

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

3761/82

16/8-82

P5-82-346

П.Д.Ширков

МОНОТОННЫЕ СХЕМЫ
ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ
ДЛЯ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

1982

§ I. ВВЕДЕНИЕ

Численному решению задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{f}(t, \vec{u}), \vec{u}(0) = \vec{c}, \vec{u} = \{u_1, \dots, u_p\}, \vec{f} = \{f_1, \dots, f_p\}, \vec{c} = \{c_1, \dots, c_p\} \quad (I)$$

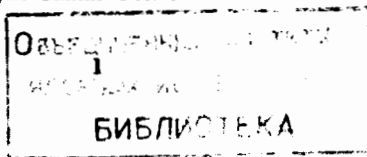
посвящена обширная литература (см. /1-8/ и приведенную там библиографию).

Для обеспечения хорошего качественного поведения разностного решения целесообразно строить схемы, удовлетворяющие ряду дополнительных условий, сформулированных в /4/: л - консервативности, л - монотонности и л - затуханию ("л" означает, что названные свойства реализуются для линейных систем). В работах /4,5/ проводится анализ широко используемых на практике численных методов решения задачи (I) с точки зрения перечисленных требований. Оказалось, что удовлетворить одновременно условиям высокого порядка аппроксимации, а также монотонности и быстрого затухания нелегко. Там же рассмотрены двухстадийные схемы с комплексными коэффициентами и построена одна л - монотонная, л - консервативная схема третьего порядка точности, имеющая л - затухание четвертого порядка. Проведенные априорные сравнения качества указанной схемы с классами схем Кертиса - Гиршфельдера /6/, Розенброка /7/ и других авторов нашли подтверждение в численных расчетах.

В настоящей работе проведено детальное исследование семейства двухслойных схем, рассмотренных в работе /4/, и построены следующие классы л - монотонных, л - консервативных схем:

- а) трехпараметрический класс третьего порядка точности для правых частей, не зависящих от аргумента t ;
- б) трехпараметрический класс третьего порядка точности для правых частей, зависящих от t .

Кроме того, указан способ нахождения схем четвертого порядка точности для правых частей, не зависящих от t , и вычислено несколько наборов коэффициентов для таких схем.



Исследование качества полученных схем для нелинейных задач не проводилось. Однако схемы, приведенные в данной работе, могут быть использованы для широкого круга задач, близких к линейным. К ним, например, относятся расчеты переходных процессов в электрических цепях.

§ 2. ДВУХСТАДИЙНЫЕ СХЕМЫ

Рассмотрим двухстадийную схему с комплексными параметрами^{/4/}:

$$\begin{aligned} [E - \alpha \tau \frac{\partial}{\partial y} f(t + \varepsilon_2 \tau, y)] v &= \tau f(t + \varepsilon_1 \tau, y), \\ [E - \beta \tau \frac{\partial}{\partial y} f(t + \varepsilon_4 \tau, y + Re(\delta v))] w &= \tau f(t + \varepsilon_3 \tau, y + Re(\delta v)), \\ \hat{y} &= y + Re(pv + qw), \quad \hat{y} = y(t + \tau), \end{aligned} \quad (2)$$

где τ - шаг по переменной t . Параметры $\varepsilon_i, i=1, \dots, 4$ могут быть только вещественными (так как $f(t, u)$ - функция вещественных переменных), а все остальные - комплексными:

$$\alpha = \alpha_0 + i\alpha_1, \quad \beta = \beta_0 + i\beta_1, \dots, \quad q = q_0 + iq_1.$$

В^{/4/} показано, что двухстадийные схемы (2) являются л - консервативными и для линейных задач $f(t, u) = Au$ имеют разностные интегралы вида

$$\hat{y}_k = y_k P_4(\tau \lambda_k) / Q_4(\tau \lambda_k),$$

где λ_k - собственные значения матрицы A , а P_4 и Q_4 - некоторые многочлены четвертой степени. Так же как и в^{/4/}, мы ограничимся рассмотрением задач с матрицами A , подобными диагональным.

