«Построении явно-неявных методов, *LN-эквивалентных* жестко точным методам Рунге-Кутты».

Зубанов А.М., *<u>Ширков П.Д.</u>*
Дмитровский институт непрерывного образования,
Международный университет природы, общества и человека «Дубна»
pdshirkov@gmail.com)

MPAMCS, 2012, Дубна

Задача Коши для систем ОДУ:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{f}\left(t, \vec{u}\right), \vec{u}(0) = \vec{u}_0, \tag{1}$$

$$\vec{u} = \left(u_1, \ldots, u_n\right)^T, \vec{f} = \left(f_1, \ldots, f_n\right)^T, \vec{u}_0 = \left(u_{01}, \ldots, u_{0n}\right)^T \in R^n.$$

Схемы Рунге-Кутты (РК)

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

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

Приложения - жесткие, жестко осциллирующие, сингулярно возмущенные задачи, дифференциально-алгебраические системы и др.

Жестко точные методы - $a_{ij} = b_j$, $j = 1, \ldots, s$.

R(∞)=0 для любого спектра модельной неавтономной линейной задачи.

Задача *Протеро и Робинсона (1974)* $z=\tau\lambda$ $(\tau \to 0, z \to \infty)$

$$y' = \lambda \cdot (y - \phi(x)) + \phi'(x), \quad y(0) = \phi(0), \quad \mathrm{Re}(\lambda) \le 0 \tag{3}$$

Метод (s стадий)	**Порядок метода**	**Стадийный порядок**	**Локальная погрешность**	**Глобальная погрешность**
Гаусс	$2 \cdot s$	s	τ^{s+1}	τ^{s}
Радо IA	$2 \cdot s-1$	$s-1$	τ^{s}	τ^{s}
Радо IIA	$2 \cdot s-1$	$\boldsymbol{s}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{s+1}}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{s+1}}$
Лобатто IIIA	$2 \cdot s-2$	s	$z^{-1} \cdot \tau^{s+1}$	$z^{-1} \cdot \tau^{s}$
Лобатто IIIB	$2 \cdot s-2$	$s-2$	$z \cdot \tau^{s-1}$	$z \cdot \tau^{s-2}$
Лобатто IIIC	$2 \cdot s-2$	$\boldsymbol{s-1}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{s}}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{s}}$
ДНРК(лучшие)	S	$\boldsymbol{1}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{1}}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{1}}$

Лобатто IIIC ***(s=2,p=2)***			***Радо IIA (s=2,p=3)***		
0	1/2	-1/2	1/3	5/12	-1/12
1	1/2	1/2	1	¾	1/4
	1/2	1/2		¾	1/4

Функция устойчивости: $$y' = \lambda(t) \cdot y(t). \quad (4)$$

$\boldsymbol{z_i = \tau\lambda_i = \tau\lambda(t + c_i \cdot \tau)}$ $(i=1,\ldots s)$. Пример для $s=2$:

$$R(z_i) = \frac{1 + (b_1 - a_{11}) \cdot z_1 + (b_2 - a_{22}) \cdot z_2 + [\Delta_A - b_1 \cdot (a_{22} - a_{12}) - b_2 \cdot (a_{11} - a_{21})] \cdot z_1 \cdot z_2}{1 - (a_{11} \cdot z_1 + a_{22} \cdot z_2) + \Delta_A \cdot z_1 \cdot z_2},$$

где Δ_A – определитель матрицы коэффициентов метода.

Определение. ***L(LN) – эквивалентными*** будем называть те методы, у которых совпадают функции устойчивости на линейных автономных (неавтономных) задачах вида (4).

Теорема 1. На основе известных диагонально неявных РК (ДНРК) методов нельзя построить *LN* устойчивые методы типа *Розенброка* с действительными коэффициентами. Аналогичное утверждение справедливо и для схем с комплексными коэффициентами.

