объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р5-83-118

П.Д.Ширков

ТОЧНОСТЬ МОНОТОННЫХ СХЕМ ДЛЯ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Направлено в журнал "Вычислительная математика и математическая физика"

1983

§1. ВВЕДЕНИЕ

Последнее время непрерывно растет интерес к методам численного решения жестких систем дифференциальных уравнений

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = -\vec{f}(t, \vec{u}),\ t > 0;\quad \vec{u}(0) = \vec{a},\quad \vec{u} = \{u_1, \dots, u_m\},$$
$$\vec{f} = \{f_1, \dots, f_m\},\quad \vec{a} = \{a_1, \dots, a_m\}, \qquad /1/$$

о чем свидетельствуют многочисленные публикации /см., например,[1] и приведенную там библиографию/.

Для обеспечения хорошего качественного поведения разностого решения в работах [2,3] сформулирован ряд требований / λ - монотонности, λ - консервативности и оптимального λ - затухания/, которыми должны обладать используемые в расчетах схемы.

Однако до сих пор остается открытым вопрос не только об априорных оценках точности, но и вообще о характере сходимости разностных схем для жестких систем дифференциальных уравнений. Традиционные оценки для схем q-го порядка аппроксимации дают погрешность $O(u^{(q+1)}(t)\tau^{q+1})$. Для жестких систем они реализуются при настолько малых шагах сетки τ, что не представляют практической ценности.

В настоящей работе получены априорные оценки точности, не содержащие производных решений, в нормах пространств ℓ_p, $p \geq 1$, для λ-монотонных, λ-консервативных схем, имеющих оптимальное λ-затухание. Приведенные в работе оценки могут быть использованы при численном решении широкого круга задач, близких к линейным. К ним, например, относятся расчеты переходных процессов в электрических цепях и расчеты накопления ионов в электронных кольцах ускорителей.

§2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ИСХОДНЫЙ КЛАСС СХЕМ

1. Рассмотрим задачу Коши /1/ с линейной правой частью

$$\vec{f}(t, \vec{u}) = A\vec{u}, \qquad /2/$$

так же, как и в [2, 3], ограничиваясь положительно определенными матрицами A, подобными диагональным. В этом случае интегралы исходной системы /1/ имеют вид

$$U_k(t) = U_k^{\circ} \exp\{-\lambda_k t\}, \quad k = 1,\dots, m,$$

где λ_k - собственные значения матрицы A, а U_k° - константы, определяемые начальными условиями.

При выборе сеточных норм на предмет исследования точности разностных схем для численного решения системы /1/ существенным является следующее обстоятельство. Классическое определение сходимости разностного решения к решению дифференциальной задачи [4] не является конструктивным для жестких систем с точки зрения определения шага численного интегрирования τ, обеспечивающего заданную точность. Это связано с тем, что в таких системах существуют жесткие ограничения снизу на шаг τ, обусловленные величиной характерного интервала задачи [1,2]. В линейных системах эти ограничения определяются значениями собственных чисел матрицы A.

Поэтому на практике разумно использовать такие разностные схемы, оценки точности которых в заданной сеточной норме не зависят от свойств какой-либо конкретной задачи /например, от производных решений системы /1/ или от распределения собственных чисел матрицы A/.

2. В связи с этим дадим определение сходимости в более узком смысле. Для этого на множестве $t \geq 0$ введем равномерную сетку с шагом $\tau > 0$: $t_n = n\tau$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Пусть в пространстве сеточных функций $y(t_n)$ задана норма $\|\cdot\|_\tau$.

В дальнейшем мы будем исследовать разностные схемы на примере модельной задачи /1/, /2/, поэтому букву "л" [2] перед названием какого-либо свойства будем опускать.

