

УДК 519.622

L-УСТОЙЧИВЫЙ (4,2)-МЕТОД ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ ЗАДАЧ

© 2011 Е.А. Новиков¹

Исследованы (m,k) -методы решения жестких задач, в которых на каждом шаге два раза вычисляется правая часть системы дифференциальных уравнений. Показано, что максимальный порядок точности L -устойчивого $(m,2)$ -метода равен четырем. Построен $(4,2)$ -метод максимального порядка.

Ключевые слова: жесткая задача, методы Розенброка, (m,k) -методы, L -устойчивость.

Введение

При решении задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений широкое распространение получили 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, используется 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 [3–4], что ограничивает применение данных методов расчетами с небольшой точностью или задачами небольшой размерности.

В [5–6] предложен класс (m,k) -методов, в которых нахождение стадий не связывается с обязательным вычислением правой части системы дифференциальных уравнений. Числа m и k означают соответственно число стадий и количество вычислений правой части на шаг интегрирования. Реализация (m,k) -методов так же проста, как и методов Розенброка, однако (m,k) -схемы имеют лучшие свойства

¹Новиков Евгений Александрович (novikov@icm.krasn.ru), Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Российская Федерация, г. Красноярск, Академгородок, ИВМ СО РАН.

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

Здесь исследуются (m, k) -методы решения жестких задач, в которых на каждом шаге два раза ($k=2$) вычисляется правая часть системы дифференциальных уравнений. Показано, что максимальный порядок точности L -устойчивого $(m, 2)$ -метода равен четырем, и построен $(4, 2)$ -метод максимального порядка.

1. Схемы типа Розенброка

Далее будет рассматриваться задача Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y' = f(y), y(t_0) = y_0, t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1.1)$$

где y и f — вещественные N -мерные векторные функции, t — независимая переменная. Рассмотрение автономной задачи (1.1) не снижает общности. Введением дополнительной переменной $y'_{N+1} = 1$, $y_{N+1}(t_0) = t_0$ всегда можно неавтономную задачу

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

привести к автономному виду.

Для решения задачи (1.1) рассмотрим методы типа Розенброка вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i, \\ D_n &= E - ahf'_n, \\ D_n k_i &= hf(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \end{aligned} \quad (1.2)$$

где E — единичная матрица, $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ — матрица Якоби системы (1.1), k_i , $1 \leq i \leq m$, — стадии метода, a , p_i , β_{ij} , $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq i-1$, — коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (1.2). В настоящее время методы типа Розенброка трактуются более широко. Под ними понимаются все численные схемы, в которых матрица Якоби или ее аппроксимация вводятся непосредственно в формулу интегрирования. Численные формулы вида (1.2) можно получить из класса полуявных методов типа Рунге–Кутты, если в них при вычислении каждой стадии ограничиться одной итерацией метода Ньютона. Однако в (1.2) при вычислении стадий необходимо решать только линейные системы алгебраических уравнений, в то время как в неявных или полуявных методах типа Рунге–Кутты требуется использовать итерационный процесс типа ньютоновского.

Рассмотрим в качестве примера одностадийный метод типа Розенброка

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1, D_n k_1 = hf(y_n), \quad (1.3)$$

где матрица D_n определена в (1.2). Разлагая приближенное решение y_{n+1} в ряд Тейлора по степеням h до членов с h^2 включительно, получим

$$y_{n+1} = y_n + p_1 h f_n + ap_1 h^2 f'_n f_n + O(h^3),$$

где $f_n = f(y_n)$ и $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ — матрица Якоби системы (1.1). Представление точного решения $y(t_{n+1})$ в виде ряда Тейлора в окрестности точки t_n имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + 0,5h^2 f' f + O(h^3),$$

где элементарные дифференциалы f и $f'f$ вычислены на точном решении $y(t_n)$. Сравнивая ряды для точного и приближенного решений видим, что одностадийная схема Розенброка (1.3) будет иметь второй порядок точности, если $p_1 = 1$ и $ap_1 = 0,5$, то есть $p_1 = 1$ и $a = 0,5$.

