# Согласование областей устойчивости явных методов*

Е.А. Новиков
*Институт вычислительного моделирования СО РАН*
e-mail: novikov@icm.krasn.ru

А.Е. Новиков
*Сибирский федеральный университет*
e-mail: aenovikov@bk.ru

Для произвольного $m$ получены коэффициенты явных $m$-стадийных методов типа Рунге-Кутта. Области устойчивости промежуточных численных формул согласованы с областью устойчивости основной схемы. Построены неравенства для контроля устойчивости методов.

**Введение.**Для численного решения жестких задач

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

в [1] предлагается применять явные методы типа Рунге-Кутта

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

где $y$ и $f$ – гладкие вещественные $N$-мерные вектор функции, $t$ – независимая переменная, $k_i$, $1 \le i \le m$, – стадии метода, $\alpha_i, p_{mi}$, $\beta_{ij}$, $1 \le i \le m$, $1 \le j \le i-1$, – числовые коэффициенты. 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.

*Работа поддержана грантами РФФИ 11-01-00106.

Однако в [1]–[2] не рассмотрен вопрос о выборе коэффициентов $\beta_{ij}$, которые влияют на устойчивость промежуточных схем и, в конечном счете, на эффективность алгоритма интегрирования.

**Численные схемы.** Для упрощения выкладок далее рассмотрим задачу Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений

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

для решения которой применим методы типа Рунге-Кутта, записанные в следующем виде

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

где $k_i = hf(y_{n,i-1}),\ 1 \leq i \leq m,\ y_{n,0} = y_n$. Построенные ниже методы применимы для неавтономных систем, если в (2) положить

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

В дальнейшем потребуется матрица $B_m$ с элементами $b_{ij}$ вида [1]

$$\begin{aligned} b_{1i} &= 1,\ 1 \leq i \leq m,\ b_{ki} = 0,\ 2 \leq k \leq m,\ 1 \leq i \leq k-1, \\ b_{ki} &= \sum_{j=k-1}^{i-1} \beta_{ij} b_{k-1,j},\ 2 \leq k \leq m,\ k \leq i \leq m. \end{aligned} \tag{6}$$

Устойчивость одношаговых методов исследуется на линейном уравнении $y' = \lambda y$, $\Re(\lambda) < 0$. Применяя вторую формулу (4) для решения $y' = \lambda y$, получим $y_{n+1} = Q_m(z) y_n$, $z = h\lambda$, где

$$Q_m(z) = 1 + \sum_{i=1}^{m} c_{mi} z^i,\ c_{mi} = \sum_{j=i}^{m} b_{ij} p_{mj},\ 1 \leq i \leq m. \tag{7}$$

Обозначая $C_m = (c_{m1}, \cdots, c_{mm})^T$ и $P_m = (p_{m1}, \ldots, p_{mm})^T$, соотношения (7) можно переписать в виде

$$B_m P_m = C_m, \tag{8}$$

где элементы матрицы $B_m$ определены соотношениями (6). Для промежуточных численных схем (4) имеем

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

$1 \le k \le m-1$. Используя обозначения $\beta_k = (\beta_{k+1,1}, \dots, \beta_{k+1,k})^T$ и $c_k = (c_{k1}, \dots, c_{kk})^T$ получим, что коэффициенты $\beta_{ij}$ промежуточных схем (4) и коэффициенты соответствующих многочленов устойчивости связаны соотношениями

$$B_k \beta_k = c_k,\ 1 \le k \le m-1. \qquad (10)$$

Заметим, что из сравнения (6) и (9) следует, что $b_{ki} = c_{i-1,k-1}$, то есть 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 промежуточной численных схем, то коэффициенты методов (4) однозначно определяются из линейных систем (8) и (10) с верхними треугольными матрицами $B_i,\ 1 \le i \le m$.

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

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) &= y(t_n) + hf + \frac{h^2}{2} f'f + \frac{h^3}{6}[f''f^2 + f'^2 f] + O(h^4), \\ y_{n+1} &= y_n + (\sum_{j=1}^{m} b_{1j} p_{mj}) hf + (\sum_{j=2}^{m} b_{2j} p_{mj}) h^2 f'_n f_n + \qquad (11) \\ &+ (\sum_{j=3}^{m} b_{3j} p_{mj}) h^3 f'^2_n f_n + 0.5(\sum_{j=2}^{m} b^2_{2j} p_{mj}) h^3 f''_n f^2_n + O(h^4), \end{aligned}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном $y(t_n)$ и приближенном $y_n$ решениях, соответственно. Из сравнения соотношений (11) видно, что численная формула (4) будет иметь первый порядок точности, если $\sum_{j=1}^{m} b_{1j} p_{mj} = 1$. Требование второго порядка точности (4) означает выполнение дополнительного условия $\sum_{j=2}^{m} b_{2j} p_{mj} = 0.5$. Наконец схема (4) будет иметь третий порядок, если дополнительно выполняются еще два соотношения

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

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 $c_{m1} = 1,\ c_{m2} = 0.5, c_{m3} = 1/6$. Учитывая, что $b_{2j} = \alpha_j,\ 2 \le j \le m$, нетрудно видеть, что совместность (8), (12) эквивалентна совместности соотношений

$$\sum_{j=2}^{m} \alpha_j p_{mj} = \frac{1}{2},\ \sum_{j=2}^{m} \alpha_j^2 p_{mj} = \frac{1}{3}, \tag{13}$$

где $\alpha_j,\ 2 \le j \le m$, определены формулами (5).

