ЯВНЫЕ МЕТОДЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА С СОГЛАСОВАННЫМИ ОБЛАСТЯМИ УСТОЙЧИВОСТИ

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

For arbitrary m the coefficients of explicit m — stage methods of Runge—Kutta type are obtained. For these methods the stability domains of intermediate numerical schemes are conformable with the stability domain of the basic scheme.

Введение

Для численного решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений

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

в [1] предлагается применять явные методы типа Рунге—Кутты

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

где y и f — гладкие вещественные N-мерные вектор-функции; t — независимая переменная; h — шаг интегрирования; k_i $(1 \le i \le m)$ — стадии метода; p_{mi}, α_i, β_{ij} $(1 \le i \le m$, $1 \le j \le i-1)$ — коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости схемы (2).

В [1] для произвольного m получены коэффициенты методов с первого по третий порядок, а в [2] — коэффициенты методов четвертого порядка с максимальным интервалом устойчивости. Там же численно показано значительное повышение эффективности алгоритмов интегрирования за счет комбинирования таких численных формул в процессе вычислений на основании критерия устойчивости. Отметим, что в [1, 2] не рассмотрен вопрос о выборе коэффициентов β_{ij}, которые влияют на устойчивость промежуточных схем и в конечном счете на эффективность алгоритма интегрирования.

Здесь для произвольного m получены коэффициенты α_i, p_{mi}, β_{ij} $(1 \le i \le m$, $1 \le j \le i-1)$ явных методов типа Рунге—Кутты второго порядка точности, при которых области устойчивости промежуточных численных схем согласованы с основной.

1. Численные схемы

Для упрощения выкладок рассмотрим задачу Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \le t \le t_k, \tag{3}$$

для решения которой применим методы типа Рунге—Кутты, записанные в виде

$$y_{n,i} = y_n + \sum_{j=1}^{i} \beta_{i+1,j} k_j, \quad 1 \le i \le m-1, \quad y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_{mi} k_i, \tag{4}$$

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

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}, \quad 2 \le i \le m, \quad \alpha_1 = 0. \tag{5}$$

В дальнейшем нам потребуется верхняя треугольная матрица B_m с элементами b_{ij} вида [1]

$$\begin{gathered} b_{1i} = 1, \quad 1 \le i \le m, \\ b_{ki} = \sum_{j=k-1}^{i-1} \beta_{ij} b_{k-1,j}, \quad 2 \le k \le m, \quad k \le i \le m, \\ b_{ki} = 0, \quad 2 \le k \le m, \quad 1 \le i \le k-1, \end{gathered} \tag{6}$$

где β_{ij} — коэффициенты схемы (2) или (4).

Устойчивость одношаговых методов обычно исследуется на линейном скалярном уравнении

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0, \quad t \ge 0 \tag{7}$$

с комплексным λ, $Re\lambda < 0$. Применяя вторую формулу (4) к (7), получим

$$y_{n+1} = Q_m(z) y_n, \quad z = \lambda h.$$

Здесь $Q_m(z)$ есть многочлен степени m относительно z вида

$$Q_m(z) = 1 + \sum_{i=1}^{m} c_{mi} z^i, \tag{8}$$

где

$$c_{mi} = \sum_{j=i}^{m} b_{ij} p_{mj}, \quad 1 \le i \le m. \tag{9}$$

Для упрощения этой записи введем обозначения

$$p_m = (p_{m1}, \ldots, p_{mm})^{\mathrm{T}}, \quad c_m = (c_{m1}, \ldots, c_{mm})^{\mathrm{T}}.$$

Тогда коэффициенты схемы (4) и многочлена устойчивости (8) связаны соотношением

$$B_m p_m = c_m, \tag{10}$$

где элементы матрицы B_m определены формулами (6).

Для промежуточных численных схем (4) имеем

$$y_{n,k} = Q_k(z)y_n, \quad Q_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^{k} c_{ki} z^i, \tag{11}$$

где

$$c_{ki} = \sum_{j=i}^{k} b_{ij}\beta_{k+1,j}, \quad 1 \le k \le m-1. \tag{12}$$

Используя обозначения

$$\beta_k = (\beta_{k+1,1}, \, \ldots, \, \beta_{k+1,k})^{\mathrm{T}}, \quad c_k = (c_{k1}, \, \ldots, \, c_{kk})^{\mathrm{T}},$$