Затухание будет наиболее быстрым, если $P_4(\tau \lambda_k) = 1$. В этом случае оно имеет четвертый порядок. Очевидно, что в классе двухстадийных схем это условие приводит к системе четырех уравнений, связывающих параметры:

$$2(\alpha_0 + \beta_0) = P_0 + Q_0, \quad (3a)$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 + 4\alpha_0\beta_0 = P_0(2\beta_0 + \alpha_0) + \alpha_1\beta_1 + q_0\beta_0 + q_0(2\alpha_0 - \delta_0), \quad (3б)$$

$$2(|\alpha|^2\beta_0 + |\beta|^2\alpha_0) = P_0(|\beta|^2 + 2\beta_0(\alpha_0 P_0 + \alpha_1 P_1) + (2\alpha_0 - \delta_0)(q_0\beta_0 + q_1\beta_1) + q_0(|\alpha|^2 - \alpha_0\delta_0 - \alpha_1\delta_1)), \quad (3в)$$

$$|\alpha|^2|\beta|^2 = |\alpha|^2(q_0\beta_0 + q_1\beta_1) + |\beta|^2(p_0\alpha_0 + p_1\alpha_1) - (\alpha_0\delta_0 + \alpha_1\delta_1)(q_0\beta_0 + q_1\beta_1) \quad (3г)$$

Если, кроме того, выполнены соотношения:

$$2(\alpha_0 + \beta_0) = 1, \quad (4a)$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 + 4\alpha_0\beta_0 = 1/2, \quad (4б)$$

$$2(|\alpha|^2\beta_0 + |\beta|^2\alpha_0) = 1/6, \quad (4в)$$

$$|\alpha|^2|\beta|^2 = 1/24, \quad (4г)$$

то отношение $1/Q_4(\tau \lambda_k)$ аппроксимирует интегралы исходного дифференциального уравнения (1) с максимальной точностью. Схемы, разностные интегралы которых аппроксимируют интегралы исходного дифференциального уравнения наилучшим образом (в данном классе схем), будем называть схемами с оптимальным затуханием.

Соотношения (4a) - (4г) обеспечивают на одном шаге пятый порядок аппроксимации интегралов системы (1). При этом разностные интегралы имеют вид

$$\hat{y}_k = y_k / [1 - \tau \lambda_k + \frac{1}{2}(\tau \lambda_k)^2 - \frac{1}{6}(\tau \lambda_k)^3 + \frac{1}{24}(\tau \lambda_k)^4]. \quad (5)$$

Можно показать, что в классе двухстадийных схем (2) нельзя добиться лучшего затухания.

Кроме того, видно, что многочлен в квадратных скобках в выражении (5) положителен при любых вещественных λ_k . Следовательно, схемы с коэффициентами, удовлетворяющими соотношениям (3a)-(3г), (4a)-(4г), являются л - монотонными.

§ 3. СХЕМЫ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

1. Условия третьего порядка аппроксимации для правых частей $f = f(u)$, не зависящих от аргумента, дают систему четырех уравнений^{/4/}:

$$P_0 + q_0 = 1, \quad (6a)$$

$$Re(\alpha p) + Re(\beta q) + q_0 \delta_0 = 1/2, \quad (6б)$$

$$Re(\beta q) \gamma_0 + q_0 \delta_0^2 / 2 = 1/6, \quad (6в)$$

$$Re(\alpha^2 p + \beta^2 q) + q_0 Re(\alpha \delta) + \delta_0 Re(q \beta) = 1/6. \quad (6г)$$

Условия третьего порядка аппроксимации для правых частей $f = f(t, u)$ требуют удовлетворения уравнений (6a)-(6г) и еще четырех соотношений:

$$P_0 \varepsilon_1 + q_0 \varepsilon_3 = 1/2, \quad (7a)$$

$$P_0 \varepsilon_1^2 + q_0 \varepsilon_3^2 = 1/3, \quad (7б)$$

$$Re(\alpha p) \varepsilon_2 + Re(\beta q) \varepsilon_4 + q_0 \delta_0 \varepsilon_3 = 1/3, \quad (7в)$$

$$(Re(\alpha p) + q_0 \delta_0) \varepsilon_1 + Re(q \beta) \varepsilon_3 = 1/6. \quad (7г)$$

Система уравнений (3), (4), (6), (7) содержит столько соотношений, каково число свободных вещественных параметров. Однако часть уравнений оказывается следствием других (например, очевидно, что уравнение (4а) есть следствие уравнений (6а) и (3а)). Это позволяет провести параметризацию решения системы (3), (4), (6), (7).

