, вообще говоря, при различных значениях независимого переменного t и искомого решения $\vec{y}(t)$. Как было отмечено выше, мы предполагаем, что матрица Якоби существует и является кусочно-непрерывной в области существования решения исходной задачи (1).

Некоторые авторы предпочитают иметь дело с записью методов Розенброка, сделанных в форме, рассчитанной на автономную задачу $\left(\vec{f} = \vec{f}(\vec{u})\right)$. При этом в неавтономном случае задачу (1) сводят к автономной тривиальным увеличением длины вектора неизвестной функции добавлением к нему еще одной компоненты:

$$\vec{u} \to \vec{u} = (u_1,\ldots,u_n,u_{n+1})^T, \text{ где } u_{n+1} = t.$$

Однако, как показано, например, в [4,9], полученная таким образом схема может не сохранять свойства устойчивости при переходе от автономной задачи к неавтономной.

Легко видеть, что с ростом числа стадий количество свободных коэффициентов растет квадратично — $N_{\text{coef}} = s(2s+3)$, и даже при $s = 5$ становится достаточно большим ($N_{\text{coef}} = 65$). Поэтому исследователи обычно ограничиваются различными подмножествами семейства (6). Например, при $\gamma_{ij} = 0$ получаем классические *схемы Розенброка*, которые рассматривались многими авторами (см. [2,4,10] и приведенную там библиографию).

Если потребовать, что бы матрица Якоби была одинакова на всех стадиях ($c_{1,i} = c_{3,i} = c, \alpha_{1,ij} = \alpha_{3,ij} = 0$ при любых i, j), а численная реализация схемы (6) использовала бы лишь одно LU — разложение ($\gamma_i = \gamma$), то мы получим *Розенброка-Ваннера (ROW) методы* [2,4,8]). Однако, даже в этом случае, теоретическое исследование свойств рассматриваемых многостадийных схем затруднено. Это связано, с одной стороны, с обилием свободных параметров, а с другой стороны — с отсутствием возможности простого переноса формализма Бутчера на методы типа Розенброка.

Для удобства методы типа Розенброка (6) будем записывать в табличной форме:

$$\begin{array}{c|ccccc|ccccc} c_{l,1} & 0 & . & . & . & 0 & 0 & . & . & . & 0 \\ c_{l,2} & a_{l,21} & 0 & & & . & \gamma_{21} & 0 & & & . \\ . & . & & 0 & & . & . & & 0 & & . \\ . & . & & & 0 & . & . & & & 0 & . \\ c_{l,s} & a_{l,s1} & a_{l,s2} & . & a_{l,(s,s-1)} & 0 & \gamma_{s1} & \gamma_{s2} & . & \gamma_{(s,s-1)} & 0 \\ \hline & b_1 & b_2 & . & b_{s-1} & b_s & b_1 & b_2 & . & b_{s-1} & b_s \end{array} \tag{7}$$

Здесь $l = 1, 2, 3$. В случае Розенброка-Ваннера методов ($c_{1,i} = c_{3,i} = c, \alpha_{1,ij} = \alpha_{3,ij} = 0$ при любых i, j) достаточно задать лишь две таблицы коэффициентов (7) и дополнительный вектор-столбец $\vec{c} = (c_1, ..., c_s)^T$, необходимый для вычисления матрицы Якоби.

В §3 описаны новые *ROW* методы 2-го и 3-го порядка точности, полученные автором [8,11], и проведено их сравнение с методами, применяемыми в пакетах прикладных задач.

1.4. УСТОЙЧИВОСТЬ ОДНОШАГОВЫХ МЕТОДОВ

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

Для анализа устойчивости используется модельная линейная задача [4]

$$F(t,u) = \lambda(t)u(t), n = 1. \tag{8}$$

Если применить любой s-стадийный одношаговый метод (Рунге-Кутты (2) или Розенброка (6)) к задаче (8), то разностное решение может быть представлено в виде

$$y(t + \tau) = R(z1,...,zs)\, y(t);\ zi = \tau\lambda(t + ci\,\tau),\ i = 1,...,s, \tag{9}$$

где $R(z_1, \ldots, zs)$ — рациональная функция многих переменных, называемая функцией устойчивости метода [2]. Если модельная задача (8) автономна ($\lambda(t) = \lambda$), или если $c_j = \text{const}$ (при всех $j = 1, \ldots, s$), то функция устойчивости зависит только от одного аргумента. При этом $R = Ps(z)/Qs(z)$, где $Ps(z)$ и $Qs(z)$ — многочлены степени s.