<u>Определение</u>. Будем говорить, что разностное решение $y(t_n)$ λ-равномерно сходится к решению задачи /1/ $u(t)$ в норме $\|\cdot\|_\tau$, если его разностные интегралы $Y_k(t_n)$ таковы, что при $\tau \to 0$

$$\|U_k(t_n) - Y_k(t_n)\|_\tau \to 0$$

сразу для всех линейных задач Коши /1/, /2/ и всех номеров $k = 1,\dots,m$. Если при этом существуют такие константы M и α, что

$$\|U_k(t_n) - Y_k(t_n)\| \leq M\tau^\alpha, \quad \alpha > 0$$

одновременно для всех линейных задач Коши /1/, /2/ и всех номеров $k = 1,\dots,m$, то будем говорить, что разностное решение $y(t_n)$ λ-равномерно сходится с порядком α.

Очевидно,что данное определение накладывает более жесткие требования на разностные схемы, чем определение классической сходимости [4]. При этом из λ-равномерной сходимости всегда следует сходимость разностного решения к решению соответствующей дифференциальной задачи. Как будет показано в данной работе, обратное, вообще говоря, неверно.

3. Выделим теперь исходный класс схем. Для численного решения задачи /1/ мы будем использовать схемы, разностные интегралы которых для линейных задач /1/, /2/ имеют вид

$$Y_k(t+\tau) = Y_k(t)/[1 + (\tau\lambda_k) + \dots + (\tau\lambda_k)^q/q!], \quad k = 1,\dots, m. \qquad /3/$$

Здесь, как и раньше, λ_k - собственное значение матрицы A, q - некоторое натуральное число. Схемы с разностными интегралами такого вида монотонны, консервативны и оптимально затухают с порядком q.

К ним, например, относятся неявные схемы Рунге-Кутта [1], схемы с комплексными коэффициентами: одностадийная схема Розенброка [5] и ее обобщение на случай $\vec{f} = \vec{f}(t, \vec{u})$ [2], двухстадийные схемы, предложенные в работе [3].

4. Точность указанных схем мы будем исследовать в нормах пространств c и ℓ_p, $p \geq 1$. Пусть $y(t_n)$ - некоторая сеточная функция. Тогда

$$\|y\|_c \equiv \sup_n |y(t_n)|, \quad \|y\|_{\ell_p} \equiv \Big(\sum_{n=0}^{\infty} |y(t_n)|^p \tau\Big)^{1/p}, \quad p \geq 1.$$

Целью настоящей работы является доказательство сходимости в норме пространства c и λ - равномерной сходимости в норме пространств ℓ_p, $p \geq 1$,схем, разностные интегралы которых имеют вид /3/.

§3. СХОДИМОСТЬ В НОРМЕ ПРОСТРАНСТВА c

1. Для доказательства сходимости схем из исходного семейства /3/ нам понадобится оценить величину

$$\psi_q(\tau\lambda_k, n) \equiv E_q^{-1}(\tau\lambda_k) - \exp\{-\tau\lambda_k n\}, \quad \tau > 0, \quad \lambda_k > 0, \quad k = 1,\dots,m; \quad n = 0,1,\dots,$$

где $E_q(x) = 1 + x + \dots + x^q/q!$.

Далее будем рассматривать $\psi_q(x, n)$ как функцию непрерывного аргумента n. Очевидно, что при $n \geq 1$, $x \geq 0$ справедливы неравенства

$$0 \leq \psi_q(x, n) < \psi_{q-1}(x, n) < \dots < \psi_1(x, n).$$

Найдем максимальное значение функции $\psi_q(x, n)$ при $x > 0, n \geq 1$. Справедлива

<u>Лемма</u>. В области $x > 0, n \geq 1$ функция $\psi_q(x, n)$ не имеет точек локального экстремума.