2. Стационарные правые части. Потребуем, чтобы для правых частей вида $f = f(u)$ двухстадийная схема (2) имела аппроксимацию не хуже $O(\tau^3)$ и оптимальное затухание. Тогда должны удовлетворяться уравнения (3), (4), (6), (7). Параметры γ_i и $\varepsilon_i, i=1, \dots, 4$, не определяются и остаются произвольными.

Из уравнений (3а)-(3в) удается (см. /4/) получить выражения для параметров $\alpha_1, \beta_0, \beta_1$ через параметр α_0 :

$$\begin{aligned} \beta_0 &= 1/2 - \alpha_0, \\ \alpha_1^2 &= \alpha_0^2 - \alpha_0/2 + 1/8 - 1/24(4\alpha_0 - 1), \\ \beta_1^2 &= \alpha_0^2 - \alpha_0/2 + 1/8 + 1/24(4\alpha_0 - 1). \end{aligned} \quad (8)$$

Отсюда и из (6а) легко получить соотношения (4а)-(4в). Таким образом, выражения (4а)-(4в) есть следствия уравнений (3а)-(3в) и (6а). Далее, соотношение (4г) однозначно определяет величину $(4\alpha_0 - 1)^2$; а именно,

$$(4\alpha_0 - 1)^2 = (4 \cos 40^\circ - 1) / 3.$$

Отсюда сразу имеем

$$\alpha_0^{1,2} = (1 \pm \sqrt{(4 \cos 40^\circ - 1) / 3}) / 4. \quad (9)$$

Оба значения α_0 допустимы, ибо при них величины α_1, β_1 в (8) оказываются вещественными.

В качестве примера приведем один набор численных значений параметров $\alpha_0, \alpha_1, \beta_0, \beta_1$, следующих из (8), (9):

$\alpha_0 =$	0,45737	33434	97297	57298	87,	
$\alpha_1 =$	0,23510	04879	98542	67320	70,	(10)
$\beta_0 =$	0,42626	65650	27024	27011	33	10^{-1} ,
$\beta_1 =$	0,39463	29531	72113	37981	09.	

Из этого набора еще несколько наборов можно получить тремя независимыми перестановками:

- 1) $\alpha_0 \leftrightarrow \beta_0, \alpha_1 \leftrightarrow \beta_1$;
- 2) $\alpha_1 \leftrightarrow -\alpha_1$;
- 3) $\beta_1 \leftrightarrow -\beta_1$.

(II)

В каждом случае разностные интегралы имеют вид (5), и, следовательно, схемы с коэффициентами, удовлетворяющими соотношениям (8), (9), l - монотонны, l - консервативны и имеют оптимальное затухание в классе двухступенчатых схем (2).

Замечание I. В (10) и всюду ниже приведены значения констант, полученных на ЭВМ с использованием двойной точности.

Перейдем теперь к определению остальных параметров: $\rho_0, \rho_1, q_0, q_1, \delta_0, \delta_1, \gamma_0, \gamma_1$. Для их нахождения воспользуемся оставшимися уравнениями (3г) и (6а)-(6г). Заметим, что соотношения (6в) можно отделить от остальных для определения γ_0 .