Определение 1. Метод называется A–устойчивым, если $|R(z)| \le 1$ для всех $Re(z) \le 0$. В этом случае функция устойчивости также называется A– устойчивой.

Из A–устойчивости метода следует, что $|y(t + \tau)| \le |y(t)|$ для любой пары (τ, λ), удовлетворяющей условию $\tau\lambda = z$. Таким образом, разностное решение повторяет свойство монотонности (не возрастания при $\lambda \le 0$) точного решения соответствующей модельной задачи (8).

Для жестких задач (см., например, [2, 8, 9, 11]) полезно иметь схемы с более сильным свойством устойчивости, которое повторяет поведение точного решения модельной задачи (8) при $\tau\lambda \to -\infty$.

Определение 2. Метод называется L– устойчивым, если он A–устойчив и $|R(z)| \to 0$ при $Re(z) \to -\infty$. В этом случае функция устойчивости (9) также называется L– устойчивой.

Обобщение понятия A– и L–устойчивости на случай неавтономных задач дают определения 3 и 4.

Определение 3. Метод называется AN–устойчивым, если $|R(z_1, \ldots, z_s)| \le 1$ для всех векторов $z = (z_1, \ldots, z_s)^T$, у которых $Re(z_i) \le 0$ при всех $1 \le i \le s$ и $z_i = z_j$ если $c_i = c_j$.

Определение 4. Метод называется LN–устойчивым, если $|R(z_1, \ldots, z_s)| \to 0$ для любого $Re(z_i) \to -\infty$.

Очевидно, что если метод AN–устойчив, то он и А–устойчив. Тоже самое относится и к свойствам L– и LN– устойчивости. Обратное, вообще говоря, неверно [9].

Из приведенных определений видно, что для проверки свойств AN– и LN–устойчивости метода необходимо исследовать поведения функции устойчивости, которая зависит от s комплексных переменных. С ростом числа стадий эта задача становится серьезной проблемой.

Бутчер, Барридж и Крузе [12-14] обобщили понятие AN–устойчивости на случай нелинейных диссипативных уравнений. Рассмотрим системы (1), у которых правая часть $\vec{f}(t, \vec{u})$ при $t \ge 0$ и любых $\vec{\xi_1}, \vec{\xi_2} \in R^n$ обладает следующим свойством:

$$\left\langle \vec{f}\left(t,\vec{\xi}_1\right)-\vec{f}\left(t,\vec{\xi}_2\right),\vec{\xi}_1-\vec{\xi}_2\right\rangle \le 0, \tag{10}$$

где $\langle \circ,\circ \rangle$ — вещественное скалярное произведение, заданное в R^n.

Пусть $\vec{y}(t)$ и $\vec{y}(t+\tau)$ — численные решения исходной задачи (1), полученные одношаговым методом (2). Обозначим $\vec{v}(t)$ и $\vec{v}(t+\tau)$ решения возмущенной задачи (1) (вызванные, например, изменением начальных данных), полученные тем же методом (2).

Определение 5. Метод Рунге-Кутты (2) называется *B*–устойчивым (*BN*–устойчивым), если для любой автономной (неавтономной) задачи (1), удовлетворяющей условию (10), для всех $\vec{y}(t)$, $\vec{v}(t)$ и при любых $\tau > 0$ выполняется неравенство

$$\left\|\vec{y}(t+\tau)-\vec{v}(t+\tau)\right\| \le \left\|\vec{y}(t)-\vec{v}(t)\right\|, \tag{11}$$

где $\|\circ\|$ — некоторая норма, заданная в пространстве R^n.

