

УДК 519.622

**КОНСТРУИРОВАНИЕ ОБЛАСТЕЙ УСТОЙЧИВОСТИ ЯВНЫХ
МЕТОДОВ ТИПА РУНГЕ–КУТТА****Е. А. Новиков¹**

Разработан алгоритм определения коэффициентов полиномов устойчивости, при которых метод имеет заданную форму и размер области устойчивости. Работа поддержана грантами РФФИ № 08-01-00621 и Президента РФ НШ-3431.2008.9

Ключевые слова: жесткие системы, явный метод, контроль точности и устойчивости, область устойчивости.

1. Введение. В последнее время при численном исследовании некоторых жестких задач вида

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

все большее внимание привлекают явные методы [1–3]. Это связано с тем, что при применении L -устойчивых методов возникает проблема с обращением матрицы Якоби. В случае большой размерности системы дифференциальных уравнений время декомпозиции этой матрицы фактически определяет общие вычислительные затраты. В то же время явные методы не нуждаются в вычислении матрицы Якоби и, если жесткость задачи не слишком велика, они будут предпочтительнее. Отметим также, что явные методы легко распараллеливаются.

Можно выделить две основные причины, которые приводят к трудностям при использовании явных методов для решения жестких задач. Первая причина связана с противоречием между точностью и устойчивостью численной схемы на участке установления. Следствием этого является раскачивание шага интегрирования, что в лучшем случае приводит к понижению эффективности алгоритма интегрирования. Этому недостатка можно избежать, например, предложенным в [4] способом контроля устойчивости. Вторая причина ограниченного применения явных методов связана с тем, что области устойчивости известных численных схем слишком малы. В настоящий момент имеется ряд работ, посвященных вопросам построения явных методов с расширенными областями устойчивости. Ясно, что расширение области устойчивости связано с ростом вычислительных затрат на шаг интегрирования. Поэтому, если шаг ограничен по точности, такие схемы будут малоэффективны. Однако если шаг ограничен в силу устойчивости, что имеет место на участке установления, то за счет применения численных схем с расширенными областями устойчивости можно значительно повысить эффективность алгоритма интегрирования. В качестве критерия выбора подходящей численной формулы можно использовать известное неравенство для контроля устойчивости [2, 4, 5].

Очевидно, что за счет контроля устойчивости и использования численных схем с расширенными областями устойчивости можно только расширить границы применимости явных формул. Для этих методов шаг h ограничен в силу неравенства $h|\lambda_{\max}| \leq D$, где λ_{\max} есть максимальное собственное значение матрицы Якоби системы (1), а положительная постоянная D связана с размером области устойчивости. Так как для многих жестких задач длина интервала интегрирования значительно превышает величину $D/|\lambda_{\max}|$, то интегрирование при условии $h|\lambda_{\max}| \leq D$ оказывается непосильным для современных ЭВМ.

В настоящей статье предложен алгоритм определения коэффициентов полиномов устойчивости, при которых метод имеет заданную форму и размер области устойчивости. Приведены результаты численных экспериментов по определению влияния значений полинома устойчивости в экстремальных точках на конфигурацию области устойчивости. Построенные полиномы можно применять для повышения эффективности известных методов типа Рунге–Кутта, как это сделано, например, в [5]. Там на основе стадий метода Дорманда–Принса построен метод первого порядка точности с расширенной до -90 по вещественной оси областью устойчивости и сформулирован алгоритм переменного порядка и шага. В результате теоретически на участке установления быстродействие алгоритма интегрирования может быть повышено в 36 раз за счет расчетов по методу первого порядка. На практике эффективность немного

¹ Институт вычислительного моделирования СО РАН, Академгородок, 660036, Красноярск; профессор, e-mail: novikov@icm.krasn.ru

меньше. Кроме того, полиномы устойчивости можно использовать для построения алгоритмов интегрирования, в которых все применяемые методы имеют расширенную область устойчивости. Необходимые соотношения для построения таких методов с первого по третий порядок приведены ниже. Однако такие методы могут быть малоэффективными на нежестких задачах, где шаг ограничен точностью вычислений, а не устойчивостью численной схемы. Представляется, что в состав алгоритма интегрирования наиболее разумно включать метод высокого порядка, в котором все коэффициенты подобраны для достижения нужного порядка точности, а также метод низкого порядка, в котором коэффициенты применены для построения нужной конфигурации и размера области устойчивости. Выбор наиболее эффективной схемы на каждом шаге можно осуществлять с применением неравенства для контроля устойчивости.

2. Численные схемы. Для численного решения жестких задач в [2] предлагается применять явные методы типа Рунге–Кутты

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

где y и f — гладкие вещественные N -мерные вектор-функции, t — независимая переменная, k_i — стадии метода и $\alpha_i, p_{mi}, \beta_{ij}$ — коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости схемы (2). Для упрощения выкладок далее рассмотрим задачу Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений $y' = f(y), y(t_0) = y_0, t_0 \leq t \leq t_k$, для решения которой применимы методы типа Рунге–Кутты, записанные в виде

$$y_{n,i} = y_n + \sum_{j=1}^i \beta_{i+1,j} k_j, \quad 1 \leq i \leq m-1, \quad y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m p_{mi} k_i, \quad (3)$$

где $k_i = hf(y_{n,i-1}), 1 \leq i \leq m, y_{n,0} = y_n$. Все полученные ниже результаты можно использовать для неавтономных задач, если в (2) положить

$$\alpha_1 = 0, \quad \alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}, \quad 2 \leq i \leq m. \quad (4)$$

В дальнейшем потребуется матрица B_m с элементами b_{ij} вида (см. [1, 2])

$$b_{1i} = 1, \quad 1 \leq i \leq m, \quad b_{ki} = \begin{cases} 0, & 2 \leq k \leq m, \quad 1 \leq i \leq k-1, \\ \sum_{j=k-1}^{i-1} \beta_{ij} b_{k-1,j}, & 2 \leq k \leq m, \quad k \leq i \leq m, \end{cases} \quad (5)$$

где β_{ij} — коэффициенты схемы (2) или (3).