Теперь исследуем устойчивость данной численной формулы. Для этого применим его для решения скалярного тестового уравнения $y' = \lambda y$, где λ есть произвольное комплексное число, $\Re(\lambda) < 0$. Параметр λ интерпретируется как некоторое собственное число матрицы Якоби задачи (1.1). Обозначая $x = h\lambda$, получим $y_{n+1} = Q(x)y_n$, где функция устойчивости $Q(x)$ имеет вид

$$Q(x) = [1 + (p_1 - a)x]/(1 - ax).$$

Подставляя сюда значения коэффициентов $p_1 = 1$ и $a = 0,5$, имеем

$$Q(x) = (1 + 0,5x)/(1 - 0,5x),$$

то есть схема (1.3) второго порядка точности является A-устойчивой. Из вида функции устойчивости следует, что эта схема будет L-устойчивой, если $p_1 = a = 1$, что противоречит второму порядку точности. Обычно отказываются от второго порядка в пользу L-устойчивости, что приводит к более эффективному методу, хотя и первого порядка.

В случае большой размерности задачи (1.1) основные вычислительные затраты связаны с обращением матрицы D_n . Обычно вместо обращения решается линейная система алгебраических уравнений $D_n k_1 = hf(y_n)$ с применением LU-разложения матрицы D_n с выбором главного элемента либо по столбцу, либо по строке, а иногда по всей матрице. Декомпозиция матрицы D_n приводит к порядку N^3 арифметических операций. Обратный ход метода Гаусса стоит порядка N^2 арифметических операций. Таким образом, при большой размерности исходной задачи (1.1) общие вычислительные затраты определяются временем декомпозиции матрицы D_n .

Одновременно с численной формулой Розенброка (1.3) рассмотрим метод следующего вида:

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2, \quad D_n k_1 = hf(y_n), \quad D_n k_2 = k_1. \quad (1.4)$$

С использованием разложений в виде рядов Тейлора точного и приближенного решений получим, что требование второго порядка точности схемы (1.4) приводит к соотношениям

$$p_1 + p_2 = 1, \quad a(p_1 + 2p_2) = 0,5.$$

Условие L-устойчивости (1.4) записывается в виде квадратичного уравнения относительно коэффициента a , то есть

$$a^2 + 2a + 0,5 = 0.$$

Это уравнение имеет два корня $a_1 = 1 - 0,5\sqrt{2}$ и $a_2 = 1 + 0,5\sqrt{2}$. Обычно в расчетах применяется $a = a_1$, потому что в этом случае меньше коэффициент в локальной ошибке схемы (1.4). В результате имеем коэффициенты

$$a = 1 - 0,5\sqrt{2}, \quad p_1 = a, \quad p_2 = 1 - a$$

L-устойчивой численной формулы (1.4) второго порядка точности.

Отметим, что в случае большой размерности задачи (1.1) методы (1.3) и (1.4) различаются на количество арифметических операций, необходимых для выполнения обратного хода в методе Гаусса, которые на фоне декомпозиции матрицы D_n

незначительны. В то же время (1.4) имеет второй порядок точности, а численная схема Розенброка только первый, и поэтому (1.4) будет предпочтительнее при решении больших задач.

Применение стадий типа k_2 было положено в основу (m, k) -методов.