Проведем параметризацию, введя три независимых величины:

$$y_0 = q_0, \quad y_1 = q_1, \quad z_1 = \gamma_1. \quad (12)$$

Тогда из уравнений (3г), (6а), (6б) и (6г) получим:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 1 - y_0, \\ \delta_0 &= A_0 + (A_1 y_0 + A_2 y_1) / (y_0^2 + y_1^2), \\ \rho_1 &= B_0 + B_1 y_0 + B_2 y_1 + (y_0 / \alpha_1)(A_1 y_0 + A_2 y_1) / (y_0^2 + y_1^2), \\ \delta_1 &= [C_0 + C_1 y_0 + (C_2 y_0 + y_1 C_3)(A_1 y_0 + A_2 y_1) / (y_0^2 + y_1^2)] / y_0, \quad y_0 \neq 0, \\ \gamma_1 &= z_1, \end{aligned} \quad (13)$$

где величины A_i, B_i, C_i вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} A_0 &= 4\alpha_0 - 1, \\ A_1 &= \{ \beta_0(\alpha_0 - 1/6 - \alpha_0^2 - \alpha_1^2) + 1/4 - (4\alpha_0 - 1)(\beta_0^2 + \beta_1^2) / 2 \} / \beta_1^2, \\ A_2 &= (\alpha_0 - 1/6 - \alpha_0^2 - \alpha_1^2) / \beta_1, \\ B_0 &= -\beta_0 / \alpha_1, \\ B_1 &= -C_2 = (4\alpha_0 - 1) / 2\alpha_1, \\ B_2 &= C_3 = -\beta_1 / \alpha_1, \\ C_0 &= [\beta_0^2 + \beta_1^2 - 1/6 + \beta_0(4\alpha_0 - 1)] / \alpha_1, \\ C_1 &= (\beta_0 - 2\beta_1^2 - 2\beta_0^2) / \alpha_1. \end{aligned} \quad (14)$$

В таблице I приведены численные значения величин A_i, B_i, C_i , соответствующие значениям $\alpha_0, \alpha_1, \beta_0, \beta_1$, данным в (10). Еще не-

Таким образом, для случая $f = f(t, u)$ построено трехпараметрическое семейство л-монотонных, л-консервативных схем третьего порядка аппроксимации с оптимальным затуханием. Этот класс определяется соотношениями (8), (9), (13)–(18) и зависит от параметров

$$y_0 = q_0, \quad z_1 = \gamma_1, \quad S = \varepsilon_2.$$

Замечание 1. Очевидно, что семейство схем (8), (9), (13)–(18) принадлежит классу (8), (9), (13)–(15). Это позволяет использовать схемы, пригодные для расчета уравнения (1) с правыми частями, зависящими от переменной t , для уравнений с правыми частями вида $S = f(u)$.

В качестве примера приведем одну схему из семейства (8), (9), (13)–(18). Для ее получения потребуем, чтобы $y_0 = \varepsilon_4 = 0$. Тогда

$$y_0 = \frac{4}{7}, \quad y_1 = (4\beta_0 - 1)/7\beta_1, \quad S = (1/3 - y_0 \delta_0 \varepsilon_3) / \text{Re}(\alpha\rho), \quad \varepsilon_3 = \frac{3}{7}. \quad (19)$$

Отсюда и из отношений (13)–(18) получим значения всех параметров. Их численные значения приведены в таблице 2 и соответствуют случаю (10). Из этого набора еще несколько наборов получаются независимыми перестановками: 1) $\alpha_0 \leftrightarrow \rho_0, \alpha_1 \leftrightarrow \beta_1$; 2) $\beta_1 \leftrightarrow -\beta_1$; 3) $\alpha_1 \leftrightarrow -\alpha_1, \delta_1 \leftrightarrow -\delta_1, \rho_1 \leftrightarrow -\rho_1$, с соответствующим пересчетом остальных параметров по формулам (13), (17), (19).

Таблица 2

q_0	$4/7$				
q_1	0,30027	66304	09385	90555	81
ρ_0	0,42857	14285	71428	57142	86
ρ_1	0,73150	01040	74911	80931	87
δ_0	0,58292	80473	95270	73065	58
δ_1	-0,74614	71450	65558	16528	68
γ_0	0				
γ_1	0				
ε_1	1/3				
ε_2	0,34735	08804	30620	01034	04 10 ^I
ε_3	3/4				
ε_4	0				

Замечание 2. Существует четырехпараметрический класс л-монотонных, л-консервативных схем третьего порядка аппроксимации с затуханием четвертого порядка (см. замечание 4, п.2 настоящего параграфа).