Для доказательства леммы достаточно воспользоваться необходимым условием существования экстремума функции двух переменных и,проведя индукцию по q, показать, что система уравнений

Таблица

q	x_q	$\psi_q(x_q, 1)$	x^*_q	$\phi_q(x^*_q)$	C_q
1	2,51	0,203	0	0,5	2,5
2	2,58	$6{,}85\cdot10^{-2}$	1,75	$9{,}45\cdot10^{-2}$	1,38
4	3,25	$5{,}8\cdot10^{-3}$	3,15	$1{,}44\cdot10^{-2}$	2,48

$$\frac{\partial\psi_q}{\partial x}(x, n) = 0, \qquad \frac{\partial\psi_q}{\partial n}(x, n) = 0,$$

не является совместной в области $x > 0$, $n \geq 1$.

Из леммы вытекают следующие свойства функции $\psi_q(x, n)$.

1/ Максимальное значение функции $\psi_q(x, n)$ в области $x>0$, $n\geq1$ достигается на границе при $n=1$ в точке x_q, удовлетворяющей соотношению

$$e^x E_{q-1}(x) = E^2_q(x). \qquad /4/$$

Численным расчетом найдены единственные положительные решения уравнения /4/ при различных значениях параметра q и вычислены максимальные значения функции $\psi_q(x, n)$ в области $x>0$, $n\geq1$.

Они приведены в таблице.

2/ При достаточно больших x для любого $q = 1,2,3,\ldots$ имеет место оценка

$$\psi_q(x, n) \leq \psi_q(x, 1) < \frac{x^{q+1}}{(q+1)!\,e^x}.$$

3/ При достаточно малых x для любого $q = 1,2,3,\ldots$ верно неравенство

$$\psi_q(x, n) \leq \frac{x^q}{e(q+1)!}.$$

Следствием последнего свойства является

Теорема 1. Разностные схемы, интегралы которых для линейной задачи /1/, /2/ представимы в виде /3/, имеют точность порядка q в норме пространства c. Для них при $\tau\to0$ справедлива асимптотическая оценка

$$\|U_k - Y_k\|_c \leq \frac{(\tau\lambda)^q}{e(q+1)!}U^\circ_k, \quad k = 1,\ldots,m, \qquad /5/$$

где λ - максимальное собственное значение матрицы A /2/.

Замечание 1. Неравенство /5/ характеризует величину отклонения разностных интегралов от интегралов исходной дифференциальной задачи /1/. Оценка погрешности разностного решения $\|u_k - y_k\|_c$ включала бы норму матрицы преобразования подобия.

Замечание 2. Оценка /5/ для исходного класса схем неулучшаема. Кроме того, она не является конструктивной для жестких задач, так как реализуется при достаточно малых значениях шага сетки τ.

Замечание 3. Можно показать, что указанные схемы не обладают в норме $\|\cdot\|_c$ свойством λ-равномерной сходимости к решению задачи /1/. Действительно, для любого сколь угодно малого шага $\tau>0$ найдется линейная задача Коши /1/, /2/ с таким собственным значением $\lambda_k = \frac{x_q}{\tau} > 0$, что

$$\|U_k - Y_k\|_c = \psi_q(x_q, 1) = \mathrm{const} > 0.$$

Замечание 4. Погрешность разностного решения с ростом порядка схемы q стремится к нулю равномерно по λ_k, $k=1,\ldots,m$, и имеет место асимптотически точная оценка

$$\|U_k - Y_k\|_c = (0{,}4968)^{q+1}\left(\frac{0{,}4941}{q+1}\right)^{0,5} U^\circ_k,$$

что означает своеобразную "сходимость по порядку схемы".

2. Приведем некоторые примеры. Вычислим максимально возможную погрешность некоторых схем для жестких систем /1/, /2/.