2. Класс (m, k) -методов решения жестких задач

Пусть Z есть множество целых чисел, и заданы $m, k \in Z$, $k \leq m$. Обозначим через M_m , M_k и J_i множества вида

$$\begin{aligned} M_m &= \{i \in Z \mid 1 \leq i \leq m\}, \\ M_k &= \{m_i \in M_m \mid 1 = m_1 < m_2 < \dots < m_k \leq m\}, \\ J_i &= \{m_{j-1} \in M_m \mid j > 1, m_j \in M_k, m_j \leq i\}, \quad 1 < i \leq m. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Рассмотрим следующие численные схемы:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i, \quad D_n = E - ahf'_n, \\ D_n k_i &= hf(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j) + \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j + hf'_n \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} k_j, \quad i \in M_k, \\ D_n k_i &= k_{i-1} + \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j + hf'_n \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} k_j, \quad i \in M_m \setminus M_k, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где k_i — стадии метода, a , p_i , β_{ij} , α_{ij} и c_{ij} — постоянные коэффициенты, h — шаг интегрирования, E — единичная матрица, $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ — матрица Якоби системы (1.1), k — количество вычислений функции f , m — число стадий или количество обратных ходов в методе Гаусса. На каждом шаге интегрирования осуществляются одно вычисление матрицы Якоби и одна декомпозиция матрицы D_n . Допускается аппроксимация матрицы Якоби f'_n матрицей A_n вида

$$A_n = f'_n + h^2 B_n + O(h^3),$$

где матрица B_n не зависит от размера шага интегрирования. Данное условие позволяет применять (2.2) с замораживанием как аналитической, так и численной матрицы Якоби [7]. Так как k и m полностью определяют затраты на шаг, а набор чисел m_1, \dots, m_k из множества M_k только распределяет их внутри шага, то методы типа (2.2) названы (m, k) -методами.

Отметим, что при $k = m$ и $\alpha_{ij} = c_{ij} = 0$ методы (2.2) совпадают со схемами типа Розенброка (1.2), а при $k = m$ и $\alpha_{ij} = 0$ — с ROW-методами [2]. В отличие от ROW-методов в численных формулах (2.2) более точно определены затраты на шаг интегрирования и более правильно описана область определения коэффициентов численных формул, что упрощает их исследование и делает их предпочтительнее.

Заметим так же, что при рассмотрении методов такого типа, как правило, все авторы изучали случай $k = m$, то есть когда число стадий и количество вычислений правой части совпадают. В этом случае k -стадийную схему (2.2) можно поставить в соответствие k -стадийной полуявной формуле типа Рунге–Кутта [2], при реализации которой на каждом шаге используется одна матрица размерности N . Относительно таких численных формул известно, что нельзя построить k -стадийную схему выше $(k + 1)$ -го порядка точности.

При рассмотрении методов (2.2) при $m > k$ можно показать, что при k , равном 1 и 2, можно построить численные формулы порядка точности, равном $2k$. Таким образом, среди методов (2.2) имеются такие численные схемы, что в смысле точности они не хуже неявных методов типа Рунге–Кутты и в то же время они требуют существенно меньших вычислительных затрат при реализации.

Трудности с замораживанием матрицы Якоби в методах типа Розенброка привели к поискам их модификаций. Основное отличие приведенных здесь методов (2.2) от существующих заключается в том, что в данных численных схемах стадия метода не связывается с обязательным вычислением правой части дифференциальной задачи. За счет этого проблема использования одной матрицы Якоби на нескольких шагах упрощается.

3. Представление стадий в виде рядов Тейлора

При исследовании (m, k) -методов (2.2) потребуются представления в виде рядов Тейлора в окрестности точки y_n до членов с h^4 включительно стадий k_i , $1 \leq i \leq 4$, вида