Новый класс – ***<u>факторизованные методы</u>*** *(Обобщение ABC – методов[10])*

$$\vec{y}(t+\tau)=\vec{y}(t)+\tau\cdot\sum_{i=0}^{s}b_i\cdot\vec{K}_i,$$

$$\left[E-\tau\cdot\gamma_{i,1}\cdot J_{i,1}(d)+\tau^2\cdot\gamma_{i,2}\cdot(J_{i,1}(d))^2\right]\cdot\vec{K}_i=\vec{F}(\vec{y}+\tau\cdot\sum_{j=0}^{i-1}a_{i,j}\cdot\vec{K}_j)+\tau\cdot J_{i,2}(h)\cdot\left(\sum_{j=0}^{i-1}g_{i,j}\cdot\vec{K}_j\right),i=0,\dots,s,$$

$$J_{i,1}(d)=\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{y}}\left(\vec{y}+\tau\cdot\sum_{j=0}^{i-1}d^{(k)}{}_{i,j}\cdot\vec{K}_j\right),J_{i,2}(h)=\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{y}}\left(\vec{y}+\tau\cdot\sum_{j=0}^{i-1}h^{(k)}{}_{i,j}\cdot\vec{K}_j\right)$$

1.) Существует *3-х* параметрическое подмножество схем семейства (4), *L*-эквивалентных 2-х стадийному методу *Lobatto IIIC* (***a, d, h*** – параметры):

b_1=1, b_0=0, γ_1=1, γ_2=1/2, g= –1/2 – a.

2.) Существует *1-* параметрическое подмножество схем семейства (4) с точной оценкой локальной погрешности и 1 вычислением Якобиана, *L*-эквивалентных 2-х стадийному методу *Lobatto IIIC* (***a*** – параметр):

b_1=1, b_0=0, γ_1=1, γ_2=1/2, g= –1/2 – a, $d=h=(1/3-a^2)/(1-2\cdot a)$**.**

3.) Существует *1-* параметрическое подмножество схем семейства (4) с 1 вычислением Якобиана, *L*-эквивалентных 2-х стадийному методу *Radau IIA* (***a*** – параметр): **b_1=1, b_0=0, γ_1=2/3, γ_2=1/6, g= –1/6 – a,** $d=h=(1/3-a^2)/(1-2\cdot a)$**.**

Теорема 2. Свойство *LN* – эквивалентности жестко точным методам Рунге-Кутта на классе факторизованных методов ***не достижимо.***

Новое семейство явно-неявных методов.

$$\vec{y}(t+\tau)=\vec{y}(t)+\tau\cdot\sum_{i=0}^{s}(b_i\cdot\vec{K}_i);\vec{K}_0=\vec{F}(t+c_0\cdot\tau,\vec{y}(t));$$

$$M_i\cdot\vec{K}_i=H_{0,i}\cdot\vec{F}(t+c_3^{(i)}\cdot\tau,y+\tau\cdot\sum_{j=0}^{i-1}a_j^{(i)}\cdot\vec{K}_j)+H_i\cdot\sum_{j=0}^{i-1}g_j^{(i)}\cdot\vec{K}_j;i=1,\ldots,s. \qquad (4.1)$$

$$M_i=\left[E-\tau\cdot\gamma_1^{(i)}\cdot J_1^{(i)}-\tau\cdot\gamma_2^{(i)}\cdot J_2^{(i)}+\tau^2\cdot\gamma^{(i)}\cdot J_1^{(i)}\cdot J_2^{(i)}\right];$$
$$H_{0,i}=\left[h_{0,0}^{(i)}\cdot E-\tau\cdot h_{0,1}^{(i)}\cdot J_1^{(i)}-\tau\cdot h_{0,2}^{(i)}\cdot J_2^{(i)}+\tau^2\cdot h_0^{(i)}\cdot J_1^{(i)}\cdot J_2^{(i)}\right];$$
$$H_i=\left[E-\tau\cdot h_1^{(i)}\cdot J_1^{(i)}-\tau\cdot h_2^{(i)}\cdot J_2^{(i)}+\tau^2\cdot h^{(i)}\cdot J_1^{(i)}\cdot J_2^{(i)}\right], \qquad (4.2)$$
$$J_k^{(i)}=\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{u}}(t+c_{\mathrm{k}}^{(i)}\cdot\tau,y+\tau\cdot\sum_{j=0}^{i-1}d_{k,j}^{(i)}\cdot\vec{K}_j);k=1,2;i=1,\ldots,s;$$