Неравенство (11) означает, что с увеличением t два любых решения задачи (1) ведут себя контрактивным образом («притягиваются» друг к другу). Дифференциальные уравнения, обладающие этим свойством, называются диссипативными. Следовательно, *B*– и *BN*–устойчивость означают безусловную «контрактивность» численного метода для задач, диссипативных в некоторой норме (соответствующей заданному скалярному произведению). Очевидно, что из *BN*–устойчивости следует его *B*–устойчивость.

Основной результат нелинейной теории устойчивости состоит в разработке простого алгебраического формализма исследования свойств *B*–устойчивости методов Рунге-Кутты [4, 13, 14]. Рассмотрим матрицу $M = BA + A^TB - bb^T$, которая легко вычисляется для любого *РК* метода по его таблице (3); здесь $B = \mathrm{diag}(b_1, \ldots, b_s)$.

Определение 7. Метод Рунге-Кутты (2) называется алгебраически устойчивым, если матрицы B и M неотрицательны.

Справедлива следующая (см., например, [4]):

Теорема 1. Для неконфлюентного метода Рунге-Кутты ($c_i \ne c_j$ при любых $i \ne j$) справедливы следующие утверждения:

1. Алгебраическая устойчивость ⇔ BN–устойчивость.
2. Алгебраическая устойчивость ⇔ AN–устойчивость.
3. Для произвольного метода Рунге-Кутты справедливы все импликации вправо.

В §3 описан разработанный автором формализм [9], позволяющий проводить исследование AN–устойчивости методов Розенброка на основе анализа алгебраической устойчивости (BN–устойчивости) родственного DIRK метода.

1.4. СТРАТЕГИИ АВТОМАТИЧЕСКОГО ВЫБОРА ШАГА.

Эффективное решение системы (1) численным методом требует автоматического выбора шага интегрирования. Это может быть сделано следующим образом. Пусть

$$\vec{e}_{loc} \equiv [\vec{u}(t+\tau)-\vec{u}(t)]-[\vec{y}(t+\tau)-\vec{y}(t)] \tag{12}$$

локальная погрешность численного метода. Здесь $\vec{u}(t)$ и $\vec{y}(t)$ — соответственно точное и численное решение задачи (1). Говорят, что метод имеет локальный порядок точности p, если

$$\left\|\vec{e}_{loc}\right\| = C\tau^{p+1} + O\left(\tau^{p+2}\right), \tag{13}$$

где $\|\circ\|$ — норма вектора в пространстве R^n, C — константа погрешности метода.

Предположив, что шаг интегрирования выбран достаточно малым (так, что решение задачи вместе со своими производными меняется слабо на отрезке $[t, t+\tau]$) и величину локальной погрешности можно экстраполировать на следующий временной интервал, получим (предварительно исключив константу погрешности метода С):

$$\tau_{n+1} = \tau_n \left(\varepsilon / \left\|\vec{e}_{loc}\right\|\right)^{\frac{1}{p+1}}, \tag{14}$$

где ε — задаваемая (требуемая) точность интегрирования.

Следовательно, для автоматического прогноза шага численного интегрирования необходимо уметь оценивать локальную погрешность метода (некоторые модификации такого подхода можно найти, например, в [2]). Рассмотрим основные способы ее оценки.

Экстраполяция Рунге–Ричардсона. Пусть известно численное решение системы (1) в точке t. Выберем некоторое значение шага τ (например, на основе предыдущего интервала). Численно проинтегрируем систему на отрезке $[t, t+\tau]$ Найдем приближенное значение решения в точке $t+\tau$ одним и тем же методом, сначала сделав один шаг величиной τ (это численное решение обозначим $\overrightarrow{y_I}$), а потом, сделав два последовательных шага из точки t с шагом $0{,}5\tau$ каждый (это решение обозначим $\overrightarrow{y_{II}}$). Тогда (если τ достаточно мало) с учетом (13) имеем [15]:

$$\vec{e}_{loc} = \frac{\overrightarrow{y_I} - \overrightarrow{y_{II}}}{1 - 0.5^{p+1}} + O\left(\tau^{p+2}\right). \tag{15}$$

Такой способ оценки локальной погрешности используют, например, в комбинации с классическим методом Рунге-Кутты (4).