**Коэффициенты методов первого и второго порядков точности.** Будем предполагать, что заданы коэффициенты многочленов устойчивости [3]

$$Q_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^{k} c_{ki} z^i,\ 1 \le k \le m. \tag{14}$$

Для каждого $k,\ 1 \le k \le m$, обозначим через $|\gamma_k|$ 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 $z = h\lambda$, в (14) для каждого $Q_k(z), 1 \le k \le m$, проведем замену $h$ на $(h\gamma_k/\gamma_m)$. В результате вместо (14) получим

$$Q'_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^{k} c'_{ki} z^i,\ c'_{ki} = (\gamma_k/\gamma_m)^i c_{ki},\ 1 \le k \le m. \tag{15}$$

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

Определение коэффициентов методов (4) будем осуществлять по следующему алгоритму. С использованием [1] вычислим коэффициенты полиномов (14), удовлетворяющими некоторым заданным свойствам. Затем вычислим коэффициенты многочленов (15) 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

$$B_m = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & c'_{11} & c'_{21} & \dots & c'_{m-1,1} \\ 0 & 0 & c'_{22} & \dots & c'_{m-1,2} \\ & & \dots & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c'_{m-1,m-1} \end{pmatrix}, \tag{16}$$

Используя в (10) вектор $c'_k = (c'_{k1}, \dots, c'_{kk})^T$ вместо $c_k$, все коэффициенты методов (4) определяются из линейных систем (8) и (10).

**Коэффициенты методов третьего порядка точности.** При построении методов третьего порядка точности с согласованными областями устойчивости отличие от предыдущего случая заключается в том, что необходимо выполнение совместности уравнений (13). Поэтому будем полагать, что элемент $c'_{11}$ в матрице (16) есть пока неопределенный коэффициент полинома $Q'_1(z) = 1 + c'_{11}z$. Из линейной системы (8) последовательно определим $p_{mm}, p_{m,m-1}, \dots, p_{m3}$. Учитывая, что $\alpha_i = c'_{i-1,1},\ 2 \le i \le m$, перепишем соотношения (13) в виде

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

Разделив второе уравнение на первое, получим

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

Данное $c'_{11}$ обеспечивает совместность (13). Значения $p_{m2}$ и $p_{m1}$ последовательно определим из второго и первого уравнений (8). Оставшиеся коэффициенты $\beta_{ij}$, $3 \le i \le m$, $1 \le j \le i-1$, вычислим последовательным решением систем линейных уравнений $B_k\beta_k = c'_k$, $2 \le k \le m-1$, где $\beta_k = (\beta_{k+1,1}, \dots, \beta_{k+1,k})^T$ и $c'_k = (c'_{k1}, \dots, c'_{kk})^T$.

**Контроль устойчивости.** Неравенство для контроля устойчивости построим по аналогии [1]. Для получения данного неравенства применим метод (4) для решения задачи (3) при $f(y) =$

$Ay + b$, где $A$ и $b$ соответственно матрица и вектор с постоянными коэффициентами размерности $N$. Очевидно, 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 $f_n = Ay_n + b$, $f'_n = A$. Выберем $b'_i$ и $b''_i$, $1 \le i \le 3$, из условия выполнения равенств $\sum_{i=1}^3 b'_i k_i = h^3 f'^2_n f_n$, $\sum_{i=1}^3 b''_i k_i = h^2 f'_n f_n$. Нетрудно видеть, что данные соотношения будут выполнены, если $b'_1 = -(\alpha_2 + \alpha_3)/(\alpha_2^2 \beta_{32})$, $b'_2 = \alpha_3/(\alpha_2^2 \beta_{32}), b'_3 = 1/(\alpha_2 \beta_{32})$, $b''_1 = -1/\alpha_2$, $b''_2 = 1/\alpha_2$, $b''_3 = 0$. Теперь оценку максимального собственного числа $\lambda_n^{max}$ матрицы Якоби $\partial f(y_n)/\partial y$ задачи (3) можно вычислить по по формуле

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

Тогда неравенство для контроля устойчивости $m$-стадийного метода (4) имеет вид $h\lambda_n^{max} \le |\gamma_m|$, где $|\gamma_m|$ есть длина интервала устойчивости $m$-стадийной схемы. Неравенство для контроля устойчивости можно применять как для выбора шага интегрирования, так и для выбора метода и числа стадий в заданном методе в зависимости от поведения решения [1].

Из результатов численного сравнения методов с согласованными областями устойчивости и численных схем без согласования из [1] следует примерно 30-процентное повышение эффективности алгоритма интегрирования и более оправданное поведение величины шага на участке установления для ряда тестов.

## Список литературы

[1] Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем / Новосибирск: Наука, 1997, 197 с.

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

[3] Новиков В.А., Новиков Е.А. О построении явных методов типа Рунге-Кутта с расширенными областями устойчивости // Красноярск: Препринт ВЦ СО РАН № 9. 1998.