$$\begin{aligned} D_n k_1 &= hf(y_n), & D_n k_2 &= k_1, \\ D_n k_3 &= hf(y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2) + \alpha_{32}k_2, \\ D_n k_4 &= k_3 + \alpha_{42}k_2. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Данные ряды можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf_n + ah^2 f'_n f_n + a^2 h^3 f''_n f_n + a^3 h^4 f'''_n f_n + O(h^5), \\ k_2 &= hf_n + 2ah^2 f'_n f_n + 3a^2 h^3 f''_n f_n + 4a^3 h^4 f'''_n f_n + O(h^5), \\ k_3 &= (1 + \alpha_{21})hf_n + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32})h^2 f'_n f_n + \\ &+ h^3[(a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32})f''_n f_n + 0,5(\beta_{31} + \\ &+ \beta_{32})^2 f''_n f_n] + h^4[(a^3 + 3a^2\beta_{31} + 6a^2\beta_{32} + \\ &+ 10a^3\alpha_{32})f'''_n f_n + a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})f''_n f'_n f_n^2 + \\ &+ 0,5a(\beta_{31} + \beta_{32})^2 f'_n f''_n f_n^2 + \frac{1}{6}(\beta_{31} + \beta_{32})^3 f'''_n f_n^3] + O(h^5), \\ k_4 &= (1 + \alpha_{32} + \alpha_{42})hf_n + (2a + \beta_{31} + \beta_{32} + 4a\alpha_{32} + 3a\alpha_{42})h^2 f'_n f_n + \\ &+ h^3[(3a^2 + 3a\beta_{31} + 4a\beta_{32} + 10a^2\alpha_{32} + 6a^2\alpha_{42})f''_n f_n + \\ &+ 0,5(\beta_{31} + \beta_{32})^2 f''_n f_n] + h^4[(4a^3 + 6a^2\beta_{31} + 10a^3\alpha_{32} + \\ &+ 10a^3\alpha_{42})f'''_n f_n + a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})f''_n f'_n f_n^2 + \\ &+ a(\beta_{31} + \beta_{32})^2 f'_n f''_n f_n^2 + \frac{1}{6}(\beta_{31} + \beta_{32})^3 f'''_n f_n^3] + O(h^5). \end{aligned} \quad (3.2)$$

При записи (3.2) применялось представление D_n^{-1} в виде ряда Тейлора

$$D_n^{-1} = E + ahf'_n + a^2 h^2 f''_n + a^3 h^3 f'''_n + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} a^i h^i f_n^{(i)}.$$

Ниже соотношения (3.2) будут использоваться при построении конкретных методов. Далее потребуется разложением точного решения $y(t_{n+1})$ в ряд Тейлора в окрестности точки t_n до членов с h^4 включительно, которое имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + 0,5h^2 f' f +$$

$$\begin{aligned} & + \frac{1}{6}h^3[f'^2 f + f'' f^2] + \frac{1}{24}h^4[f'^3 f + \\ & + f' f'' f^2 + 3f'' f' f^2 + f''' f^3] + O(h^5), \end{aligned} \quad (3.3)$$

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

4. L -устойчивый метод четвертого порядка

Прежде чем перейти к исследованию (m, k) -методов с двумя вычислениями правой части дифференциальной задачи, докажем следующее утверждение.

Теорема. Пусть в формуле (2.2) имеет место $k = 2$. Тогда при любом выборе множеств (2.1) и при любом значении параметра m нельзя построить метод (2.2) выше четвертого порядка точности.

Для простоты доказательство проведем для скалярной задачи (1.1), точное решение которой можно записать в виде

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) = & y(t_n) + hf + \frac{h^2}{2}f'f + \frac{1}{6}h^3[f'^2 f + f'' f^2] + \\ & + \frac{1}{24}h^4[f'^3 f + 4f' f'' f^2 + f''' f^3] + \\ & + \frac{1}{120}h^5[f'^4 f + 4f' f''' f^3 + 5f'^2 f'' f^2 + f''^2 f^3 + f^{IV} f^4] + O(h^6), \end{aligned} \quad (4.1)$$

где элементарные дифференциалы вычислены в точке $y(t_n)$.

