объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р5-84-872

П.Д.Ширков*

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ НЕАВТОНОМНЫХ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Направлено в "Журнал вычислительной математики и математической физики"

* Институт прикладной математики АН СССР , Москва

1984

1. ВВЕДЕНИЕ

1. Для численного интегрирования задачи Коши жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений /в дальнейшем - о.д.у/

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{f}(t, \vec{u}), \quad \vec{u}(0) = \vec{c}, \qquad /1/$$

$$\vec{u} = (u_1, \ldots, u_m)^T, \quad \vec{f} = (f_1, \ldots, f_m)^T, \quad \vec{c} = (c_1, \ldots, c_m)^T$$

предложено большое количество разностных схем /см. например, [1-3] и приведенную там библиографию/. Их обилие часто затрудняет и без того не простой выбор численного алгоритма при решении конкретных прикладных задач.

Для обеспечения хорошего качественного и количественного поведения разностных решений в жестких задачах, близких к линейным, целесообразно использовать схемы, удовлетворяющие ряду условий, сформулированных в [3]:

а/ л-монотонности /"л" означает, что указанные свойства реализуются на линейных системах/;

б/ л-затуханию;

в/ аппроксимации "мягких" компонент.

Схемы с перечисленными свойствами позволяют вести расчеты с крупным шагом вне пограничного слоя.

В работах [3-5] показано, что одновременно требованиям высокого порядка аппроксимации, монотонности и быстрого затухания удовлетворяют лишь схемы Розенброка с комплексными коэффициентами и неявные схемы Рунге-Кутта.

До сих пор теоретические исследования качества разностных схем для жестких систем о.д.у. проводились на модельной задаче Коши /1/ с линейной правой частью

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

При этом ограничивались постоянными положительно определенными матрицами A, подобными диагональным.

2. В настоящей работе проводится исследование свойств схем Розенброка с комплексными коэффициентами и неявных схем Рунге-Кутта на модельной линейной задаче Коши /1/ с матрицей A, зависящей от аргумента t:

$$\vec{f}(t, \vec{u}) = -A(t)\vec{u}. \qquad /3/$$

Здесь $A(t)$ - диагональная матрица, положительно определенная при любом неотрицательном значении t.

Интегралы системы /1/, /3/ имеют вид

$$U_k(t) = U_k^0 \exp\{-\int_0^t \lambda_k(s)ds\}, \quad k = 1, \ldots, m, \qquad /4/$$

где U_k^0 - константы, определяемые начальными условиями. Функции $\lambda_k(t)$ обладают свойствами: а/ $\lambda_k(t) > 0$ при $t \geq 0$ для любого $k = 1, \ldots, m$; б/ при любом фиксированном значении аргумента $t_0 \geq 0$ числа $\lambda_k(t_0)$, $k = 1, \ldots, m$- суть собственные значения матрицы $A(t_0)$. Следовательно, интегралы /4/ положительны и монотонно убывают при $U_k^0 > 0$, $k = 1, \ldots, m$.

Поэтому для численного решения жестких неавтономных задач Коши /1/, близких к линейным, целесообразно использовать такие разностные схемы, интегралы которых на модельной системе /1/, /3/ обладают свойствами а/-в/ п.1.

3. В работе построена одноступенчатая схема Розенброка второго порядка аппроксимации, монотонная и затухающая со вторым порядком на неавтономных линейных системах. Показано, что на таких системах двухстадийные схемы Розенброка с комплексными коэффициентами третьего порядка аппроксимации немонотонны и не могут иметь затухание выше второго порядка.

Таким образом, среди схем Розенброка с комплексными коэффициентами наилучшими свойствами /с точки зрения численного решения жестких неавтономных задач /1/, близких к линейным/ обладает одноступенчатая схема, полученная в настоящей работе. В частности, она позволяет вести расчеты с крупным шагом вне пограничного слоя /что особенно важно в сильно жестких системах/.

Исследование качества изучаемых схем для нелинейных задач не проводилось. Однако неявные схемы Рунге-Кутта и предложенная одностадийная схема Розенброка могут быть использованы для 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. СХЕМЫ РОЗЕНБРОКА

Особенное место среди семейства схем Розенброка занимают схемы с комплексными коэффициентами[3-5].

1. В[3] для случая неавтономной правой части построено обобщение одноступенчатой схемы Розенброка с комплексными параметрами. В нем матрица Якоби системы /1/ вычисляется на предыдущем слое.