Устойчивость одношаговых методов обычно исследуется на линейном скалярном уравнении

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0, \quad t \geq 0, \quad (6)$$

с комплексным $\lambda, \operatorname{Re}(\lambda) < 0$. Применяя вторую формулу (3) к (6), получим

$$y_{n+1} = Q_m(z)y_n, \quad z = h\lambda, \quad Q_m(z) = 1 + \sum_{i=1}^m c_{mi}z^i, \quad c_{mi} = \sum_{j=i}^m b_{ij}p_{mj}, \quad 1 \leq i \leq m. \quad (7)$$

Обозначая $C_m = (c_{m1}, \dots, c_{mm})^T, P_m = (p_{m1}, \dots, p_{mm})^T$, соотношение (7) можно переписать в виде

$$B_m P_m = C_m, \quad (8)$$

где элементы матрицы B_m определены соотношениями (5). Для промежуточных численных схем (3) имеем

$$y_{n,k} = Q_k(z)y_n, \quad Q_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^k c_{ki}z^i, \quad c_{ki} = \sum_{j=i}^k b_{ij}\beta_{k+1,j}, \quad 1 \leq k \leq m-1. \quad (9)$$

Используя обозначения $\beta_k = (\beta_{k+1,1}, \dots, \beta_{k+1,k})^T$, $c_k = (c_{k1}, \dots, c_{kk})^T$, получим, что коэффициенты β_{ij} промежуточных схем (3) и коэффициенты соответствующих полиномов устойчивости связаны соотношениями

$$B_k \beta_k = c_k, \quad 1 \leq k \leq m-1. \quad (10)$$

Заметим, что из сравнения (5) и (9) следует, что $b_{ki} = c_{i-1,k-1}$, т.е. элементы $(k+1)$ -го столбца матрицы B_m совпадают с коэффициентами полинома устойчивости $Q_k(z)$. Отсюда следует, что если заданы коэффициенты полиномов устойчивости основной и промежуточной численных схем, то коэффициенты методов (3) однозначно определяются из линейных систем (8) и (10) с верхними треугольными матрицами B_i , $1 \leq i \leq m$.

Разлагая точное и приближенное решения в ряды Тейлора по степеням h , можно записать

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) &= y(t_n) + hf + \frac{h^2}{2} f'f + \frac{h^3}{6} [f''f^2 + f'^2f] + O(h^4), \\ y_{n+1} &= y_n + \left(\sum_{j=1}^m b_{1j} p_{mj} \right) hf_n + \left(\sum_{j=2}^m b_{2j} p_{mj} \right) h^2 f'_n f_n + \left(\sum_{j=3}^m b_{3j} p_{mj} \right) h^3 f''_n f_n + \\ &+ \frac{1}{2} \left(\sum_{j=2}^m b_{2j}^2 p_{mj} \right) h^3 f'_n f_n^2 + O(h^4), \end{aligned} \quad (11)$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном $y(t_n)$ и приближенном y_n решениях соответственно. Из сравнения соотношений (11) при условии $y_n = y(t_n)$ видно, что численная формула (3) будет иметь первый порядок точности, если $\sum_{j=1}^m b_{1j} p_{mj} = 1$. Требование второго порядка точности (3) означает выполнение дополнительного условия $\sum_{j=2}^m b_{2j} p_{mj} = 0.5$. Наконец, схема (3) будет иметь третий порядок, если дополнительно выполняются еще два соотношения

$$\sum_{j=3}^m b_{3j} p_{mj} = \frac{1}{6}, \quad \sum_{j=2}^m b_{2j}^2 p_{mj} = \frac{1}{3}. \quad (12)$$

Отсюда следует, что для построения m -стадийных методов первого и второго порядков точности в линейной системе (8) следует положить $c_{m1} = 1$ и $c_{m1} = 1$, $c_{m2} = 0.5$ соответственно. Задача о построении m -стадийных методов третьего порядка сводится к совместному решению линейной системы (8) и второго уравнения (12) при условии $c_{m1} = 1$, $c_{m2} = 0.5$, $c_{m3} = \frac{1}{6}$. Учитывая, что $b_{2j} = \alpha_j$, $2 \leq j \leq m$,

нетрудно видеть, что совместность (8), (12) эквивалентна совместности соотношений $\sum_{j=2}^m \alpha_j p_{mj} = \frac{1}{2}$,

$\sum_{j=2}^m \alpha_j^2 p_{mj} = \frac{1}{3}$, где α_j , $2 \leq j \leq m$, определены формулами (4).

3. Конструирование областей устойчивости. Для того чтобы воспользоваться соотношениями (8) и (10), требуются коэффициенты полиномов устойчивости. Функция устойчивости явного m -стадийного метода типа Рунге–Кутты представляет собой полином степени m . Через заданные коэффициенты схемы (3) можно вычислить коэффициенты этого полинома по формуле (8). Здесь рассмотрим задачу получения таких коэффициентов полинома устойчивости, чтобы область устойчивости схемы имела заданную, естественно “разумную”, форму и размер.