С использованием (3.2) имеем, что при любом выборе множества M_k второе вычисление функции f будет осуществляться в точке

$$y_{n,c} = y_n + \sum_{i=1}^4 c_i h^i f_n^{i-1} f_n + O(h^5),$$

где c_i , $1 \leq i \leq 4$, определяются через коэффициенты схемы (2.2). Поэтому для доказательства сформулированного утверждения достаточно показать, что в представлении функции $hf(y_{n,c})$ в виде ряда Тейлора в окрестности точки y_n не содержится слагаемого $h^5 f_n'^2 f_n^3$. В этом случае в разложении (4.1) имеется слагаемое $h^5 f_n'^2 f_n^3$, а в соответствующих представлениях k_i , $1 \leq i \leq m$ оно отсутствует.

Разлагая $hf(y_{n,c})$ в ряд Тейлора, будем иметь

$$\begin{aligned} hf(y_{n,c}) = & hf_n + c_1 h^2 f_n' f_n + h^3 [c_2 f_n'^2 f_n + 0, 5c_1^2 f_n'' f_n^2] + \\ & + h^4 [c_3 f_n'^3 f_n + c_1 c_2 f_n' f_n'' f_n^2 + \frac{1}{6} c_1^3 f_n''' f_n^3] + \\ & + h^5 [c_4 f_n'^4 f_n + c_1 c_3 f_n'^2 f_n'' f_n^2 + \\ & + 0, 5c_1^2 c_2 f_n' f_n''' f_n^3 + \frac{1}{24} c_1^4 f_n^{IV} f_n^4] + O(h^6), \end{aligned}$$

что завершает доказательство.

Перейдем к исследованию (m, k) -методов (2.2) при $k = 2$. Выберем $M_m = \{i | 1 \leq i \leq m\}$, $M_2 = \{1, 3\}$, тогда $J_i = \{2\}$, $3 \leq i \leq m$. Рассмотрим численные схемы вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & y_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i, \\ D_n k_1 = & hf(y_n), \quad D_n k_2 = k_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_n k_3 &= hf(y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2) + \alpha_{32}k_2, \\ D_n k_i &= k_{i-1} + \alpha_{i2}k_2, \quad 4 \leq i \leq m, \end{aligned} \quad (4.2)$$

где матрица D_n определяется по второй формуле (2.2).

Пусть $m = 4$. Подставим разложения k_i , $1 \leq i \leq 4$, из (3.2) в первую формулу (4.2). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая (3.3) и полученное представление приближенного решения до членов с h^4 включительно, получим условия четвертого порядка точности схемы (4.2), которые имеют вид

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + (1 + \alpha_{32})p_3 + (1 + \alpha_{32} + \alpha_{42})p_4 &= 1, \\ ap_1 + 2ap_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32})p_3 + \\ + (2a + \beta_{31} + \beta_{32} + 4a\alpha_{32} + 3a\alpha_{42})p_4 &= 1/2, \\ a^2p_1 + 3a^2p_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{42})p_3 + \\ + (3a^2 + 3a\beta_{31} + 4a\beta_{32} + 10a^2\alpha_{32} + 6a^2\alpha_{42})p_4 &= 1/6, \\ a^3p_1 + 4a^3p_2 + (a^3 + 3a^2\beta_{31} + 6a^2\beta_{32} + 10a^3\alpha_{32})p_3 + (4a^3 + 6a^2\beta_{31} + \\ + 10a^2\beta_{32} + 2a^3\alpha_{32} + 10a^3\alpha_{42})p_4 &= 1/24, \\ (\beta_{31} + \beta_{32})^2(p_3 + p_4) &= 1/3, \\ a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})(p_3 + p_4) &= 1/8, \\ a(\beta_{31} + \beta_{32})^2(0, 5p_1 + p_4) &= 1/24, \\ (\beta_{31} + \beta_{32})^3(p_3 + p_4) &= 1/4. \end{aligned}$$

Данная система является нелинейной относительно коэффициентов p_i и α_{ij} , что вызывает определенные трудности с ее исследованием. Поэтому при изучении методов (4.2) поступим следующим образом. Рассмотрим вспомогательную численную схему