Рассмотрим одноступенчатые схемы Розенброка с комплексными коэффициентами более общего вида:

$$[E - a\tau \frac{\partial}{\partial \vec{y}} \vec{f}(t + \epsilon_2 \tau, \vec{y})]\vec{v} = \tau \vec{f}(t + \epsilon_1 \tau, \vec{y}),$$
$$\hat{\vec{y}} = \vec{y} + \mathrm{Re}(p\vec{v}), \quad \hat{\vec{y}} = \vec{y}(t + \tau). \qquad /5/$$

Здесь a и p - комплексные ($a \neq 0$, $p \neq 0$), а ϵ_1 и ϵ_2 - вещественные параметры; τ - шаг сетки, E - единичная матрица.

Разностные интегралы семейства /5/ на задаче /1/, /3/ имеют вид

$$\hat{Y}_k = Y_k P(\tau) Q^{-1}(\tau), \quad k = 1, \ldots, m, \qquad /6/$$

где P и Q - некоторые многочлены второй степени.

Замечание. К семейству /5/, в частности, принадлежит схема с коэффициентами

$$a = 0{,}5(1 + i), \quad p = 1, \quad \epsilon_1 = 0{,}5, \quad \epsilon_2 = 0; \quad i = (-1)^{0,5}, \qquad /7/$$

приведенная в[3]. Ее разностные интегралы на задаче /1/, /3/ равны

$$\hat{Y}_k = Y_k \frac{1 + \tau[\lambda_k(t) - \lambda_k(t + 0{,}5\tau)]\,[1 + 0{,}5\tau(\lambda_k(t) + \lambda_k(t + 0{,}5\tau))]}{1 + \tau\lambda_k(t) + 0{,}5\tau^2\lambda_k^2(t)}.$$

Таким образом, схема /5/, /7/ немонотонна и не затухает на линейных неавтономных системах.

Потребуем, чтобы при любом $t \geq 0$ затухание интегралов /6/ было наиболее быстрым, т.е. $P(\tau) \equiv 1$. Это условие дает систему трех уравнений, связывающих параметры:

$$\epsilon_1 = \epsilon_2, \quad (a^* + a) - \mathrm{Re}(p) = 0, \quad |a|^2 - \mathrm{Re}(a^* p) = 0. \qquad /8/$$

Здесь a^* - число, комплексно сопряженное a.

Условия второго порядка аппроксимации для неавтономных систем /1/ требуют удовлетворения еще трех соотношений:

$$\mathrm{Re}(p) = 1, \quad (a^* + a) - \mathrm{Re}(a^* p) = 0{,}5, \quad \epsilon_2 = 0{,}5. \qquad /9/$$

Уравнения /8/, /9/ однозначно определяют значения параметров

$$a = 0{,}5(1 + i), \quad p = 1, \quad \epsilon_1 = \epsilon_2 = 0{,}5, \qquad /10/$$

при которых интегралы /6/ принимают вид

$$\hat{Y}_k = Y_k [1 + \tau\lambda_k(t + 0{,}5\tau) + 0{,}5\tau^2\lambda_k^2(t + 0{,}5\tau)]^{-1}.$$

Таким образом, схема /5/, /10/ имеет второй порядок аппроксимации, монотонна и оптимально затухает[4,5] со вторым порядком на линейных неавтономных задачах /1/, /3/. Следовательно, она пригодна для численного решения жестких неавтономных систем о.д.у., близких к линейным, и позволяет вести расчеты с крупным шагом.

2. Так же как и в[3,4], рассмотрим двухступенчатые схемы Розенброка с комплексными коэффициентами:

$$[E - \alpha\tau \frac{\partial}{\partial \vec{y}} \vec{f}(t + \epsilon_2\tau, \vec{y})]\vec{v} = \tau\vec{f}(t + \epsilon_1\tau, \vec{y}),$$

$$[E - \beta\tau \frac{\partial}{\partial \vec{y}} \vec{f}(t + \epsilon_4\tau, \vec{y} + \mathrm{Re}(\gamma\vec{v}))]\vec{w} = \tau\vec{f}(t + \epsilon_3\tau, \vec{y} + \mathrm{Re}(\delta\vec{v})), \qquad /11/$$

$$\hat{y} = \vec{y} + \mathrm{Re}(p\vec{v} + q\vec{w}), \quad \hat{y} = y(t + \tau).$$

Здесь параметры ϵ_j, $j = 1,\ldots,4$ следует брать вещественными, а остальные параметры – α, β, γ, δ, p, q – могут быть комплексными: $\alpha = \alpha_0 + i\alpha_1, \ldots, q = q_0 + iq_1$.