Итак, пусть заданы два числа k и m , $k \leq m$. Рассмотрим полиномы вида

$$Q_{m,k}(x) = 1 + \sum_{i=1}^k c_i x^i + \sum_{i=k+1}^m c_i x^i, \quad (13)$$

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

Обозначим экстремальные точки полинома (13) через x_1, \dots, x_{m-1} , причем $x_1 > x_2 > \dots > x_{m-1}$. Неизвестные коэффициенты c_i , $k+1 \leq i \leq m$, определим из условия, чтобы полином (13) в экстремальных точках x_i , $k \leq i \leq m-1$, принимал заданные значения:

$$Q_{m,k}(x_i) = F_i, \quad k \leq i \leq m-1. \tag{14}$$

Здесь $F(x)$ — некоторая заданная функция, $F_i = F(x_i)$. Для этого на x_i , $k \leq i \leq m-1$, и c_i , $k+1 \leq j \leq m$, рассмотрим алгебраическую систему уравнений

$$Q_{m,k}(x_i) = F_i, \quad Q'_{m,k}(x_i) = 0, \quad k \leq i \leq m-1, \tag{15}$$

где $Q'_{m,k}(x) = \sum_{i=1}^m ic_i x^{i-1}$. Перепишем (15) в виде, удобном для расчетов на ЭВМ. Для этого обозначим через y, z, g, r векторы с координатами

$$y_i = x_{k+i-1}, \quad z_i = c_{k+i}, \quad g_i = F_{k+i-1} - 1 - \sum_{j=1}^k c_j y_i^j, \quad r_i = - \sum_{j=1}^k j c_j y_i^{j-1}, \quad 1 \leq i \leq m-k, \tag{16}$$

через E_1, \dots, E_5 — диагональные матрицы с элементами на диагонали вида

$$\begin{aligned} e_1^{ii} &= k+i, \quad e_2^{ii} = \frac{1}{y_i}, \quad e_3^{ii} = \sum_{j=1}^k j c_j y_i^{j-1} + \sum_{j=1}^{m-k} (k+j) z_j y_i^{k+j-1}, \\ e_4^{ii} &= \sum_{j=2}^k j(j-1) c_j y_i^{j-2} + \sum_{j=1}^{m-k} (k+j)(k+j-1) z_j y_i^{k+j-2}, \quad e_5^{ii} = (-1)^{k+i-1}, \quad 1 \leq i \leq m-k, \end{aligned} \tag{17}$$

а через A матрицу с элементами $a^{ij} = y_i^{k+j}$, $1 \leq i, j \leq m-k$. Заметим, что компоненты векторов (16) и элементы матриц (17) и A зависят от чисел m и k , причем $g = g(y)$, $r = r(y)$, $E_2 = E_2(y)$, $E_3 = E_3(y, z)$, $E_4 = E_4(y, z)$ и $A = A(y)$. Мы опустили индексы и аргументы для упрощения записи. С использованием введенных обозначений задачу (15) можно записать в виде

$$Az - g = 0, \quad E_2 A E_1 z - r = 0. \tag{18}$$

Система (18) является плохо обусловленной, что приводит к определенным трудностям при использовании для ее решения метода простой итерации. Для сходимости метода Ньютона требуются хорошие начальные условия, что в данном случае есть проблема. Если в (15) положить $F_i = (-1)^i$, $k \leq i \leq m-1$, т.е. 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 полинома Чебышева, рассматриваемого на отрезке $[-2m^2, 0]$, где m есть степень полинома (13). Экстремальные точки можно вычислить по формуле

$$y_i = m^2 \left(\cos \frac{i\pi}{m} - 1 \right), \quad 1 \leq i \leq m-1. \tag{19}$$

Подставляя (19) в первую формулу (18), получим коэффициенты полинома Чебышева, для которого $|Q_{m,1}(x)| \leq 1$ при $x \in [-2m^2, 0]$. При любом k в качестве начальных условий можно взять (19) и, как показывают расчеты, достигается хорошая сходимость. Если же $F \neq (-1)^i$, $k \leq i \leq m-1$, то выбор начальных условий является, вообще говоря, искусством.

Опишем один способ решения (15) или (18), который не нуждается в хороших начальных условиях. Для численного решения (18) используем метод установления, который заключается в том, что для стационарной задачи строится некоторый нестационарный процесс, решение которого с течением времени устанавливается к решению исходной задачи. Итак, рассмотрим задачу Коши

$$\frac{dy}{dt} = E_5 (E_2 A E_1 A^{-1} g - r), \quad y(0) = y_0, \tag{20}$$

где элементы матрицы E_5 определены в (17). Ясно, что после определения стационарной точки (20) коэффициенты полинома устойчивости можно вычислить из первой системы (18). Заметим, что при использовании матрицы E_5 все собственные значения матрицы Якоби задачи (20) имеют отрицательные

вещественные части, т.е. задача (20) устойчива. Из результатов расчетов следует, что (20) является жесткой задачей. Методы решения таких задач предполагают вычисление матрицы Якоби, что в случае (20) связано с определенными трудностями. Поэтому для ее решения используем метод второго порядка точности с численным вычислением и замораживанием матрицы Якоби [6], который применительно к задаче $y' = f(y)$, $y(0) = y_0$, имеет вид

$$y_{n+1} = y_n + ak_1 + (1-a)k_2, \quad D_n k_1 = h_n f(y_n), \quad D_n k_2 = k_1, \quad (21)$$