Аналоги *2-х стадийных жестко точных* методов Рунге-Кутты – *LobattoIIIC* и *RadauIIA.*

<u>Функция устойчивости:</u>

$$R(z_1, z_2) = \frac{1 + (b_1 - a_{11}) \cdot z_1}{1 - (a_{11} \cdot z_1 + a_{22} \cdot z_2) + \Delta_A \cdot z_1 \cdot z_2}.$$

<u>2.1. Семейство А.</u>

$$\begin{aligned}
&M_1 \equiv M = \left[E - \tau \cdot \gamma_1 \cdot J_1 - \tau \cdot \gamma_2 \cdot J_2 + \tau^2 \cdot \gamma \cdot J_1 \cdot J_2\right]; \\
&H_{0,1} \equiv h \cdot E, c_3^{(1)} \equiv c_3, a_0^{(1)} \equiv a; (s = 1!); \\
&H_1 = \left[g_0 \cdot E - \tau \cdot g_1 \cdot J_1 - \tau \cdot g_2 \cdot J_2 + \tau^2 \cdot g \cdot J_1 \cdot J_2\right], g_0^{(1)} \equiv 1; \qquad (4.2A) \\
&J_k^{(i)} \equiv J_k = \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{u}}(t + c_k \cdot \tau, y + \tau \cdot d_k \cdot \vec{K}_0); k = 1,2.
\end{aligned}$$

<u>*Всего имеем 17 коэффициентов;*</u> 3 из них $(\gamma_1, \gamma_2, \gamma)$ определяются из условия *LN*-эквивалентности методов.

Методы, *LN*-эквивалентные *LobattoIIIC.*

LIIIC_A.1 (*a*, d_1 и d_2 – любые числа): $\gamma_1=\gamma_2=\gamma=0.5;$ $c_1=c_3=0, c_0=c_2=1; b_0=b_1=0.5;$ $h=1, g_0=0, g_1=a+0.5, g_2=g=-0.5.$	LIIIC_A.2 (*a* и d_1 – любые числа): $\gamma_1=\gamma_2=\gamma=0.5;$ $c_1=c_3=1/3, c_0=c_2=2/3; b_0=b_1=0.5;$ $h=1, g_0=0, g_1=a+0.5, g_2=g=-0.5;$ $d_2=d\cdot a-a^2/2+1/3, d_1=d.$

LIIIC_A.2 – метод с оценкой $\vec{e}_{loc}=\frac{\tau^3}{6}\cdot\left[\left(\frac{\partial\vec{F}}{\partial\vec{u}}\right)^2\cdot\vec{F}+\frac{1}{6}\cdot\frac{\partial^2\vec{F}}{\partial^2 t}\right].$

Методы, *LN*-эквивалентные *RadauIIA.*

RIIA_A.1 (*a* и $d_1=d$ – любые числа, $d_2=(3a-1)d+2/3-a^2/2$):

$$\gamma_1=5/12, \gamma_2=1/4, \gamma=1/6;$$

$$c_1=c_3=1/3, c_0=c_2=1; b_0=3/4, b_1=1/4;$$

$$h=3, g_0=-2, g_1=3a-7/12, g_2=-3/4, g=-1/2.$$

2.2. Семейство Б. (случай *s=2)*:

$$M_1 \equiv M_2 \equiv M = \lfloor E - \tau \cdot \gamma_1 \cdot J_1 - \tau \cdot \gamma_2 \cdot J_2 + \tau^2 \cdot \gamma \cdot J_1 \cdot J_2 \rfloor;$$
$$M \cdot \vec{K}_1 = \left[E - \tau \cdot g_1 \cdot J_1 - \tau \cdot g_2 \cdot J_2 + \tau^2 \cdot g \cdot J_1 \cdot J_2\right] \cdot \vec{F}(t + c_1 \cdot \tau, \vec{y});$$
$$M \cdot \vec{K}_2 = \left[E - \tau \cdot h_1 \cdot J_1 - \tau \cdot h_2 \cdot J_2 + \tau^2 \cdot h \cdot J_1 \cdot J_2\right] \cdot \vec{F}(t + c_2 \cdot \tau, \vec{y}); \qquad (4.2Б)$$
$$J_k^{(i)} \equiv J_k = \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{u}}(t + c_k \cdot \tau, y + \tau \cdot d_k \cdot \vec{K}_0); k = 1,2.$$

Здесь имеем 15 коэффициентов.

Методы, *LN*-эквивалентные *LobattoIIIC*. LIIIC_Б.1 (d_1 и d_2 – любые):	Методы, *LN*-эквивалентные *RadauIIA*. RIIA_Б.1 ($d_1 + d_2 = 2/3$):
$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma = 0.5; c_1 = 0, c_2 = 1; b_1 = b_2 = 0.5;$ $g_1 = 0, g_2 = 1/3, g = 0; h_1 = 2/3, h_2 = 0, h = 0.$ Если $d_1 = 1 - 2d_2$, то $\vec{e}_{loc} = \frac{\tau^3}{6} \cdot \left[\left(\frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{u}}\right)^2 \cdot \vec{F} - \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial^2 t}\right].$	$\gamma_1 = 5/12, \gamma_2 = 1/4, \gamma = 1/6; c_1 = 1/3, c_2 = 1;$ $b_1 = 3/4, b_2 = 1/4;$ $g_1 = 0, g_2 = 0, g = 0; h_1 = 2/3, h_2 = 0, h = 0.$

3. Тестирование методов.

3.1. В качестве первого теста рассмотрим линейное неавтономное уравнение вида

$$y' = \lambda \cdot (y - \phi(x)) + \phi'(x), y(0) = \phi(0), \mathrm{Re}(\lambda) \le 0.$$

Точное решение имеет вид:

$$y(x) = \phi(x) + \exp(\lambda \cdot x) \cdot (y(0) - \phi(x)),$$

где φ(x) – любая гладкая функция.

3.2. Для второго теста выберем нелинейную систему [9]:

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= -(\lambda + 2) \cdot y_1(t) + \lambda \cdot (y_2(t))^2, y_1(0) = 1, \lambda \ge 0, \\ y_2'(t) &= y_1(t) - y_2(t) - (y_2(t))^2, y_2(0) = 1. \end{aligned} \qquad (5)$$

Решение:

$$y_1(t) = \exp(-2 \cdot t); y_2(t) = \exp(-t)).$$

Таблица 1. Тест Протеро и Робинсона, шаг 0.001.

λ	CROS1C		RosLERK (LIIIC_Б.1)	RosLERK (RIIA_Б.2)
	точность	порядок	порядок	Порядок
10 ^ 1	-3,68E-05	1,9955	2,9644	7,3426
10 ^ 2	1,30E-05	1,9591	2,7556	2,5204
10 ^ 3	9,01E-05	1,6919	2,2278	2,0998
10 ^ 4	2,25E-04	1,1259	2,0342	2,0289
10 ^ 5	2,65E-04	1,0035	2,0131	2,0219
10 ^ 6	2,70E-04	1,0005	2,0110	2,0212
10 ^ 7	2,70E-04	1,0004	2,0108	2,0212

Таблица 2. Тест (5), шаг 0.001.