получим, что коэффициенты β_{ij} промежуточных схем (4) и соответствующих многочленов устойчивости связаны соотношениями

$$B_k \beta_k = c_k, \quad 1 \le k \le m-1. \tag{13}$$

Заметим, что из сравнения (6) и (12) следует, что $b_{ki} = c_{i-1,k-1}$, т. е. элементы $(k+1)$-го столбца матрицы B_m совпадают с коэффициентами многочлена устойчивости $Q_k(z)$. Отсюда следует, что если заданы коэффициенты многочленов устойчивости основной и промежуточных численных схем, то все коэффициенты методов (4) однозначно определяются из линейных систем (10) и (13). Ниже этот факт будет использоваться при определении коэффициентов формулы (4) второго порядка точности при условии, что области устойчивости промежуточных схем согласованы с основной.

Теперь запишем соотношения, обеспечивающие второй порядок точности схемы (4). Разлагая точное и приближенное решения в ряды Тейлора по степеням h, можно записать

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + \frac{h^2}{2} f'f + \frac{h^3}{6}\left[f''f^2 + f'^2 f\right] + O(h^4),$$

$$y_{n+1} = y_n + \left(\sum_{j=1}^{m} b_{1j}p_{mj}\right) hf_n + \left(\sum_{j=2}^{m} b_{2j}p_{mj}\right) h^2 f'_n f_n +$$

$$+ \left(\sum_{j=3}^{m} b_{3j}p_{mj}\right) h^3 f'^2_n f_n + 0.5\left(\sum_{j=2}^{m} b_{2j}^2 p_{mj}\right) h^3 f''_n f_n^2 + O(h^4), \tag{14}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном $y(t_n)$ и приближенном y_n решениях соответственно. Отсюда следует, что (4) будет иметь второй порядок точности, если

$$\sum_{j=1}^{m} b_{1j}p_{mj} = 1, \quad \sum_{j=2}^{m} b_{2j}p_{mj} = 0.5. \tag{15}$$

Это требование будет выполнено, если в (10) положить $c_{m1} = 1$ и $c_{m2} = 0.5$. Остальные коэффициенты c_{mi} $(3 \le i \le m)$ обычно используются для задания области устойчивости необходимых формы и размера. В [1] подробно изложен алгоритм вычисления нужных значений c_{mi} $(3 \le i \le m)$, и поэтому ниже будем считать их определенными. Теперь при заданных коэффициентах β_{ij} $(2 \le i \le m,\ 1 \le j \le i-1)$ решение линейной алгебраической системы (10) дает коэффициенты p_{mi} $(1 \le i \le m)$ m-стадийных методов (4) второго порядка точности с заданной областью устойчивости. Неравенство для контроля точности данных методов построим по аналогии с тем, как это сделано в [1]. Для этого необходимо, чтобы выражение для локальной ошибки $\delta_{n,m}$ m-стадийной численной формулы (4) имело вид

$$\delta_{n,m} = dh^3 f'^2 f + O(h^4), \tag{16}$$

где d — некоторая вычисленная постоянная. Из представления (14) следует, что требование (16) будет выполнено, если одновременно с (10) при $c_{m1} = 1$ и $c_{m2} = 0.5$ будет иметь место соотношение

$$\sum_{j=2}^{m} b_{2j}^2 p_{mj} = \frac{1}{3}. \tag{17}$$

Таким образом, задача о построении m-стадийных методов (4) второго порядка точности с заданной областью устойчивости и неравенствами для контроля точности вычислений сводится к совместному решению системы (10) и уравнения (17). Так как второе уравнение (10) совпадает со вторым уравнением (15), система (10), (17) будет совместна, если совместны вторые уравнения из (15) и (17), которые учитывая, что $b_{2j} = \alpha_j$ $(2 \le j \le m)$, можно переписать в виде

$$\sum_{j=2}^{m} \alpha_j p_{mj} = 0.5, \quad \sum_{j=2}^{m} \alpha_j^2 p_{mj} = \frac{1}{3}, \tag{18}$$

где α_i $(2 \le i \le m)$ определены формулами (5).

2. Определение коэффициентов численных методов

Будем предполагать, что заданы коэффициенты многочленов устойчивости

$$Q_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^{k} c_{ki} z^i, \quad 2 \le k \le m, \tag{19}$$

причем $c_{m1} = 1$ и $c_{m2} = 0.5$. Коэффициент c_{11} полинома $Q_1(z) = 1 + c_{11}z$ выберем из условия совместности уравнений (18).