Вложенные методы. Некоторые методы Рунге-Кутты строятся так, чтобы одна и та же таблица коэффициентов давала бы сразу пару методов, которые отличаются только числом стадий, весами и порядком точности. Обозначим решения, полученные этими методами в точке t как $\overrightarrow{y_I}$ и $\overrightarrow{y_{II}}$ соответственно. Такую пару методов называют вложенной. Если шаг достаточно мал, то оценка погрешности для «внутреннего» метода (он содержит $s - 1$ стадию) имеет вид:

$$\vec{e}_{loc} = (\vec{y}_I - \vec{y}_{II}) + O\left(\tau^{p+2}\right). \tag{16}$$

Наиболее известными представителями вложенных пар явных методов Рунге–Кутты, широко используемых на практике, являются методы Фальберга, Дорманда–Принца и Вернера [1]. Например, вложенная пара Дорманда–Принца имеет 6 стадий и порядок точности равный 4; он используется для контроля погрешности в виде (16). Внешняя схема (она содержит 7 стадий) имеет 5 порядок и используется для счета. К некоторым недостаткам данного метода следует отнести наличие больших по модулю отрицательных элементов в таблице Бутчера.

Оценки локальной погрешности, построенные на основе правила Рунге–Ричардсона или с использованием вложенных методов, имеют общий недостаток: они не являются точными и основаны на экстраполяции значения погрешности в точку интегрирования.

В §2 и §3 описаны методы, полученные автором, которые используют точную оценку главного члена локальной погрешности [6, 11, 16].

§2. Явные методы Рунге-Кутты с точной оценкой локальной погрешности

2.1. ТОЧНАЯ ОЦЕНКА ЛОКАЛЬНОЙ ПОГРЕШНОСТИ

Идея построения методов основана на выделении в структуре погрешности слагаемого, который зависит лишь от матрицы Якоби системы $(\partial \vec{f} / \partial \vec{u})$ и от правой части. Если все остальные слагаемые, соответствующие выбранной степени τ, отсутствуют в разложении ошибки в ряд Тейлора, то локальная погрешность (12) имеет вид:

$$\overrightarrow{e_{loc}} = C\tau^{p+1}\left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}\right)^{p} \vec{f} + O\left(\tau^{p+2}\right). \tag{17}$$

Она легко вычисляется путем последовательного умножения матрицы Якоби на вектор. Такой метод имеет порядок точности равный p, а для прогноза шага целесообразно использовать формулу (здесь, как и ранее, ε — требуемая точность):

$$\tau = \left(\varepsilon / \left\|\vec{e}_{loc}\right\|\right)^{\frac{1}{p+1}} \tag{18}$$

Методы, главный член локальной погрешности которых имеет вид (17), будем называть методами с точной оценкой локальной погрешности. Такие методы были предложены для численного интегрирования жестких систем L–устойчивыми схемами Розенброка [11, 16]. Позднее этот подход был перенесен на методы Рунге–Кутты [6]. Ниже приведены некоторые из таких схем, в том числе схема, публикуемая впервые.

2.2. Ξ-МЕТОД.

Рассмотрим простую модификацию классического метода Рунге-Кутта (4), коэффициенты которого приведены в таблице (такая схема может быть получена, например, методом вариации параметров):

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & & & \\
0.5 & 0.5 & 0 & & \\
0.5 & 0 & 0.5 & 0 & \\
1 & 0 & \xi & 1-\xi & 0 \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
\end{array} \tag{19}$$

Формально эта схема имеет третий порядок точности, так как главный член ее локальной погрешности имеет вид (17) с $C = \xi$, $p = 3$. Если же выбирать на каждом шаге $\xi = \tau_{new}$, то мы получим метод четвертого порядка точности.

2.3. МЕТОД 4-ГО ПОРЯДКА.