1/ Рассмотрим неявную схему ломаных

$$\vec{y}(t_{n+1}) - \vec{y}(t_n) = \tau\vec{f}(t_{n+1}, \vec{y}(t_{n+1})), \quad n = 0,1,2,\ldots. \qquad /6/$$

Ее разностные интегралы для линейной задачи Коши /1/, /2/ имеют вид /3/ с $q=1$. Схема /6/ консервативна, монотонна и оптимально затухает с порядком $q=1$ /2,3/. Согласно таблице

$$\max\psi_1(x, n) = 0{,}203.$$

2/ Одностадийная схема Розенброка [2]

$$[E - \frac{1+i}{2}\tau \frac{\partial \vec{f}(t,\vec{y})}{\partial \vec{y}}]\,\vec{w}(t_n) = \tau \vec{f}(t_n + \frac{\tau}{2}, \vec{y}(t_n)),$$

$$\vec{y}(t_{n+1}) = \vec{y}(t_n) + \mathrm{Re}(\vec{w}(t_n)) \qquad /7/$$

и неявный метод Рунге-Кутта второй степени [1]

$$\vec{y}(t_{n+1}) - \vec{y}(t_n) = \qquad /8/$$

$$= \frac{\tau}{2}[\vec{f}(t_n, \vec{y}(t_n)) + \vec{f}(t_n, \vec{y}(t_{n+1}) - \tau\vec{f}(t_n, \vec{y}(t_n))],\quad n = 0,1,2,\ldots$$

имеют в линейной задаче Коши /1/, /2/ разностные интегралы вида /3/ с $q=2$. Эти схемы консервативны, монотонны и оптимально затухают с порядком $q=2$. Из таблицы находим, что

$$\max\psi_2(x, n) = 6{,}85\cdot 10^{-2}.$$

Заметим, что априорные оценки точности разностных интегралов схем /6/, /7/ совпадают до третьей значащей цифры с численными расчетами величин $\|U_k - Y_k\|_c$, проведенными в работе [6].

3/ Рассмотрим, наконец, неявную схему Рунге-Кутта четвертого порядка и двухстадийные схемы с комплексными коэффициентами, предложенные в работе [3]. Не выписывая их, заметим, что их разностные интегралы для линейной задачи Коши /1/, /2/ имеют вид /3/ с $q=4$. Следовательно, эти схемы консервативны, монотонны и оптимально затухают с порядком $q=4$. По таблице находим, что

$$\max\psi_4(x, n) = 5{,}8\cdot 10^{-3}.$$

§4. λ- РАВНОМЕРНАЯ СХОДИМОСТЬ В СРЕДНЕМ

1. Перейдем теперь к исследованию сходимости разностных схем семейства /3/ в нормах пространств ℓ_p, $p\geq 1$. При этом учтем, что

$$\|\psi_q\|_{\ell_1} \leq \|\psi_q\|_c\, [\|\psi_q\|_{\ell_1}/(\tau\|\psi_q\|_c)]^{1/p}\tau^{1/p},\quad p\geq 1.$$

Положим

$$\phi_q(x) \equiv \|\psi_q\|_{\ell_1}/\tau = (E_q(x)-1)^{-1} - (e^x - 1)^{-1},\quad q = 1,2,\ldots.$$

Тогда справедлива

Теорема 2. Разностные схемы, интегралы которых на линейных задачах /1/, /2/ имеют вид /3/, λ-равномерно сходятся в норме

пространств ℓ_p, $p\geq 1$, к решению задачи /1/ со скоростью $\tau^{1/p}$. При этом имеют место мажорантные оценки

$$\|U_k - Y_k\|_{\ell_p} \leq \psi_q(x_q, 1)(C_q\tau)^{1/p}\,U_k^\circ, \qquad /9/$$

$$p\geq 1,\quad q = 1,2,\ldots;\ k = 1,\ldots,m,$$

где константы $C_q = \max\limits_{x\geq 0}\phi_q(x)/\psi_q(x, 1)$ не зависят от собственных чисел λ_k, $k = 1,\ldots,m$.

Доказательства теоремы проводить не будем. Оно легко следует из перечисленных ниже свойств функции $\phi_q(x)$, $x\geq 0$:

1/ Для любого $x\geq 0$

$$0 < \phi_q(x) < \ldots < \phi_1(x) \leq \phi_1(0) = 0{,}5.$$

2/ Максимальное значение функции $\phi_q(x)$, $q = 1,2,\ldots$, достигается в точке x_q^*, удовлетворяющей уравнению

$$e^x(E_q - 1)^2 = E_{q-1}(e^x - 1)^2.$$

Его решения для некоторых значений параметра q найдены численно и вместе с соответствующими значениями функции $\phi_q(x)$ приведены в таблице. Там же приведены вычисленные значения констант C_q.