где k_1 и k_2 — стадии метода, $D_n = E - ah_n A_n$, E — единичная матрица, h_n — шаг интегрирования, A_n — некоторая матрица, представимая в виде $A_n = f'_n + h_n R_n + O(h_n^2)$, $f'_n = \frac{\partial f(y_n)}{\partial y}$ — матрица Якоби системы (1), R_n — не зависящая от шага интегрирования произвольная матрица и $a = 1 - 0.5\sqrt{2}$. Если матрица Якоби f'_{n-k} вычислена k шагов назад, имеем $A_n = \frac{\partial f(y_{n-k})}{\partial y} = f'_n - kh_n R_n + O(h_n^2)$, где $0 \leq k \leq I_h$, I_h — максимальное число шагов с замороженной матрицей, $R_n = f'_n f_n$. Если матрица Якоби вычисляется численно с шагом $s_j = d_j h_n$, где d_j — постоянные, то получим, что элементы $r_{n,ij}$ матрицы R_n определяются по формулам $r_{n,ij} = 0.5d_j \frac{\partial^2 f_i(y_n)}{\partial y_j^2}$, $1 \leq i, j \leq N$. Так как при записи схемы (21) матрица R_n произвольная, то из приведенных выше рассуждений следует, что вопрос о замораживании и численной аппроксимации матрицы Якоби можно рассматривать одновременно [7].

Для контроля точности метода (21) можно применять оценку ошибки $\varepsilon_n = (a - 1/3)h^2 f'_n f_n + O(h_n^3)$ (см. [7]). Так как $k_2 - k_1 = ah_n^2 f'_n f_n + O(h_n^3)$, то ε_n с точностью до членов $O(h_n^3)$ можно оценить по приближенной формуле $\varepsilon(j_n) = a^{-1}(a - 1/3)D_n^{1-j_n}[k_2 - k_1]$, $1 \leq j_n \leq 2$. В результате для контроля точности схемы (21) можно применять неравенство

$$\varepsilon(j_n) \leq \frac{a\varepsilon}{|a - 1/3|}, \quad 1 \leq j_n \leq 2, \quad (22)$$

где ε — требуемая точность интегрирования, $\|\cdot\|$ — некоторая норма в \mathbb{R}^N , а целочисленная переменная j_n выбирается наименьшей, при которой выполняется неравенство (22). Отметим одну важную особенность построенного неравенства (22). Схема (21) L -устойчива, т.е. для ее функции устойчивости $Q(x)$ имеет место соотношение $Q(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow -\infty$. Так как для точного решения $y(t_{n+1}) = \exp(x)y(t_n)$ задачи $y' = \lambda y$, $\text{Re}(\lambda) < 0$, выполняется аналогичное свойство, то естественным будет требование стремления к нулю оценки ошибки при $x \rightarrow -\infty$. Однако для $\varepsilon(1)$ это свойство не выполняется — данная оценка ведет себя A -устойчивым образом. С целью исправления асимптотического поведения ошибки вместо $\varepsilon(1)$ введена оценка $\varepsilon(j_n)$, $1 \leq j_n \leq 2$. В этом случае поведение оценки ошибки при $j_n = 2$ будет согласовано с поведением точного решения тестовой задачи при $x \rightarrow -\infty$. Подчеркнем, что в смысле главного члена $h^2 f' f$ оценки $\varepsilon(1)$ и $\varepsilon(2)$ совпадают. Использование $\varepsilon(j_n)$ фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат. Это связано с тем, что $\varepsilon(j_n)$ при $j_n = 2$ проверяется только в том случае, если оно нарушено при $j_n = 1$. Такая ситуация встречается достаточно редко.

Шаг численного дифференцирования s_j , $1 \leq j \leq N$, берется по формуле $s_j = \max(10^{-14}, 10^{-7}|y_j|)$. Решение жестких задач осуществляется с двойной точностью в силу плохой обусловленности матрицы Якоби системы (20). Постоянная 10^{-7} введена в формулу определения шага численного дифференцирования с целью выдвигания его на середину разрядной сетки. Теперь j -й столбец a_n^j матрицы A_n вычисляется по формуле $a_n^j = \frac{f(y_1, \dots, y_j + s_j, \dots, y_N) - f(y_1, \dots, y_j, \dots, y_N)}{s_j}$, $1 \leq j \leq N$, т.е. для задания A_n требуется N вычислений правой части задачи (20). 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 также 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,
- 4) $\|\varepsilon(1)\| > \|\varepsilon(2)\|$.

В задаче Коши (20) начальные условия для всех m и k выбираются по формуле (19). Заметим, что A^{-1} не вычисляется, а решается линейная система алгебраических уравнений $Aw = g$. Теперь перейдем к численному исследованию влияния функции F (см. (14)) на размер и форму области устойчивости. Сначала докажем следующую теорему.

Теорема. Пусть в (15) имеет место $F_i = (-1)^i$, $k \leq i \leq m - 1$, и пусть $|Q_{m,k}(x_i)| \leq 1$ при $1 \leq i \leq k - 1$. Тогда среди всех полиномов вида (13) для построенного полинома $Q_{m,k}(x)$ выполняется неравенство $|Q_{m,k}(x)| \leq 1$ на максимальном интервале $[\gamma_m, 0]$, где $\gamma_m < x_{m-1}$, $Q(\gamma_m) = (-1)^m$.