Рассмотрим явные схемы Рунге-Кутты, содержащие 6 стадий. Опуская громоздкую технику решения уравнений порядка (записанных с учетом всех слагаемых для случая 5-го порядка точности, за исключением терма (17)), приведем значения коэффициентов метода с относительной погрешностью до 10-6 (см. подробнее [6]):

$$\begin{array}{c|cccccc}
0 & 0 & & & & & \\
0.691638 & 0.691638 & 0 & & & & \\
0.236701 & 0.196197 & 0.0405033 & 0 & & & \\
0.355051 & 0.0887628 & 0 & 0.266288 & 0 & & \\
0.710102 & 0 & 0 & 0 & 0.710102 & 0 & \\
0.844949 & 0.0699405 & 0 & 0.290049 & 0.157882 & 0.327077 & 0 \\
\hline
 & 0.111111 & 0 & 0 & 0.512486 & 0 & 0.376403
\end{array} \tag{20}$$

Главный член локальной погрешности такого метода имеет вид (17) с $C \cong 0.005$, $p = 4$. Метод (20) для численного интегрирования задачи Коши (1) с прогнозом шага на основе формулы (18) будем называть методом RK4(*).

2.4. МЕТОД ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ 3-ГО ПОРЯДКА.

Положим в записи ROW метода (6) $\gamma i = 0$. Тогда получим аналог метода Рунге-Кутты, содержащий в записи схемы Якобиан:

$$\vec{y}(t+\tau)=\vec{y}(t)+\tau\sum_{j=1}^{s} b_j \vec{K}_j$$

$$\vec{K}_i=\vec{f}\left(t+c_i\tau,\ \vec{y}(t)+\tau\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\vec{K}_j\right)+\tau\sum_{j=1}^{i-1}\gamma_{ij}\frac{\partial\vec{f}}{\partial\vec{y}}\vec{K}_j\ ; \qquad (21)$$

$$i = 1, \ldots, s.$$

Для представления схемы будем использовать матричную форму Бутчера, добавляя (также как и при записи ROW методов) таблицу коэффициентов γ_{ij}. Для таких схем удается построить методы с точной оценкой локальной погрешности повышенного порядка точности. Так, для $s = 3$ существуют методы 3-го порядка точности ($p = 3$), главный терм локальной погрешности которых имеет вид:

$$\overrightarrow{e_{loc}}=\frac{\tau^{p+1}}{24}\left(\frac{\partial\vec{f}}{\partial\vec{y}}\right)^{p}\vec{f}\,. \qquad (22)$$

Пример такого метода приведен в таблице:

0	*0*	*0*	*0*	*0*	*0*	*0*
1/2	*1/2*	*0*	*0*	*0*	*0*	*0*
3/4	*3/16*	*9/16*	*0*	*3/32*	*0*	*0*
b_i	*11/27*	*0*	*16/27*			

(23)

Для повышения теоретического порядка точности до 4-го можно использовать метод (23) с поправкой на величину (22): $\tilde{y}(t+\tau)=y(t+\tau)-e_{loc}$.

Все описанные в этом параграфе методы прошли тестирование [6, 17] на модельных задачах (см. систему, предложенную для тестирования, например, в [18]) и при сравнении с методами 4-го и 5-го порядка, широко применяемых в пакетах прикладных программ (классическим методом Рунге-Кутты, методами Фальберга и Дорманда – Принца), показали свою высокую надежность и эффективность.

§3. Методы Розенброка с точной оценкой локальной погрешности

3.1. ТОЧНОСТЬ, УСТОЙЧИВОСТЬ И АВТОМАТИЧЕСКИЙ ВЫБОР ШАГА.

Свойства *L*- и *B*-устойчивости, необходимые для численного интегрирования сложных задач вида (1) (например, жестких или жестко-осциллирующих), не достижимы для явных одношаговых методов [2, 4]. Специальные классы неявных *L*- и *B*-устойчивых методов Рунге-Кутты (таких как Гаусса-Лежандра, Радо и Лобатто IIIC [2-4]) весьма трудоемки для численной реализации и не имеют эффективной стратегии выбора шага: среди них отсутствуют вложенные пары. В работах автора [8, 9, 11, 16,19, 20] делается попытка найти своеобразный компромисс между свойствами высокой точности, устойчивости и надежности выбора шага интегрирования. Были подробно рассмотрены схемы Розеброка, занимающие промежуточное положение между явными и неявными методами. При этом, в частности, было показано, что требование *L*(*LN*)-устойчивости необходимо не только для корректного описания «жестких» компонент при их выходе из пограничного слоя, но и для построения адекватных стратегий выбора шага в таких задачах [20].