При выборе коэффициентов многочленов (19) можно руководствоваться различными соображениями. Если, например, основная численная схема (4) применяется с максимальным интервалом устойчивости, то имеет смысл выбрать полиномы устойчивости промежуточных схем с аналогичным свойством. Если же область устойчивости основной схемы “раздута” по мнимой оси, то области устойчивости промежуточных схем должны быть устроены подобным образом. Это позволяет избежать неустойчивости промежуточных численных формул, когда шаг интегрирования по устойчивости основной схемы близок к максимальному. Коэффициенты нужных многочленов можно вычислить предложенным в [1] алгоритмом. В [3] приведены многочлены $Q_k(z)$ $(2 \le k \le 13)$ с максимальным интервалом устойчивости.

Для каждого k $(2 \le k \le m)$ обозначим через γ_k длину такого максимального интервала $[\gamma_k, 0]$, что для всех $z \in [\gamma_k, 0]$ имеет место неравенство $|Q_k(z)| \le 1$. Учитывая, что $z = \lambda h$, в (19) для каждого $Q_k(z)$ $(2 \le k \le m)$ проведем замену h на $\gamma_k h/\gamma_m$. В результате вместо (19) рассмотрим набор многочленов

$$Q'_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^{k} c'_{ki} z^i, \quad c'_{ki} = (\gamma_k/\gamma_m)^i c_{ki} \quad (2 \le k \le m). \tag{20}$$

Далее данные полиномы будут использоваться в качестве многочленов устойчивости методов (4). Замена h на $\gamma_k h/\gamma_m$ означает, что приближенное решение по промежуточным схемам (4) вместо точек $(t_n + c_{k1}h)$ $(2 \le k \le m-1)$ будет вычисляться в точках $t_n + c'_{k1}h$ $(2 \le k \le m-1)$. В этом случае максимальный шаг из условия устойчивости основной схемы будет максимальным и для промежуточных численных формул.

Теперь определение коэффициентов методов (4) будем осуществлять по следующему алгоритму. С использованием [1] вычислим коэффициенты полиномов (19), удовлетворяющие некоторым заданным свойствам. Вычислим коэффициенты многочленов (20) с применением соответствующей замены переменных. Учитывая, что элементы $(k+1)$-го столбца матрицы B_m совпадают с коэффициентами многочлена устойчивости $Q'_k(z)$, сформируем матрицу B_m, которая имеет вид

$$B_m = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & c'_{11} & c'_{21} & \cdots & c'_{m-1,1} \\ 0 & 0 & c'_{22} & \cdots & c'_{m-1,2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & c'_{m-1,m-1} \end{pmatrix},$$

где c'_{11} есть пока неопределенный коэффициент полинома $Q'_z = 1 + c'_{11}z$. Из линейной системы уравнений (10) с верхней треугольной матрицей B_m последовательно определим $p_{m,m}, p_{m,m-1}, \ldots, p_{m3}$. Учитывая, что $\alpha_i = c'_{i-1,1}$ $(2 \le i \le m)$, перепишем уравнения (18) в виде

$$c'_{11} p_{m2} = 1/2 - \sum_{j=3}^{m} c'_{j-1,1} p_{mj},$$
$$c'^2_{11} p_{m2} = 1/3 - \sum_{j=3}^{m} c'^2_{j-1,1} p_{mj}.$$

Разделив второе уравнение на первое, получим

$$c'_{11} = \frac{1/3 - \sum\limits_{j=3}^{m} c'^2_{j-1,1} p_{mj}}{1/2 - \sum\limits_{j=3}^{m} c'_{j-1,1} p_{mj}}.$$

Данное значение c'_{11} обеспечивает совместность уравнений (18). Значения p_{m2} и p_{m1} последовательно определим из второго и первого уравнений (10). Оставшиеся коэффициенты β_{ij} $(3 \le i \le m,\ 1 \le j \le i-1)$ вычислим последовательным решением систем линейных алгебраических уравнений $B_k \beta_k = c'_k$ $(2 \le k \le m-1)$, где $\beta_k = (\beta_{k+1,1}, \ldots, \beta_{k+1,k})^{\mathrm{T}}$, $c'_k = (c'_{k1}, \ldots, c'_{kk})^{\mathrm{T}}$.