λ	CROS1C		RosLERK (LIIIC_Б.1)	RosLERK (RIIA_Б.2)
	точность	порядок	порядок	Порядок
10 ^ 1	9,34E-08	1.9882	1,9085	2,9432
10 ^ 2	3,49E-08	1.8698	2,1949	2,7386
10 ^ 3	9,41E-08	0.7372	2,0995	2,2173
10 ^ 4	3,11E-07	2.3164	2,0305	2,0246
10 ^ 5	3,74E-07	2.0312	2,0234	2,0033
10 ^ 6	3,82E-07	2.0045	2,0227	2,0012
10 ^ 7	3,83E-07	2.0019	2,0226	2,0010

Задача *Протеро и Робинсона (1974)* $z=\tau\lambda$ $(\tau \to 0, z \to \infty)$

$$y' = \lambda \cdot (y - \phi(x)) + \phi'(x), \;\; y(0) = \phi(0), \;\; \mathrm{Re}(\lambda) \le 0 \qquad (3)$$

Метод (s стадий)	**Порядок метода**	**Стадийный порядок**	**Локальная погрешность**	**Глобальная погрешность**
Гаусс	$2 \cdot s$	s	τ^{s+1}	τ^{s}
Радо IA	$2 \cdot s\text{-}1$	$s\text{-}1$	τ^{s}	τ^{s}
Радо IIA	$2 \cdot s\text{-}1$	$\boldsymbol{s}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{s+1}}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{s+1}}$
Лобатто IIIA	$2 \cdot s\text{-}2$	s	$z^{-1} \cdot \tau^{s+1}$	$z^{-1} \cdot \tau^{s}$
Лобатто IIIB	$2 \cdot s\text{-}2$	$s\text{-}2$	$z \cdot \tau^{s-1}$	$z \cdot \tau^{s-2}$
Лобатто IIIC	$2 \cdot s\text{-}2$	$\boldsymbol{s\text{-}1}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{s}}$	$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{s}}$
ДНРК(лучшие)	S	$\boldsymbol{1}$		$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{1}}$
CROS1C	1	$\boldsymbol{2\ (?)}$		$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{1}}$
RosLERK (LIIIC_Б.1)	1	$\boldsymbol{2\ (?)}$		$\boldsymbol{z^{-1(2?)} \cdot \tau^{2}}$
RosLERK (RIIA_Б.2)	1	$\boldsymbol{2\ (?)}$		$\boldsymbol{z^{-1} \cdot \tau^{2}}$

Библиография.

1. *Хайрер Э., Ваннер Г.,* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – Москва, «Мир», 1999.
2. *Protero A., Robinson A.,* “On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff systems of ordinary differential equations”.// Math. of Comput., 1974, vol.28, pp. 145-162.
3. *Деккер К., Вервер Я.,* Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. – Москва, «Мир», 1988.
4. *Ширков П.Д.,* Устойчивость ROW методов для неавтономных систем обыкновенных дифференциальных уравнений. //«Математическое моделирование», 2012 (*принята в печать*).
5. *Зубанов А.М., Ширков П.Д.* Методы типа Розенброка, *L*-эквивалентные неявным методам Рунге-Кутты // Сборник трудов 2-й Международной Конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», МГТУ СТАНКИН, Москва, 2011 – с. 10. (*принята в печать*).
6. *Alexander R.* Dioganaly implicit Runge-Kutta methods for stiff ODEs. //SIAM J. Numer. Anal., vol. 14, 1977. – pp.1006-1021.
7. *Скворцов Л.М.* Точность методов Рунге-Кутты при решении жестких задач. // «Ж. выч. математ. и матем. физ.», том 43, №9, 2003. – С. 1374-1384.
8. *Зубанов А.М, Коконков Н. И., Ширков П. Д.,* Одностадийный метод Розенброка с комплексными коэффициентами и автоматическим выбором шага. // «Математическое моделирование», **том 23**, № 3, 2011, – с. 127–138.
9. *Kaps P.* “Roserbrock-type methods”.// Numerical method for solving stiff initial value problems, G. Dalhquist and R. Jeltsch (eds.), 1981, Bericht No. 9, Inst. Fuer Geometrie und Praktische Math. Der RWTH Aachen.
10. *Филиппов С.С.* АВС-схемы для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. // Доклады РАН, 2004, т. 399, №2 – с. 170-172.