При построении схем сформулируем требования, которыми должен обладать метод численного интегрирования, применяемый, например, для жестких систем (1). Он должен:

1. Иметь порядок точности не ниже второго.
2. Быть *L (LN)* – или *A(AN)* – устойчивым.

3. Иметь точную оценку главного члена локальной погрешности схемы для автономных и неавтономных задач. (24)

Для анализа устойчивости методов типа Розенброка в [9] разработан и обоснован простой формализм, основанный на изучении свойств родственных (L(LN)-эквивалентных) методов *РК* (в данном случае – DIRK методов) и использующий табличную форму представления схемы (7). В частности, доказана следующая теорема

Теорема 2. (Критерий AN-устойчивости методов Розенброков). Неконфлюентный ($c_i \neq c_j$ при любых $i \neq j$) метод Розенброка (6) AN-устойчив тогда и только тогда, когда LN-эквивалентный ему DIRK метод алгебраически устойчив.

Таким образом, для изучения AN-устойчивости метода Розенброка достаточно найти (используя таблицы (7)) родственный ему DIRK метод и проанализировать его алгебраическую устойчивость.

Ниже приведены основные результаты исследования методов Розенброка, связанные с поиском схем, удовлетворяющих условиям (24). За основу были взяты 2-х и 3-х стадийные DIRK методы. Среди них алгебраически устойчивыми являются лишь методы, найденные Норсёттом [2, 4, 21].

3.2. 2-Х СТАДИЙНЫЕ МЕТОДЫ РОЗЕНБРОКА 2-ГО И 3-ГО ПОРЯДКА.

Множество всех алгебраически устойчивых 2-х стадийных неконфлюентных однократных DIRK методов описывается семейством [4, 21]:

$$\begin{array}{c|cc} \gamma & \gamma & 0 \\ 1-\gamma & 1-2\gamma & \gamma \\ \hline & 0.5 & 0.5 \end{array} \qquad (25)$$

Следовательно, родственный ему (LN-эквивалентный) 2-х стадийный метод Розенброка должен задаваться таблицами:

$$\begin{array}{c|cc} \gamma & 0 & 0 \\ 1-\gamma & a_{21} & 0 \\ \hline & 0.5 & 0.5 \end{array} \qquad \begin{array}{|cc} \gamma & 0 \\ \gamma_{21} & \gamma \\ \hline 0.5 & 0.5 \end{array} \qquad (26)$$

где $a_{21} + \gamma_{21} = 1\text{-}2\gamma$.

Для того, чтобы методы (25) и (26) имели 3-й порядок точности необходимо положить $\gamma = \dfrac{3+\sqrt{3}}{6}, \alpha = \dfrac{\sqrt{6}}{3}$. В этом случае метод Розенброка (26) будет AN-устойчив, однако для автоматического выбора придется использовать экстраполяцию Рунге-Ричардсона (15).

Построим теперь LN-устойчивый метод с точной оценкой локальной погрешности. Анализ функции устойчивости схемы (26) показывает, что для выполнения этого свойства необходимо и достаточно, чтобы $\gamma^2 - 2\gamma + 0.5 = 0$. Выбирая, например, $\gamma = \dfrac{2-\sqrt{2}}{2}, \alpha = \dfrac{\sqrt{6}}{3}$, мы «потеряем» 3-й порядок точности, но получим LN-устойчивый метод Розенброка 2-го порядка с оценкой локальной погрешности в виде:

$$\overrightarrow{e_{loc}} = \frac{4-3\sqrt{2}}{6}\tau^3\left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}\right)\left\{\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{u}}\vec{f} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial t}\right\} + O\left(\tau^4\right).$$

Эту схему следует рекомендовать для включения в пакеты прикладных программ. Единственным ее недостатком является необходимость использования в неавтономных задачах на различных стадиях разных матриц Якоби ($c_1 \neq c_2$), что несколько увеличивает ее трудоемкость.

Однако, на автономных системах требуется лишь одно *LU* разложение для перехода на новый слой.

Другие 2-х стадийные методы Розенброка (в том числе, приведенные в [10]) свойствами *AN*- и *LN*- устойчивости не обладают [9].