В качестве примера приведем коэффициенты 10-стадийной схемы (4) второго порядка точности с согласованными областями устойчивости промежуточных численных схем:

$$
\begin{array}{ll}
p_{10,1} = -1.8196042548247 & p_{10,2} = +0.26171232237173 \cdot 10^{-2} \\
p_{10,3} = +0.62780912355711 & p_{10,4} = +0.70107890176425 \\
p_{10,5} = +0.52697647868521 & p_{10,6} = +0.37388421552143 \\
p_{10,7} = +0.25850897771127 & p_{10,8} = +0.17246666567217 \\
p_{10,9} = +0.10582824603966 & p_{10,10} = +0.50434522649909 \cdot 10^{-1} \\
\beta_{2,1} = -7.5165266543482 & \beta_{3,1} = +0.24697706956444 \cdot 10^{-1} \\
\beta_{3,2} = -0.40442926460761 \cdot 10^{-4} & \beta_{4,1} = -0.17271889464125 \cdot 10^{-1} \\
\beta_{4,2} = -0.86161426365635 \cdot 10^{-4} & \beta_{4,3} = +0.94543917346749 \cdot 10^{-1} \\
\beta_{5,1} = -0.15541344297494 & \beta_{5,2} = -0.43222611482215 \cdot 10^{-4} \\
\beta_{5,3} = +0.24288745824190 & \beta_{5,4} = +0.61088538639525 \cdot 10^{-1} \\
\beta_{6,1} = -0.37816232408515 & \beta_{6,2} = +0.12174369114793 \cdot 10^{-3} \\
\beta_{6,3} = +0.41790691370223 & \beta_{6,4} = +0.14473316234684 \\
\beta_{6,5} = +0.55277464597430 \cdot 10^{-1} & \beta_{7,1} = -0.66049210371349 \\
\beta_{7,2} = +0.41579093026965 \cdot 10^{-3} & \beta_{7,3} = +0.58451948281918 \\
\beta_{7,4} = +0.24947672376381 & \beta_{7,5} = +0.12449656624973 \\
\beta_{7,6} = +0.53002565495431 \cdot 10^{-1} & \beta_{8,1} = -0.97345739728368 \\
\beta_{8,2} = +0.83091373687116 \cdot 10^{-3} & \beta_{8,3} = +0.71164946366367 \\
\beta_{8,4} = +0.36693156810609 & \beta_{8,5} = +0.20973020417453 \\
\beta_{8,6} = +0.11566112969376 & \beta_{8,7} = +0.51842795293118 \\
\beta_{9,1} = -1.2883182174482 & \beta_{9,2} = +0.13506048429757 \cdot 10^{-2} \\
\beta_{9,3} = +0.77379662163441 & \beta_{9,4} = +0.48747322823252 \\
\beta_{9,5} = +0.30819901982081 & \beta_{9,6} = +0.19072487421537 \\
\beta_{9,7} = +0.11081342034211 & \beta_{9,8} = +0.51163624215609 \cdot 10^{-1} \\
\beta_{10,1} = -1.5783549552468 & \beta_{10,2} = +0.19537733055761 \cdot 10^{-2} \\
\beta_{10,3} = +0.75090999599718 & \beta_{10,4} = +0.60172655326385 \\
\beta_{10,5} = +0.41555458184504 & \beta_{10,6} = +0.27750005508315 \\
\beta_{10,7} = +0.17963250597238 & \beta_{10,8} = +0.10781983872087 \\
\beta_{10,9} = +0.50730034923075 \cdot 10^{-1} & \alpha_2 = -7.51652665434820 \\
\alpha_3 = +2.46572640299832 \cdot 10^{-2} & \alpha_4 = +7.71858664562584 \cdot 10^{-2} \\
\alpha_5 = +1.48519331295003 \cdot 10^{-1} & \alpha_6 = +2.39876960252498 \cdot 10^{-1} \\
\alpha_7 = +3.51419025544931 \cdot 10^{-1} & \alpha_8 = +4.83188677384359 \cdot 10^{-1} \\
\alpha_9 = +6.35203175855605 \cdot 10^{-1} & \alpha_{10} = +8.07472383864321 \cdot 10^{-1}
\end{array}
$$

В качестве многочленов устойчивости (19) использовались полиномы с максимальным интервалом устойчивости [4], при этом длина интервала устойчивости основной схемы равна 81.112.