Очевидно также, что коэффициенты α, β, q отличны от нуля.

Замечание: Двухступенчатые схемы /11/ детально исследовались в[4]. Там же построены многопараметрические классы схем третьего порядка точности для неавтономных систем, монотонные и оптимально затухающие с четвертым порядком в линейных задачах /1/, /2/.

В дальнейшем нам понадобятся условия третьего порядка аппроксимации для неавтономных систем /1/. Они получены в[3] и имеют вид

$$p_0 + q_0 = 1, \qquad /12а/$$

$$\mathrm{Re}(\alpha p) + \mathrm{Re}(\beta q) + \delta_0 q_0 = 0{,}5, \qquad /12б/$$

$$\gamma_0 \mathrm{Re}(\beta q) + 0{,}5 q_0 \delta_0^2 = 1/6, \qquad /12в/$$

$$\mathrm{Re}(\alpha^2 p + \beta^2 q) + q_0 \mathrm{Re}(\alpha\delta) + \delta_0 \mathrm{Re}(\beta q) = 1/6, \qquad /12г/$$

$$p_0\epsilon_1 + q_0\epsilon_3 = 0{,}5, \qquad /12д/$$

$$p_0\epsilon_1^2 + q_0\epsilon_3^2 = 1/3, \qquad /12е/$$

$$\mathrm{Re}(\alpha p)\epsilon_2 + \mathrm{Re}(\beta q)\epsilon_4 + q_0\delta_0\epsilon_3 = 1/3, \qquad /12ж/$$

$$(\mathrm{Re}(\alpha p) + q_0\delta_0)\epsilon_1 + \mathrm{Re}(\beta q)\epsilon_3 = 1/6. \qquad /12з/$$

Покажем, что семейству схем /11/ не хватает свободных параметров для того, чтобы удовлетворить одновременно свойствам высокого порядка аппроксимации, монотонности и быстрого затухания компонент решения на модельной задаче /1/, /3/. Справедлива следующая лемма.

Лемма. Не существует двухстадийных схем Розенброка с комплексными коэффициентами /11/ третьего и четвертого порядка аппроксимации, затухающих на неавтономных системах /1/, /3/ с порядком выше второго.

Доказательство. Приведем лишь краткую схему доказательства леммы.

Разностные интегралы семейства схем /11/ на задаче /1/, /3/ имеют вид /6/, где P и Q – некоторые многочлены четвертой степени. Коэффициенты этих многочленов зависят от собственных чисел матрицы $A(t)$, вычисляемых в различные моменты времени t. Выпишем выражения для коэффициентов числителя в порядке возрастания степени τ:

$$a_0 = 1, \quad a_1 = (2\alpha_0\theta_2 - p_0\theta_1) + (2\beta_0\theta_4 - q_0\theta_3),$$

$$a_2 = [|\alpha|^2\theta_2 - \mathrm{Re}(\alpha^* p)\theta_1]\theta_2 + [|\beta|^2\theta_4 - \mathrm{Re}(\beta^* q)\theta_3]\theta_4 +$$

$$+ (2\alpha_0\theta_2 - p_0\theta_1)(2\beta_0\theta_4 - q_0\theta_3) + (\delta_0 - p_0)q_0\theta_1\theta_3, \qquad /13/$$

$$a_3 = (2\alpha_0\theta_2 - p_0\theta_1)[|\beta|^2\theta_4 - \mathrm{Re}(\beta^* q)\theta_3]\theta_4 + (\delta_0 - p_0)q_0\mathrm{Re}(\beta^* q)\theta_1\theta_3\theta_4 +$$

$$+ (2\beta_0\theta_4 - q_0\theta_3)[|\alpha|^2\theta_2 - \mathrm{Re}(\alpha^* p)\theta_1]\theta_2 + \mathrm{Re}[\alpha^*(\delta - p)]q_0\theta_1\theta_2\theta_3,$$

$$a_4 = [|\alpha|^2\theta_2 - \mathrm{Re}(\alpha^* p)\theta_1][|\beta|^2\theta_4 - \mathrm{Re}(\beta^* q)\theta_3]\theta_2\theta_4 +$$

$$+ \mathrm{Re}[\alpha^*(\delta - p)]\mathrm{Re}(\beta^* q)\theta_1\theta_2\theta_3\theta_4.$$

Здесь $\theta_j = \lambda_k(t + \epsilon_j\tau)$, $k = 1, \ldots, m$.