Доказательство. Рассмотрим одновременно полином $P_{m,k}(x)$ вида $P_{m,k}(x) = 1 + \sum_{i=1}^k c_i x^i + \sum_{i=k+1}^m b_i x^i$, $x \leq 0$, где b_i , $k + 1 \leq i \leq m$, есть некоторый набор коэффициентов. Пусть $|P_{m,k}(x)| \leq 1$ на промежутке $[\alpha_m, 0]$, $\alpha_m < 0$. Предположим, что $|P_{m,k}(x_i)| \leq 1 - \varepsilon$ при $k \leq i \leq m - 1$ и, в то же время, $\alpha_m < \gamma_m$, где $0 < \varepsilon < 1$, а α_m есть функция от ε , $\alpha_m = \alpha_m(\varepsilon)$. Рассмотрим $Q_{m,k}(x)$ и $P_{m,k}(x)$ на промежутке $[\alpha_m(\varepsilon), 0]$. Полином

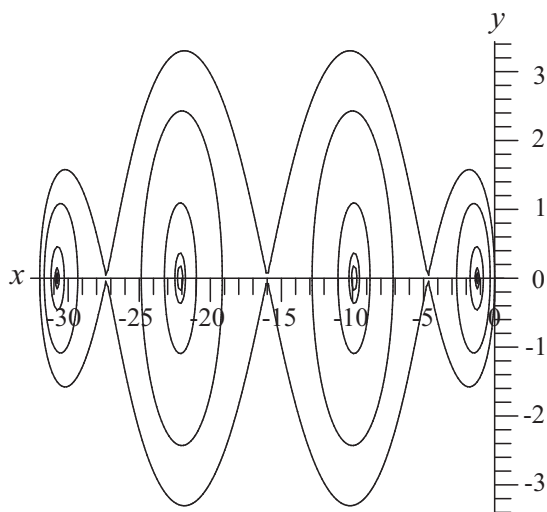
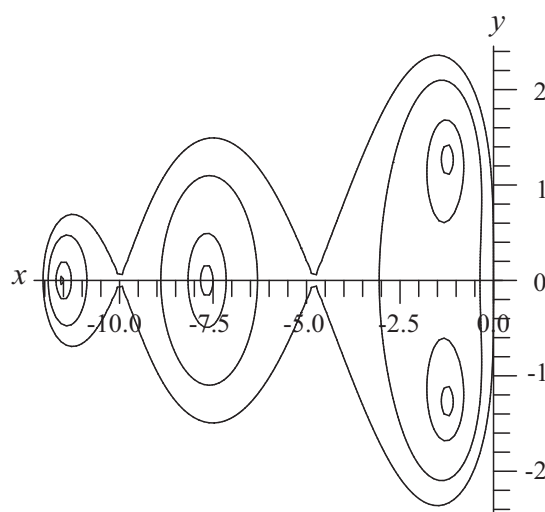
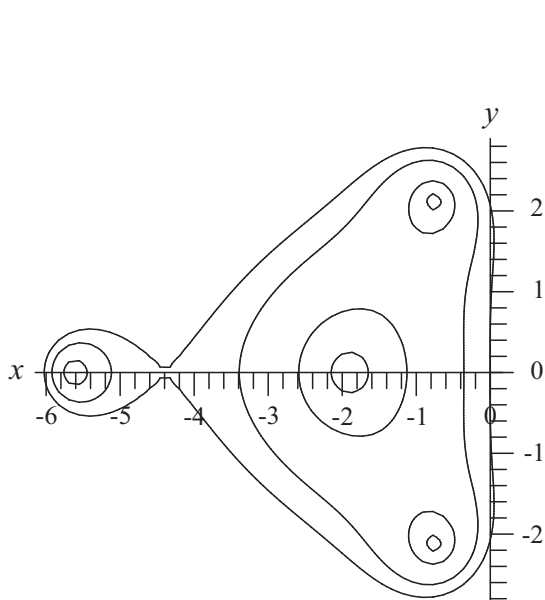
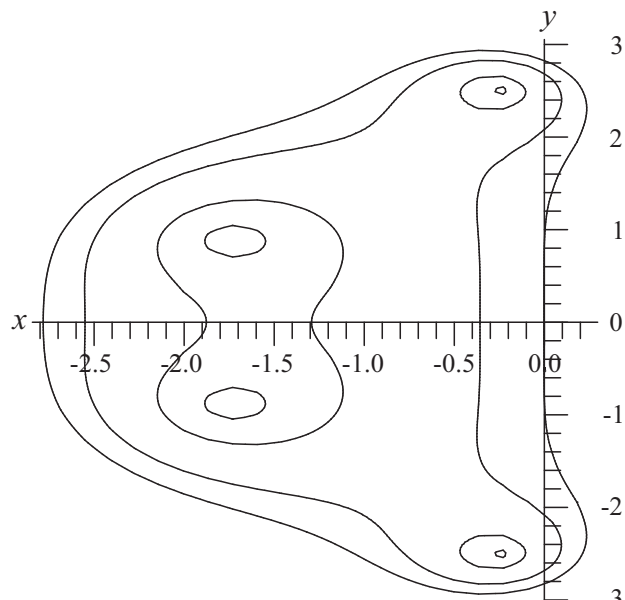
$$Q_{m,k}(x) - P_{m,k}(x) = x^{k+1} \sum_{i=k+1}^m (c_i - b_i) x^{i-k-1} \tag{23}$$

имеет степень меньше либо равную m . В то же время нуль является его $(k + 1)$ -кратным корнем, и, так как $\text{sign} [Q_{m,k}(x_i) - P_{m,k}(x_i)] = (-1)^i$, $k \leq i \leq m - 1$, $\text{sign} [Q_{m,k}(\alpha_m(\varepsilon)) - P_{m,k}(\alpha_m(\varepsilon))] = (-1)^m$, полином меняет знак между любыми двумя точками x_k, \dots, x_{m-1} , $\alpha_m(\varepsilon)$. Следовательно, на промежутке $[\alpha_m(\varepsilon), x_k]$ полином $[Q_{m,k}(x) - P_{m,k}(x)]$ имеет дополнительно $m - k$ корней. В результате получим, что из условия $\alpha_m(\varepsilon) < \gamma_m$ следует, что полином (23) степени меньше либо равной m имеет $m + 1$ корень. Из полученного противоречия следует, что $\alpha_m(\varepsilon) \geq \gamma_m$. Окончательное доказательство получим, если выбрать α_m как точную верхнюю грань $\alpha_m(\varepsilon)$ по всем ε .