3. Контроль точности и устойчивости

С применением (14) видим, что локальная ошибка $\delta_{n,m}$ m-стадийной схемы (4) имеет вид

$$\delta_{n,m} = \left(1/6 - \sum_{j=3}^{m} b_{3j} p_{mj}\right) h^3 f'^2 f + O(h^4) = (1/6 - c'_{m3}) h^3 f'^2 f + O(h^4), \tag{21}$$

где $c'_{m3} = c_{m3}$ — коэффициент при z^3 многочлена устойчивости (20). Тогда согласно [1] для контроля точности вычислений можно использовать оценку ошибки $\varepsilon_{n,m}$ вида

$$\varepsilon_{n,m} = (1/6 - c'_{m3}) h^2 f'_n f_n + O(h^3). \tag{22}$$

Величину $\varepsilon_{n,m}$ можно оценить многими способами. Разлагая k_i $(1 \leq i \leq m)$ в ряды Тейлора, нетрудно видеть, что

$$k_i - k_j = (\alpha_i - \alpha_j)h^2 f'_n f_n + O(h^3), \quad i \neq j,$$

где α_s $(2 \leq s \leq m)$ определены формулой (5). Отсюда следует, что $\varepsilon_{n,m}$ можно вычислить по приближенной формуле

$$\varepsilon_{n,m} \approx [(1/6 - c'_{m3})/(\alpha_i - \alpha_j)](k_i - k_j), \quad 1 \leq i, j \leq m, \quad i \neq j. \tag{23}$$

Для жестких задач характерным является быстрое изменение решения на небольших промежутках. Для того чтобы в этом случае избежать неудовлетворительной точности, естественно в (23) использовать стадии, вычисленные в крайних точках отрезка $[t_n, t_{n+1}]$. Стадия k_1 вычисляется в точке t_n, и поэтому в (23) положим $j = 1$ $(\alpha_1 = 0)$, $i > j$. Значение $\alpha_2 = c'_{11}$ выбирается из условия совместности уравнений (18), и поэтому может принимать, вообще говоря, произвольное значение. Для методов с согласованными областями устойчивости имеет место неравенство $\alpha_3 < \alpha_4 < \ldots < 1$. Отсюда следует, что ни одна стадия в точке t_{n+1} не вычисляется. С другой стороны, применение в (23) стадий с достаточно большими номерами будет приводить к существенному увеличению вычислительных затрат в случае повторных вычислений решения вследствие невыполнения требуемой точности расчетов. С целью повышения эффективности алгоритма интегрирования поступим следующим образом.

В качестве предварительной оценки точности вычислений будем применять величину $\varepsilon'_{n,m}$, определенную по формуле

$$\varepsilon'_{n,m} = \frac{1/6 - c'_{m3}}{\alpha_2}(k_2 - k_1).$$

Так как k_1 зависит от размера шага линейно, то нарушение неравенства

$$||\varepsilon'_{n,m}|| \leq \varepsilon \tag{24}$$

приведет всего лишь к одному дополнительному вычислению правой части задачи (3). Здесь ε — требуемая точность расчетов, $||\cdot||$ — некоторая норма в R^N.

Учитывая, что

$$hf(y_{n+1}) - k_1 = h^2 f'_n f_n + O(h^3),$$

окончательное решение по точности примем на основе неравенства

$$||\varepsilon''_{n,m}|| \leq \varepsilon, \tag{25}$$

где

$$\varepsilon''_{n,m} = (1/6 - c'_{m3})/[hf(y_{n+1}) - k_1].$$

Выбор шага по точности будем осуществлять следующим образом. Пусть приближенное решение y_n в точке t_n вычислено с шагом h_n. Учитывая, что $\varepsilon'_{n,m} = O(h^2)$ и $\varepsilon''_{n,m} = O(h^2)$, определим число q_1 по формуле

$$q_1^2 ||\varepsilon'_{n,m}|| = \varepsilon.$$

Если $q_1 < 1$, т. е. нарушено неравенство (24) и требуемая точность не выполняется, то положим h_n равным $q_1 h_n$ и повторим вычисление k_2. В противном случае определим число q_2 из соотношения

$$q_2^2 ||\varepsilon''_{n,m}|| = \varepsilon.$$

Если $q_2 < 1$, то нарушено неравенство (25). Тогда h_n полагается равным $q_2 h_n$ и стадии k_i $(2 \leq i \leq m)$ вычисляются заново. При $q_2 \geq 1$ вычисляется приближенное решение, а новый шаг h_{n+1} задается формулой