§ 4. СХЕМЫ ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

Условия четвертого порядка аппроксимации для правых частей вида $f = f(u)$ требуют выполнения соотношений (3), (4), (6) и еще четырех уравнений^{1/4}:

$$\gamma_0^2 \text{Re}(\beta q) + q_0 \delta_0^3 / 3 = 1/12, \quad (20a)$$

$$q_0 \delta_0 \text{Re}(\alpha \delta) + \gamma_0 \text{Re}(q \beta^2) + \text{Re}(q \beta) (\gamma_0 \delta_0 + \text{Re}(\alpha \gamma)) = 1/8, \quad (20б)$$

$$\gamma_0 \text{Re}(q \beta^2) + \delta_0^2 \text{Re}(q \rho) / 2 = 1/4, \quad (20в)$$

$$\text{Re}(\rho \alpha^3) + \text{Re}(q \beta^3) + \delta_0 \text{Re}(q \beta^2) + \text{Re}(q \beta) \text{Re}(\alpha \delta) + q_0 \text{Re}(\alpha^2 \delta) = 1/24. \quad (20г)$$

Как было отмечено выше, в совокупности уравнений (3а)–(3г), (4а)–(4в), (6а)–(6г) три являются следствием других (см. § 3 п.2). Кроме того, легко показать, что уравнение (4г) есть линейная комбинация соотношений (6б), (6г), (3г), (20г).

Уравнение (20б) отделяется от остальных для определений величины γ_1 . Теперь с учетом соотношений (13) мы имеем два уравнения, (20а) и (20в), для определения значений параметров y_0 и y_1 . Преобразуем (20а) и (20в) и сделаем замену переменных:

$$y_0 = V / (V^2 + W^2), \quad y_1 = W / (V^2 + W^2). \quad (21)$$

Тогда параметр W явно выражается через V :

$$W = H_1 + H_2 V \pm \sqrt{H_3 + H_4 V}, \quad (22)$$

где величины $H_i, i=1, \dots, 4$ являются константами и вычисляются по формулам:

$$H_1 = (\beta_0 - 4\beta_0^2 + 4\beta_1^2) / 12\beta_1^2,$$

$$H_2 = (8\beta_0 - 1) / 12\beta_1,$$

$$H_3 = (D_2/2 - A_0 A_2) / A_2^2,$$

$$H_4 = -A_1 / A_2,$$

$$H_3 = [(D_2/2)^2 - A_0 A_2 D_2] / A_2^4,$$

$$H_4 = (D_1 A_2 - D_2 A_1) / A_2^3$$

в соответствии с соотношениями (14).

5. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Численные примеры интегрирования жестких систем., М., ИИМ АН СССР, 1981, Препринт № 90.
6. Curtiss C.F., Hirschfelder J.O., Integration of stiff equations. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 1952, v.38.
7. Rosenbrock H.H., Some general implicit processes for numerical solution of differential equations. Comp. Journ., 1963, v.5, N 4, pp. 329-330.
8. Банчев В.Ц. Об обобщенных методах интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. Сообщение ОИЯИ, P5-12174, Дубна, 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
13 мая 1982 года.

Ширков П.Д.

P5-82-346

Монотонные схемы повышенного порядка точности для жестких систем дифференциальных уравнений

Проведено детальное исследование семейства двухстадийных схем численного решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Построены трехпараметрические классы схем с комплексными коэффициентами третьего порядка точности, монотонные и консервативные в линейных задачах. Приводятся несколько монотонных и консервативных схем четвертого порядка аппроксимации. Полученные результаты могут быть использованы для расчета переходных процессов в электрических цепях.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Shirkov P.D.

P5-82-346

Monotonic Schemes of High-Order Approximation for Stiff Differential Equations

The family of two-step schemes was investigated in detail for numerical solving of the Cauchy problem for stiff differential equations. There were received triparametric classes of third order schemes with complex coefficients which are conservative and monotonic for linear problems. Several monotonic and conservative schemes of fourth order were listed. Such schemes can be recommended for electrical circuit calculations.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод автора.