3.3. 3-Х СТАДИЙНЫЕ МЕТОДЫ РОЗЕНБРОКА 3-ГО И 4-ГО ПОРЯДКА.

Справедлива следующая теорема (см. подробнее [9]):

Теорема 3. 3-х стадийная схема Розенброка, родственная (*LN*-эквивалентная) семейству алгебраически устойчивых однократных DIRK методов Норсётта [4,21] не может

Одновременно иметь 4-й порядок точности и быть *AN*-устойчивой.

Одновременно иметь 3-й порядок точности с точной оценкой главного терма локальной погрешности в виде (17) и быть *AN*-устойчивой.

Быть *LN*-устойчивой.

В настоящее время на множестве 3-х и 4-х стадийных методов Розенброка общего вида (6) с точной оценкой локальной погрешности удалось построить только *L*-устойчивые схемы [11, 16, 19, 22]. Было проведено детальное тестирование этих методов на автономных задачах, которое показало их преимущество в достигаемой точности, надежности и эффективности перед аналогичными методами, используемыми в таких пакетах прикладных программ как RODAS [2] и его модификациях.

Список литературы

1. Хайрер Э., Норсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – Москва, «Мир», 1990.
2. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – Москва, «Мир», 1999.
3. Butcher J. The numerical Analysis of Ordinary Differential Equations. (Runge – Kutta and General Linear Methods). – Great Britain: J. Wiley and Sons Ltd., 1987.
4. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. – Москва, «Мир», 1988.
5. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноруцкий И.Г. Численные методы решения жестких систем. - Москва, «Наука», 1979.
6. Кащеев П.В., Ширков П.Д. Новые явные методы Рунге-Кутта четвертого порядка. // Сборник научных трудов СурГУ, Сургут, т. 4, 1998. – с. 34-43.
7. Rosenbrock H., Some general implicit processes for numerical solution of differential equations // Computer J., vol. 5, № 4, 1962/1963. – pp. 329-330.
8. Ширков П.Д. L-устойчивость диагонально-неявных схем Рунге-Кутты и методов Розенброка. // «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.», том 32, №9, 1992. – сс. 1422-1432.
9. Ширков П.Д. AN- устойчивость ROW методов. // Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, № 16, 2001. – сс. 20.
10. Калиткин Н.Н., Панченко С.Л. Оптимальные схемы для жестких неавтономных систем. // «Матем. моделирование», Москва, «Наука», том 11, №6, 1999. – сс. 52-75.
11. Кочетков К.А., Ширков П.Д. L-затухающие ROW методы третьего порядка точности. // «Ж. выч. математ. и матем. физ.», том 37, №6, 1997. - сс. 699-710.
12. Butcher J. A stability property of implicit Runge-Kutta methods. // BIT, n. 15, 1975. - pp. 358-361.
13. Burrage K., Butcher J. Stability criteria for implicit Runge-Kutta methods. // SIAM J. Numer. Anal., n. 16, 1979. - pp. 46-57.
14. Crouzeix M., Sur la B-stabilite des methodes de Runge-Kutta. // Numer. Math., n. 32, 1979. - pp. 75-82.
15. Калиткин Н.Н. Численные методы. – Москва, «Наука», 1978.
16. Кочетков К.А., Ширков П.Д. L-затухающие ROW-методы с точной оценкой локальной погрешности.// Математическое моделирование. – 2001. – №13(08) – С. 38-43.
17. Бутяев В А., Ширков П.Д. О двух явных одношаговых методах третьего порядка. // (в печати).

18. Арушанян О.Б. и др. О тестировании программ решения ОДУ. – М.: Препринт ИПМ им. М. Келдыша АН СССР, № 139, Москва, 1983.

19. Kochetkov K.A., Shirkov P.D. L-decremented ROW methods of the low order. // Preprint of the Institute of Mathematical Modelling RAS, Moscow, 1995, № 1. – p. 16.

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

21. Noersett S. Semi-explicit Runge-Kutta methods. // Report Mathematics and Computation, № 6/74, Department of Mathematics, University of Trondheim, 1974.

22. Kochetkov K.A., Shirkov P.D. Extrapolated Solution of Van der Pol Equation and L-decrementation of ROW methods. – Preprint of the IMM RAS, 1994, N 28.