$$h_{n+1} = \min(q_1, q_2) h_n. \tag{26}$$

Выбор числа стадий будем осуществлять с использованием неравенства для контроля устойчивости численной схемы [1]. Для построения данного неравенства применим метод (4) для решения (3) при $f(y) = Ay + \mathbf{b}$, где A и $\mathbf{b}$ соответственно матрица и вектор с постоянными коэффициентами размерности N. Нетрудно видеть, что в этом случае выполнены соотношения $k_1 = hf_n$, $k_2 = hf_n + \alpha_2 h^2 f'_n f_n$, $k_3 = hf_n + \alpha_3 h^2 f'_n f_n + \alpha_2 \beta_{32} h^3 f'^2_n f_n$, где $f_n = Ay_n + \mathbf{b}$, $f'_n = A$. Выберем g'_i и g''_i $(1 \leq i \leq 3)$ из условия выполнения соотношений

$$\sum_{i=1}^{3} g'_i k_i = h^3 f'^2_n f_n, \quad \sum_{i=1}^{3} g''_i k_i = h^2 f'_n f_n. \tag{27}$$

Нетрудно видеть, что равенства (27) будут выполнены, если

$$b'_1 = -\frac{(\alpha_2 + \alpha_3)}{\alpha_2^2 \beta_{32}}, \quad b'_2 = \frac{\alpha_3}{\alpha_2^2 \beta_{32}}, \quad b'_3 = \frac{1}{\alpha_2 \beta_{32}},$$
$$b''_1 = -\frac{1}{\alpha_2}, \quad b''_2 = \frac{1}{\alpha_2}, \quad b''_3 = 0.$$

Теперь оценку модуля максимального собственного числа $\lambda_n^{\max}$ матрицы Якоби $\partial f(y_n)/\partial y$ задачи (3) можно вычислить степенным методом по приближенной формуле

$$h\lambda_n^{\max} = \frac{1}{|\alpha_2 \beta_{32}|} \max_{1 \leq j \leq N} \left| \frac{[\alpha_2 k_3 + \alpha_3 k_2 - (\alpha_2 + \alpha_3) k_1]_j}{[k_2 - k_1]_j} \right|.$$

Тогда неравенство для контроля устойчивости m-стадийного метода (4) имеет вид

$$h\lambda_n^{\max} \leq \gamma_m, \tag{28}$$

где γ_m — длина интервала устойчивости m-стадийной схемы.

4. Алгоритм интегрирования с переменным числом стадий

Пусть имеется набор m-стадийных методов, длины интервалов устойчивости которых обозначим через γ_m $(3 \leq m \leq M,\ M \geq 3)$. На каждом шаге выбор числа стадий будем осуществлять следующим образом. Пусть приближенное решение в точке t_n вычислено с шагом h_n по m-стадийной схеме. Определим h'_{n+1} по формуле (26).

Если $m < M$ и $h'_{n+1}\lambda_n^{\max} > \gamma_m$, то m положим равным $(m+1)$, число q_3 вычислим из условия устойчивости по формуле
$$q_3 h'_{n+1}\lambda_n^{\max} = \gamma_m,$$
а новый шаг h_{n+1} перевычислим следующим образом:
$$h_{n+1} = \min(q_1, q_2, q_3) h_n. \tag{29}$$

Если $m > 3$ и $h_{n+1}\lambda_n^{\max} \le \gamma_{m-1}$, то m положим равным $(m-1)$. В остальных случаях число стадий не изменяется. При $m = M$ новый шаг задается формулой (29), при $m = 3$ — соотношением (26). В случае расчетов с максимальным числом стадий применение (29) позволяет удержать шаг в пределах области устойчивости.

5. Результаты расчетов

В состав алгоритма интегрирования переменного шага и с переменным числом стадий включены методы второго порядка с числом стадий m $(3 \le m \le 14)$. Для определенности выбраны численные схемы с максимальным интервалом устойчивости. Коэффициенты многочленов устойчивости (см. ниже) получены с помощью алгоритма из [1]:

$m = 3$	$\gamma_3 = -6.260700000$	
$c_{33} = 0.6250000000$		
$m = 4$	$\gamma_4 = -0.1204670000 \cdot 10^{2}$	
$c_{43} = 0.7808448345 \cdot 10^{-1}$	$c_{44} = 0.3608453922 \cdot 10^{-2}$	
$m = 5$	$\gamma_5 = -0.1945690000 \cdot 10^{2}$	
$c_{53} = 0.8460849927 \cdot 10^{-1}$	$c_{54} = 0.5527124819 \cdot 10^{-2}$	$c_{55} = 0.1221964350 \cdot 10^{-3}$
$m = 6$	$\gamma_6 = -0.2850430000 \cdot 10^{2}$	
$c_{63} = 0.8799401907 \cdot 10^{-1}$	$c_{64} = 0.6616916777 \cdot 10^{-2}$	$c_{65} = 0.2217607053 \cdot 10^{-3}$
$c_{66} = 0.2731155893 \cdot 10^{-5}$		
$m = 7$	$\gamma_7 = -0.3919240000 \cdot 10^{2}$	
$c_{73} = 0.8998502098 \cdot 10^{-1}$	$c_{74} = 0.7287754889 \cdot 10^{-2}$	$c_{75} = 0.2929815057 \cdot 10^{-3}$
$c_{76} = 0.5723750735 \cdot 10^{-5}$	$c_{77} = 0.4336798850 \cdot 10^{-7}$	
$m = 8$	$\gamma_8 = -0.5152260000 \cdot 10^{2}$	
$c_{83} = 0.9125773964 \cdot 10^{-1}$	$c_{84} = 0.7728176610 \cdot 10^{-2}$	$c_{85} = 0.3436678727 \cdot 10^{-3}$
$c_{86} = 0.8297336203 \cdot 10^{-5}$	$c_{87} = 0.1029826713 \cdot 10^{-6}$	$c_{88} = 0.5148094796 \cdot 10^{-9}$
$m = 9$	$\gamma_9 = -0.6549570000 \cdot 10^{2}$	
$c_{93} = 0.9212164140 \cdot 10^{-1}$	$c_{94} = 0.8032277127 \cdot 10^{-2}$	$c_{95} = 0.3804328437 \cdot 10^{-3}$
$c_{96} = 0.1037334639 \cdot 10^{-4}$	$c_{97} = 0.1627525710 \cdot 10^{-6}$	$c_{98} = 0.1365234306 \cdot 10^{-8}$
$c_{99} = 0.4743117465 \cdot 10^{-11}$		
$m = 10$	$\gamma_{10} = -0.8111200000 \cdot 10^{2}$	
$c_{10,3} = 0.9273532641 \cdot 10^{-1}$	$c_{10,4} = 0.8250827248 \cdot 10^{-2}$	$c_{10,5} = 0.4077305837 \cdot 10^{-3}$
$c_{10,6} = 0.1202172903 \cdot 10^{-4}$	$c_{10,7} = 0.2165863427 \cdot 10^{-6}$	$c_{10,8} = 0.2337894537 \cdot 10^{-8}$
$c_{10,9} = 0.1388784147 \cdot 10^{-10}$	$c_{10,10} = 0.3490928048 \cdot 10^{-13}$	
$m = 11$	$\gamma_{11} = -0.9837160000 \cdot 10^{2}$	
$c_{11,3} = 0.9318712290 \cdot 10^{-1}$	$c_{11,4} = 0.8413065880 \cdot 10^{-2}$	$c_{11,5} = 0.4284624834 \cdot 10^{-3}$
$c_{11,6} = 0.1333201614 \cdot 10^{-4}$	$c_{11,7} = 0.2630173525 \cdot 10^{-6}$	$c_{11,8} = 0.3304691889 \cdot 10^{-8}$
$c_{11,9} = 0.2562757224 \cdot 10^{-10}$	$c_{11,10} = 0.1118194634 \cdot 10^{-12}$	$c_{11,11} = 0.2099977764 \cdot 10^{-15}$
$m = 12$	$\gamma_{12} = -0.1172747000 \cdot 10^{3}$	
$c_{12,3} = 0.9352947408 \cdot 10^{-1}$	$c_{12,4} = 0.8536760476 \cdot 10^{-2}$	$c_{12,5} = 0.4445343203 \cdot 10^{-3}$
$c_{12,6} = 0.1438143468 \cdot 10^{-4}$	$c_{12,7} = 0.3023697970 \cdot 10^{-6}$	$c_{12,8} = 0.4204580146 \cdot 10^{-8}$
$c_{12,9} = 0.3838519723 \cdot 10^{-10}$	$c_{12,10} = 0.2212616523 \cdot 10^{-12}$	$c_{12,11} = 0.7302820006 \cdot 10^{-15}$
$c_{12,12} = 0.1051890200 \cdot 10^{-17}$		