Таким образом, задача о построении метода с максимальным интервалом устойчивости сводится к решению системы (15) при условии $F_i = (-1)^i$, $k \leq i \leq m - 1$. Из результатов расчетов следует, что коэффициент c_m полинома (13) убывает с ростом m и, в частности, при $m = 13$ и $k = 2$ величина c_m имеет порядок 10^{-20} . Поэтому применение (13) при $m \geq 13$ представляется проблематичным на современных ЭВМ.

Таблица 1

m	k	γ	c_2	c_3	c_4	
$u = 1$						
4	1	-32	0.15625	0.78125×10^{-2}	$0.1220703125 \times 10^{-3}$	рис. 1
4	2	-12.05		$0.78084483452775 \times 10^{-1}$	$0.36084539218728 \times 10^{-2}$	рис. 2
4	3	-6.03			$0.18455702268873 \times 10^{-1}$	рис. 3
4	4	-2.78				рис. 4
$u = 0.9$						
4	1	-29.9	0.16491828888770	$0.87735109261266 \times 10^{-2}$	$0.14625153854464 \times 10^{-3}$	—
4	2	-11.65		$0.80023047470068 \times 10^{-2}$	$0.38169926858491 \times 10^{-2}$	—
4	3	-5.91			$0.18738403407411 \times 10^{-1}$	—
$u = 0.5$						
4	1	-21.80	0.21254252143474	$0.15291951589356 \times 10^{-1}$	$0.35076567511682 \times 10^{-3}$	—
4	2	-9.75		$0.91036842279128 \times 10^{-1}$	$0.51553618898240 \times 10^{-2}$	—
4	3	-5.33			$0.20266812077634 \times 10^{-1}$	—
$u = 0.3$						
4	1	-17.46	0.24956372436363	$0.22021550790745 \times 10^{-1}$	$0.63043330899815 \times 10^{-3}$	рис. 5
4	2	-8.35		0.10176908319354	$0.67355258124605 \times 10^{-2}$	рис. 6
4	3	-4.96			$0.21481671634505 \times 10^{-1}$	рис. 7

Рис. 1. $m = 4, k = 1, u = 1.0$ Рис. 2. $m = 4, k = 2, u = 1.0$ Рис. 3. $m = 4, k = 3, u = 1.0$ Рис. 4. $m = 4, k = 4, u = 1.0$

4. Результаты численных расчетов. Кратко опишем результаты численного эксперимента по определению влияния функции F (см. (15)) на размер и форму области устойчивости. Ниже приведены: m — степень полинома устойчивости, или число стадий метода (2); k — число заданных коэффициентов полинома устойчивости, или порядок точности метода; γ — длина интервала устойчивости; c_i , $k + 1 \leq i \leq m$, — коэффициенты полинома устойчивости, причем $c_i = 1/i!$ при $1 \leq i \leq k$. В расчетах выбрано относительно небольшое значение параметра m , равное четырем. Сначала для задания F рассмотрим формулу

$$F_i = (-1)^i u, \quad k \leq i \leq m - 1, \quad (24)$$

где u — некоторое положительное число. На рисунках приведены изолинии $|Q(x)| = 1, 0.7, 0.3$ и 0.1 .

Если рассматривать задачу построения полиномов с максимальным интервалом устойчивости, то нужно положить $u = 1$. Области устойчивости таких методов “почти” многосвязные. Поэтому, если требуется, чтобы интервал устойчивости был достаточно велик, можно выбрать $u = 0.9$. Решая (20), имеем значения, представленные в табл. 1. Кроме того, в этой таблице указаны значения, полученные при $u = 0.5$ и при $u = 0.3$.

При значениях F , равных $0.1, 0.3$ и 0.1 , корни полинома устойчивости комплексные. В результате при $u = 0.3$ имеем значения, представленные в табл. 2. Отметим, что при уменьшении значения u область