Условия третьего порядка затухания разностных интегралов требуют выполнения равенств

$$a_j = 0, \quad j = 2, 3, 4 \qquad /14/$$

сразу для всех значений $t \geq 0$. Это приводит к существенным ограничениям на выбор параметров ϵ_j, $j = 1,\ldots,4$. Например, они все не могут быть различимыми, так как в этом случае из соотношений /13/, /14/ следует, что $q_0 = 0$ и $p_0 = 0$, а каждое из этих равенств противоречит системе уравнений /12а/, /12д/, /12е/.

Далее можно убедиться, что никакие два из параметров ϵ_j, $j=1,\ldots,4$ не могут быть равны между собой. Ограничимся здесь рассмотрением самого трудоемкого случая. Предположим, что одновременно выполнены равенства

$$\epsilon_1 = \epsilon_2, \quad \epsilon_3 = \epsilon_4. \qquad /15/$$

Тогда из уравнений /12а/, /12д/-/12з/ следует, что

$$p_0 = 3(1 - p_0)\,\delta_0^2. \qquad /16/$$

Равенства /15/ дают $\theta_1 = \theta_2$, $\theta_3 = \theta_4$. Поэтому для того, чтобы условия /14/ были верны сразу при всех $t \geq 0$, необходимо выполнение соотношений

$$|\alpha|^2 - \mathrm{Re}(\alpha^* p) = 0, \quad |\beta|^2 - \mathrm{Re}(\beta^* p) = 0,$$

$$(2\alpha_0 - p_0)(2\beta_0 - q_0) + (\delta_0 - p_0)q_0 = 0,$$

$$(2\alpha_0 - p_0)[\,|\beta|^2 - \mathrm{Re}(\beta^* q)] + (\delta_0 - p_0)\mathrm{Re}(\beta^* q) = 0,$$

$$(2\beta_0 - q_0)[\,|\alpha|^2 - \mathrm{Re}(\alpha^* p)] + q_0 \mathrm{Re}[\alpha^*(\delta - p)] = 0,$$

$$[\,|\alpha|^2 - \mathrm{Re}(\alpha^* p)][\,|\beta|^2 - \mathrm{Re}(\beta^* q)] + \mathrm{Re}[\alpha^*(\delta - p)]\,\mathrm{Re}(\beta^* q) = 0.$$

Из них следует, что либо $\mathrm{Re}(\beta^* q) = 0$, либо $\delta_0 = p_0$. Первое из этих равенств противоречит условию $|\beta|^2 \neq 0$, а второе /с учетом /16// приводит к квадратному уравнению /относительно вещественного параметра $p_0 \neq 0$/, дискриминант которого отрицателен.

Повторяя подобные рассуждения для остальных случаев $\epsilon_\ell = \epsilon_j$, $\ell \neq j$, $\ell, j = 1,\ldots,4$, полностью завершим доказательство леммы.

Следствие. Схемы семейства /11/ будут немонотонны на системах /1/, /3/. Это следует из вида их разностных интегралов /6/, в которых коэффициенты числителя a_1 и a_2 /при τ и τ^2/ могут быть отрицательными.

Свойство немонотонности и плохое затухание разностных интегралов двухстадийных схем Розенброка с комплексными параметрами делают их непригодными /в отличие от одностадийной схемы /5/, /10// для численного расчета жестких неавтономных задач, в том числе и близких к линейным.

3. НЕЯВНЫЕ СХЕМЫ РУНГЕ-КУТТА

Исследуем свойства неявных схем Рунге-Кутта /1/ на линейных неавтономных системах /1/, /3/. Для этого выпишем разностные интегралы некоторых из схем на указанных задачах.