$m = 13$	$\gamma_{13} = -0.1378213000 \cdot 10^{3}$	
$c_{13,3} = 0.9379514494 \cdot 10^{-1}$	$c_{13,4} = 0.8633199686 \cdot 10^{-2}$	$c_{13,5} = 0.4572230222 \cdot 10^{-3}$
$c_{13,6} = 0.1523025589 \cdot 10^{-4}$	$c_{13,7} = 0.3355378847 \cdot 10^{-6}$	$c_{13,8} = 0.5014834871 \cdot 10^{-8}$
$c_{13,9} = 0.5112962591 \cdot 10^{-10}$	$c_{13,10} = 0.3502954352 \cdot 10^{-12}$	$c_{13,11} = 0.1542745108 \cdot 10^{-14}$
$c_{13,12} = 0.3946094014 \cdot 10^{-17}$	$c_{13,13} = 0.4455721670 \cdot 10^{-20}$	
$m = 14$	$\gamma_{14} = -0.1600115000 \cdot 10^{3}$	
$c_{14,3} = 0.9400547623 \cdot 10^{-1}$	$c_{14,4} = 0.8709829298 \cdot 10^{-2}$	$c_{14,5} = 0.4674036548 \cdot 10^{-3}$
$c_{14,6} = 0.1592403480 \cdot 10^{-4}$	$c_{14,7} = 0.3635021510 \cdot 10^{-6}$	$c_{14,8} = 0.5732072002 \cdot 10^{-8}$
$c_{14,9} = 0.6328016128 \cdot 10^{-10}$	$c_{14,10} = 0.4879793010 \cdot 10^{-12}$	$c_{14,11} = 0.2575379337 \cdot 10^{-14}$
$c_{14,12} = 0.8865299187 \cdot 10^{-17}$	$c_{14,13} = 0.1793358233 \cdot 10^{-19}$	$c_{14,14} = 0.1617028584 \cdot 10^{-22}$

Соответствующие области устойчивости “почти” многосвязные. В [1] описан алгоритм расчета коэффициентов многочленов устойчивости, при которых область устойчивости имеет заданные, естественно “разумные” форму и размер. Поэтому при необходимости полученные коэффициенты можно перевычислить.

Коэффициенты методов (4) не приводятся в силу ограниченного объема работы, однако при заданных коэффициентах многочленов устойчивости их легко вычислить по изложенной выше схеме.

Построенный алгоритм интегрирования применялся для решения уравнения Ван-дер-Поля

$$\begin{gathered} y_1' = y_2, \quad y_2' = 100(1 - y_1^2)y_2 - y_1, \\ y_1'(0) = 2, \quad y_2(0) = 0, \quad h_0 = 2 \cdot 10^{-2} \quad (0 \le t \le 1000). \end{gathered} \tag{30}$$

Для (30) характерно многократное чередование переходных участков с участками установления, что позволяет не только оценить эффективность построенного алгоритма интегрирования, но и проверить работу алгоритма выбора числа стадий.

Для решения задачи (30) с точностью 10^{-2} с использованием построенного алгоритма потребовалось 78 734 вычислений if правой части. Если области устойчивости основной и промежуточных численных схем не согласованы, то решение тем же самым алгоритмом задачи (30) приводит к $if = 87\,311$, причем дополнительные затраты возникают за счет повторных вычислений решения (возвратов) вследствие невыполнения требуемой точности расчетов, а требуемая точность нарушается вследствие неустойчивости промежуточных численных формул.

Численный эксперимент проводился с целью продемонстрировать повышение эффективности за счет согласования областей устойчивости. Дальнейшее более эффективное использование данных методов мы видим в составе более мощного алгоритма переменных порядка, шага и с переменным числом стадий [1]. Однако данный алгоритм эффективнее многих известных явных методов и может быть использован самостоятельно, в частности, при решении задачи (30) методом Мерсона [4] ($if = 363\,195$), методом Фельберга [5] ($if = 366\,384$), с помощью алгоритма интегрирования с переменными порядком и шагом на основе методов Адамса ($if = 396\,927$).

Список литературы

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

[2] Golushko M. I., Novikov E. A. Explicit fourth-order methods for stiff system // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1999. Vol. 4, No. 1. P. 71–85.

[3] Новиков В. А., Новиков Е. А. О построении явных методов типа Рунге — Кутта с расширенными областями устойчивости. Красноярск: ВЦ СО РАН, 1998.

[4] Merson R. H. An operational methods for integration processes // Proc. Symp. on Data Proc. Weapons Research Establishment. Salisbury, Australia, 1957.

[5] Fehlberg E. Klassische Runge – Kutta – Formeln funfter und siebenter Ordnung mit Schrittweitenkontrolle // Computing. 1969. No. 4. P. 93–106.

Поступила в редакцию 20 февраля 2001 г.