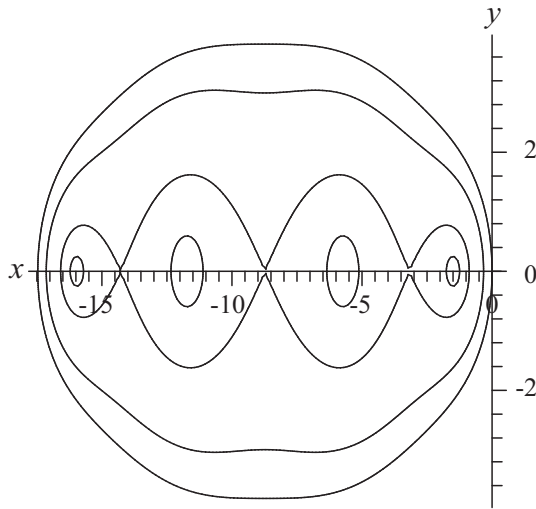


Рис. 5. $m = 4, k = 1, u = 0.3$

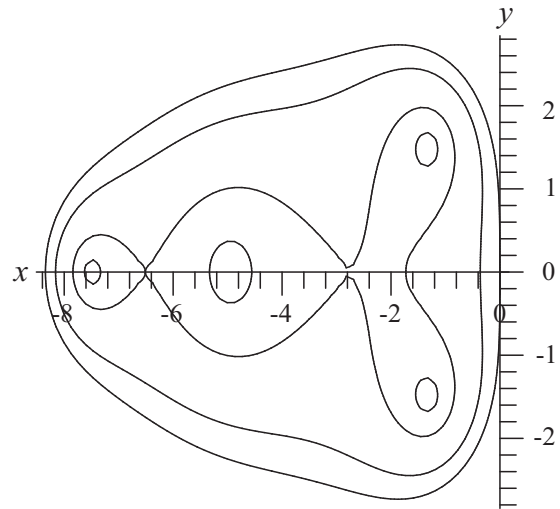


Рис. 6. $m = 4, k = 2, u = 0.3$

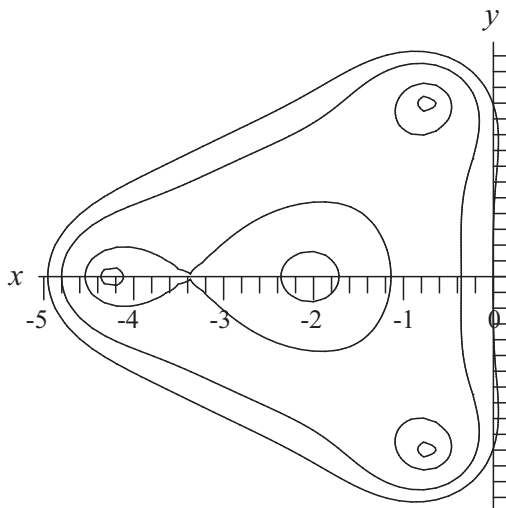


Рис. 7. $m = 4, k = 3, u = 0.3$

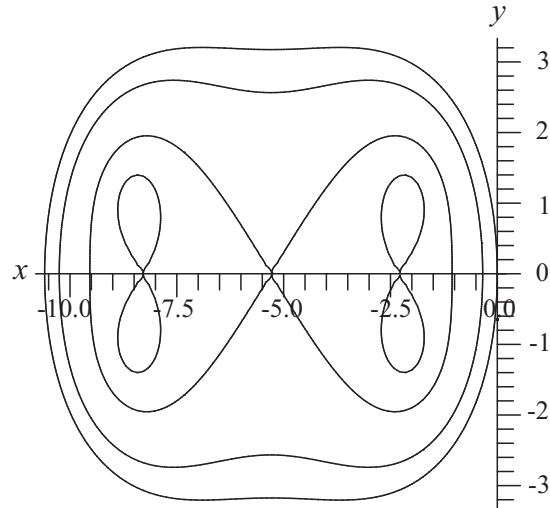


Рис. 8. $m = 4, k = 1, F = 0.1, 0.3, 0.1$

Таблица 2

m	k	γ	c_2	c_3	c_4	
4	1	-10.59	0.37216982743909	$0.52440027420933 \times 10^{-1}$	$0.24749608242196 \times 10^{-2}$	рис. 8

устойчивости по вещественной оси сокращается, а по мнимой оси “раздувается”. Поэтому появление мнимых частей собственных значений матрицы Якоби дифференциальной задачи за счет ошибок округлений не будет приводить к сокращению области устойчивости.

Из анализа графических изображений областей устойчивости следует, что форма, размер и структура области устойчивости зависят от расположения корней полинома устойчивости (13) в комплексной плоскости $\{h\lambda\}$. На расположение корней можно влиять выбором функции F . При решении задач, собственные значения матрицы Якоби которых имеют большие мнимые части и решения которых носят осциллирующий характер, часто не требуется значительного расширения 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 значений нужно, чтобы на некотором участке мнимой оси выполнялось условие $|Q_{m,k}(x)| = 1$. При повышении порядка точности, т.е. с ростом k , это условие выполняется само по себе. Для методов низкого порядка расширения области устойчивости по мнимой оси можно добиться двумя путями, которые можно комбинировать.

Таблица 3

m	k	γ	c_2	c_3	c_4	
4	1	-14.48	0.26137220423406	$0.26563274252502 \times 10^{-1}$	$0.91728980912922 \times 10^{-3}$	рис. 9

Таблица 4

m	k	γ			
5	1	-17.06	$c_2 = 0.38097306606596$ $c_4 = 0.38792470657322 \times 10^{-2}$	$c_3 = 0.59001328331104 \times 10^{-1}$ $c_5 = 0.90974734200777 \times 10^{-4}$	рис. 10