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^6 c_i d_i, \\ D_n d_1 &= hf(y_n), \quad D_n d_2 = d_1, \\ D_n d_3 &= hf(y_n + \beta_{31}d_1 + \beta_{32}d_2), \\ D_n d_4 &= d_2, \quad D_n d_5 = d_3, \quad D_n d_6 = d_4. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Подставляя d_i , $1 \leq i \leq 6$, из (4.3) в формулу (4.2), получим

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

Сравнивая полученное соотношение с (4.3), видим, что параметры схем (4.2) и (4.3) связаны соотношениями

$$\begin{aligned} p_1 &= c_1, \quad p_2 = c_2, \quad p_3 = c_3, \quad p_4 = c_5, \\ \alpha_{32} &= c_6/c_5, \quad \alpha_{42} = (c_4 c_5 - c_3 c_6)/c_5^2. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Теперь перейдем к изучению численной формулы (4.3). Для этого требуются разложения стадий d_i , $1 \leq i \leq 6$, в ряды Тейлора в окрестности точки y_n до членов с h^4 включительно, которые легко получить из (3.2). Подставим их в первую формулу (4.3). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая полученное представление приближенного решения и (3.3), получим условия четвертого порядка точности схемы (4.3), то есть

$$1) \sum_{i=1}^6 c_i = 1,$$

$$\begin{aligned}
& 2) \quad ac_1 + 2ac_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32})c_3 + 3ac_4 + \\
& \quad + (2a + \beta_{31} + \beta_{32})c_5 + 4ac_6 = 1/2, \\
& 3) \quad a^2c_1 + 3a^2c_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32})c_3 + 6a^2c_4 + \\
& \quad + (3a^2 + 3a\beta_{31} + 4a\beta_{32})c_5 + 10a^2c_6 = 1/6, \\
& 4) \quad (\beta_{31} + \beta_{32})^2(c_3 + c_5) = 1/3. \\
& 5) \quad a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})(c_3 + c_5) = 1/8, \\
& 6) \quad a(\beta_{31} + \beta_{32})^2(5c_3 + c_5) = 1/24, \\
& 7) \quad (\beta_{31} + \beta_{32})^3(c_3 + c_5) = 1/4, \\
& 8) \quad a^3c_1 + 4a^3c_2 + (a^3 + 3a\beta_{31} + 6a\beta_{32})c_3 + 10a^3c_4 + \\
& \quad + (4a^3 + 6a^2\beta_{31} + 10a^2\beta_{32})c_5 + 20a^3c_6 = 1/24.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Исследуем совместность (4.5). Из четвертого и седьмого уравнений имеем

$$\beta_{31} + \beta_{32} = 3/4, \quad c_3 + c_5 = 16/27. \tag{4.6}$$

Тогда из пятого и шестого соотношений (4.5) получим β_{32} и c_3 соответственно. Из (4.6) выразим β_{31} и c_5 . Учитывая первое уравнение (4.5), подставим полученные выражения для β_{31} , β_{32} , c_3 и c_5 во второе, третье и восьмое равенства (4.5). Получим линейную систему относительно параметров c_2 , c_4 и c_6 , которая имеет вид

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

Разрешив данную систему, из первого уравнения (4.5) получим c_1 . В конечном результате будем иметь

$$\begin{aligned}
c_1 &= (76 - 29/a + 3/a^2)/27, \quad c_2 = (-146 + 89/a - 12/a^2)/27, \\
c_3 &= (32 - 4/a)/27, \quad c_4 = (72 - 59/a + 10/a^2)/18, \\
c_5 &= (4/a - 16)/27, \quad c_6 = (-18 + 19/a - 4/a^2)/18, \\
\beta_{31} &= (48 - 9/a)/32, \quad \beta_{32} = (9/a - 24)/32.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Применяя (4.3) для решения задачи $y' = \lambda y$, $\Re(\lambda) < 0$, 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 в последнее равенство значение параметров (4.7), будем иметь