Замечание 1. Можно показать, что $\lim\limits_{q\to\infty} C_q = 1$.

Замечание 2. Оценка /9/ в метрике ℓ_1 не улучшаема. Действительно, для любого сколь угодно малого шага τ найдется линейная задача Коши /1/, /2/ с таким собственным значением $\lambda_k = \frac{x_q^*}{\tau} > 0$, что

$$\|U_k - Y_k\|_{\ell_1} = \phi_q(x_q^*)\,\tau.$$

2. Утверждение теоремы 2 и мажорантная оценка /9/ позволяют выбрать величину шага численного интегрирования τ, обеспечивающую заданную точность в нормах пространств ℓ_p, $p\geq 1$ независимо от свойств матрицы A исходной дифференциальной задачи /1/, /2/. Так, разностная схема с оптимальным затуханием порядка q гарантирует точность не хуже δ в норме пространств ℓ_p, $p\geq 1$, при

$$\tau \leq \delta/[C_q\, U_k^\circ(\psi_q(x_q, 1))^p].$$

Приведем некоторые примеры.

1/ Неявная схема ломаных /6/ λ - равномерно сходится со скоростью τ в норме пространства ℓ_1 к решению задачи /1/, и для ее точности верна оценка

$$\|U_k - Y_k\|_{\ell_1} \le 0{,}5 r\, U_k^\circ, \quad k = 1,\dots,m.$$

2/ Одностадийная схема Розенброка /7/ и неявный метод Рунге-Кутта /8/ второй степени λ-равномерно сходятся со скоростью r в норме ℓ_1. Для них верна оценка /9/ с константой $9{,}45\cdot 10^{-2}$.

3/ Неявные схемы Рунге-Кутта четвертого порядка /1/ и двухстадийные схемы, предложенные в работе /8/, λ-равномерно сходятся со скоростью r в норме пространства ℓ_1 к решению задачи /1/. При этом верна оценка

$$\|U_k - Y_k\|_{\ell_1} \le 1{,}44\cdot 10^{-2} r\, U_k^\circ, \quad k = 1,\dots, m.$$

В заключение автор пользуется случаем выразить сердечную благодарность Н.Н.Калиткину за постановку задачи и обсуждения полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноруцкий Н.Г. Численные методы решения жестких систем. "Наука", М., 1979.
2. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Интегрирование жестких систем дифференциальных уравнений. Препринт №80, ИПМ АН СССР, М., 1981.
3. Ширков П.Д. Монотонные схемы повышенного порядка точности для жестких систем дифференциальных уравнений. ОИЯИ, Р5-82-346, Дубна, 1982.
4. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., "Наука", 1977.
5. Rozenbrock H.H. Some General Implicit Processes for Numerical Solution of Differential Equations. Comp. Journ., 1963, v.5, pp.329-330.
6. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Численные примеры интегрирования жестких систем. Препринт №90, ИПМ АН СССР, М., 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 февраля 1983 года.

Ширков П.Д. Р5-83-118

Точность монотонных схем для жестких систем дифференциальных уравнений

Исследуется вопрос сходимости монотонных, консервативных и оптимально затухающих на линейных задачах разностных схем для жестких систем дифференциальных уравнений. В нормах пространств ℓ_p, $p \ge 1$, получены априорные оценки точности, не содержащие производных решений.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Shirkov P.D. P5-83-118

An Accuracy of Monotonic Schemes for Stiff Differential Equations

Convergence of monotonic and conservative difference schemes with optimum dumping for linear problems was investigated for stiff differential equations. In ℓ_p, $p \ge 1$ norms there were received a priori estimations of accuracy which are independent of derivatives of solutions.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод автора.