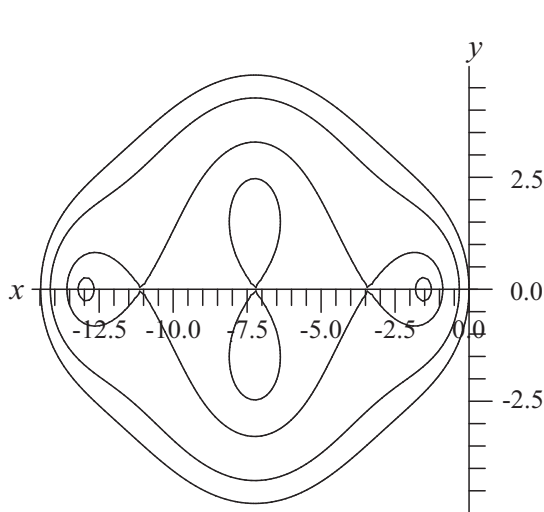


Рис. 9. $m = 4, k = 1, F = -0.3, -0.1, -0.3$

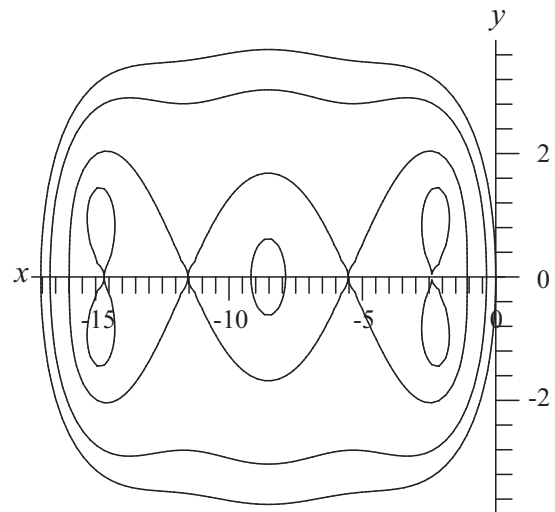


Рис. 10. $m = 5, k = 1, F = 0.1, 0.3, -0.3, -0.1$

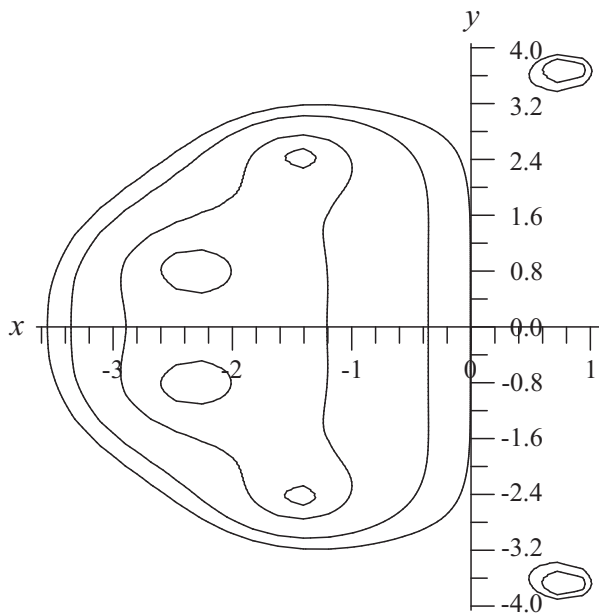


Рис. 11. $m = 6, k = 6$

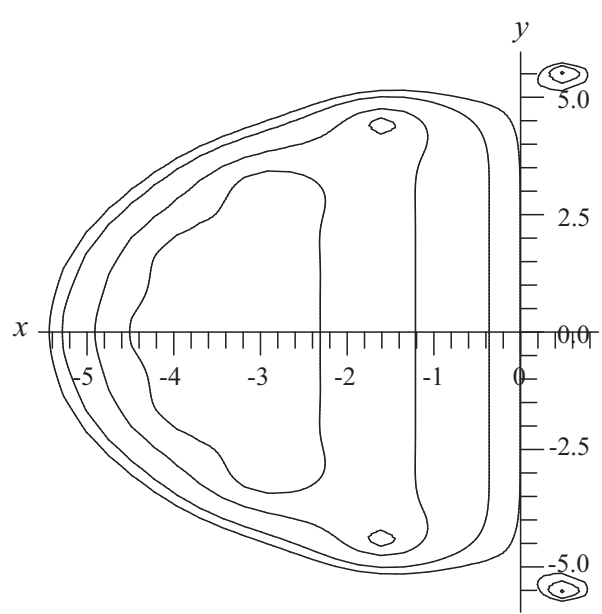


Рис. 12. $m = 11, k = 11$

Во-первых, за счет сближения действительных корней полинома устойчивости. При вычислении F по формуле (24) это достигается выбором достаточно малого значения параметра u . Однако это приводит к значительному сокращению интервала устойчивости и, что более существенно, для методов первого порядка точности не приводит к включению мнимой оси в область устойчивости.

Во-вторых, за счет выбора коэффициентов $c_j, k + 1 \leq j \leq m$, таким образом, чтобы корни полинома

устойчивости были комплексными. При четном m для этого достаточно выбрать функцию F так, чтобы выполнялось неравенство $0 < F \leq 1$. В случае нечетного m один корень обязательно действительный и, в зависимости от того, как он расположен относительно комплексных корней, изменяется размер, форма и структура области устойчивости. В частности, при $m = 5$, если действительный корень расположен между комплексными, область устойчивости “почти прямоугольная”. При значениях F , равных -0.3 , -0.1 и -0.3 имеем значения, представленные в табл. 3, а при значениях F , равных 0.1 , 0.3 , -0.3 и -0.1 имеем значения, представленные в табл. 4.

Отметим одну важную особенность полиномов устойчивости. При увеличении порядка точности при $m = k$ область устойчивости становится многосвязной. При $k = 6$ (рис. 11) происходит отделение пары комплексно-сопряженных корней, которые в правой полуплоскости образуют “островки устойчивости”. Вторая пара корней отрывается при $k = 11$ (рис. 12). Представляется, что этот процесс носит регулярный характер. Становится понятным, почему при повышении порядка точности область устойчивости не увеличивается достаточно быстро.

5. Заключение. Предложенный алгоритм численного конструирования областей устойчивости явных методов позволяет создавать алгоритмы переменного порядка и шага для решения умеренно жестких задач. В качестве критерия выбора эффективной численной схемы можно применять неравенство для контроля устойчивости [5]. Отметим, что области устойчивости могут быть получены под конкретный набор задач, если имеется информация о примерном расположении собственных значений матрицы Якоби в комплексной плоскости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хайер 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 № 177 ОВМ АН СССР. М., 1987.
4. Новиков В.А., Новиков Е.А. Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // Докл. АН СССР. 1984. **277**, № 5. 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. **8**, № 2. 168–176.
6. Новиков А.Е., Новиков Е.А. L -устойчивый (2,1)-метод решения жестких неавтономных задач // Вычислительные технологии. 2008. **13**. 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 № 20 ВЦ СО АН СССР. Красноярск, 1988.

Поступила в редакцию
13.04.2009