а/ Неявные схемы второго порядка аппроксимации

$$\hat{\vec{y}} - \vec{y} = 0{,}5\tau[\vec{f}(t+\tau, \hat{\vec{y}}) + \vec{f}(t, \hat{\vec{y}} - \tau\vec{f}(t+\tau, \hat{\vec{y}}))]$$

и

$$\hat{\vec{y}} - \vec{y} = \tau\vec{f}(t + 0{,}5\tau, \hat{\vec{y}} - 0{,}5\tau\vec{f}(t+\tau, \hat{\vec{y}}))$$

имеют на задаче /1/, /3/ разностные интегралы вида

$$\hat{Y}_k = Y_k[1 + 0{,}5\tau(\lambda_k(t+\tau) + \lambda_k(t)) + 0{,}5\tau^2\lambda_k(t)\lambda_k(t+\tau)]^{-1}$$

и

$$\hat{Y}_k = Y_k[1 + \tau\lambda_k(t + 0{,}5\tau) + 0{,}5\tau^2\lambda_k(t + 0{,}5\tau)\lambda_k(t+\tau)]^{-1}$$

соответственно.

б/ Неявная схема третьего порядка аппроксимации

$$\hat{\vec{y}} - \vec{y} = 0{,}25\tau[\vec{f}(t+\tau, \hat{\vec{y}}) + 3\vec{f}(t + \tau/3, \vec{z})],$$

$$\vec{z} = \hat{\vec{y}} - \frac{\tau}{3}\vec{f}(t + 2\tau/3, \hat{\vec{y}} - \frac{\tau}{3}\vec{f}(t+\tau, \hat{\vec{y}}))$$

имеет на задаче /1/, /3/ разностные интегралы вида

$$\hat{Y}_k = Y_k\{1 + 0{,}25\tau[\lambda_k(t+\tau) + 3\lambda_k(t + 0{,}5\tau)] +$$

$$+ 0{,}5\tau^2\lambda_k(t+\tau/3)\lambda_k(t+2\tau/3) + \frac{\tau^3}{6}\lambda_k(t+\tau/3)\lambda_k(t+2\tau/3)\lambda_k(t+\tau)\}^{-1}.$$

Видно, что неявные схемы Рунге-Кутта второго и третьего порядка аппроксимации монотонны и оптимально затухают на линейных неавтономных системах /1/, /3/.

Можно показать, что любая неявная схема Рунге-Кутта r-го порядка аппроксимации монотонна и оптимально затухает с порядком r на задачах /1/, /3/.

Таким образом, одностадийная схема Розенброка /5/, /10/ и неявные схемы Рунге-Кутта пригодны для численного решения жестких неавтономных систем /1/, в том числе и сильно жестких. Однако неявность схем Рунге-Кутта затрудняет их практическое использование.

Автор искренне благодарен Н.Н.Калиткину за обсуждение полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноруцкий И.Г. Численные методы решения жестких систем. "Наука", М., 1979.
2. Вычислительные методы и математическое моделирование. Тезисы лекций и докладов Всесоюзной школы молодых ученых. Изд-во "Знание", Минск, 1984.
3. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша АН СССР, №80, 1981.

4. Ширков П.Д. ОИЯИ, Р5-82-346, Дубна, 1982.
5. Ширков П.Д. Журнал вычисл.матем. и матем. физ., 1984, т. 24, №10, с. 1577.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 декабря 1984 года.

Ширков П.Д. Р5-84-872

Разностные схемы для неавтономных жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений

Для численного решения задачи Коши жестких систем о.д.у. исследуются свойства схем Розенброка с комплексными коэффициентами и неявных схем Рунге-Кутта. В качестве модельной задачи выбрана линейная неавтономная система. Построена одноступенчатая схема Розенброка второго порядка аппроксимации, монотонная и затухающая со вторым порядком на неавтономных линейных системах. Эта схема позволяет вести расчеты с крупным шагом вне пограничного слоя и может быть использована для численного решения широкого круга жестких задач, близких к линейным. К ним относятся, например, расчеты переходных процессов в электрических цепях.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Shirkov P.D. P5-84-872

Difference Schemes for Non-Autonomous Stiff Differential Equations

Properties of Rozenbroock schemes with imaginary coefficients and implicit Runge-Kutt schemes are investigated for numerical solving of the Caushy problem for stiff differential equations. A linear non-autonomous system was taken as a model test. One-step Rozenbrock monotonic scheme of the second order approximation which is dumping with the second order for linear non-autonomous problems has been constructed. This scheme allows one to make calculations outside the boundary layer with a large step and can be recommended for numerical solving of a great number of stiff problems, which are almost linear (for example, electrical circuit calculations).

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984