$$24a^4 - 96a^3 + 72a^2 - 16a + 1 = 0. \tag{4.8}$$

Подставляя теперь (4.7) в (4.4), получим параметры схемы (4.2), то есть

$$\begin{aligned}
p_1 &= (76 - 29/a + 3/a^2)/27, \\
p_2 &= (-146 + 89/a - 12/a^2)/27, \\
p_3 &= (32 - 4/a)/27, \quad p_4 = (4/a - 16)/27, \\
\beta_{31} &= (48 - 9/a)/32, \quad \beta_{32} = (9/a - 24)/32,
\end{aligned} \tag{4.9}$$

$$\alpha_{32} = [-54a + 57 - 12/a]/(8 - 32a),$$
$$\alpha_{42} = [-864a^2 + 828a - 288 + 36/a]/(4 - 16a)^2,$$

при которых она имеет четвертый порядок точности. Параметр a определяется из условия L -устойчивости (4.8). Заметим, что уравнение (4.8) имеет два вещественных корня

$$a_1 = 0,5728160624821, \quad a_2 = 3,100316735116.$$

Из результатов расчетов ряда задач [2] следует, что наиболее подходящим является корень $a = a_1$, который приводит к более эффективному и, что существеннее, более надежному алгоритму интегрирования.

Заключение

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 дифференциальной задачи, а при линейном анализе устойчивости она также не хуже. В то же время при записи (4.2) сразу заложен способ ее реализации, то есть до начала расчетов можно оценить вычислительные затраты на шаг интегрирования. Что касается неявных методов типа Рунге–Кутта, то для них вычислительные затраты в сильной степени зависят от способа реализации и, в частности, использование двухстадийной схемы вовсе не означает, что на каждом шаге будет два раза вычисляться правая часть дифференциальной задачи. Поэтому на некоторых задачах (m, k) -методы будут выгоднее неявных формул типа Рунге–Кутта.

Здесь не обсуждается вопрос о построении неравенства для контроля точности вычислений и для выбора величины шага интегрирования в методе (4.2). Это неравенство легко можно получить с применением вложенных методов, введя дополнительную стадию $D_n k_5 = k_4 + \alpha_{52} k_2$.

Литература

- [1] Rosenbrock Н.Н. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. 1963. № 5. P. 329–330.
- [2] Хайпер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.
- [3] Novikov V.A., Novikov E.A., Umatova L.A. Freezing of the Jacobi matrix in the Rosenbrock type method of the second order accuracy // Proc. BAIL-IV Conf.: Bool Press, 1986. P. 380–386.
- [4] Новиков Е.А., Двинский А.Л. Замораживание матрицы Якоби в методах типа Розенброка // Вычислительные технологии. 2005. Т. 10. С. 108–114.
- [5] Новиков Е.А. Об одном классе одношаговых безытерационных методов решения жестких систем // Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики. 1987. С. 138–139.
- [6] Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И. Одношаговые безытерационные методы решения жестких систем // ДАН СССР. 1988. Т. 301. № 6. С. 1310–1314.

- [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. Красноярск: ВЦ СО АН СССР, 1988. 23 с.

Поступила в редакцию 18/V/2011;
в окончательном варианте — 19/VI/2011.

L-STABLE (4,2)-METHOD OF THE FOURTH ORDER FOR SOLVING STIFF PROBLEMS

© 2011 E.A. Novikov²

(M,k) -methods for solving stiff problems, in which on each step two times the right-hand side of the system of differential equations is calculated are investigated. It is shown that the maximum order of accuracy of the L-stable $(m,2)$ -method is equal to four. $(4,2)$ -method of maximal order is built.

Key words: stiff problem, methods of Rosenbrock, (m,k) -methods, L-stability.

Paper received 18/V/2011.
Paper accepted 19/VI/2011.

²Novikov Evgeniy Alexandrovich (novikov@icm.krasn.ru), the Institute of Computational Modelling, SB RAS, Krasnoyarsk, 660036, Russian Federation.