

**Министерство образования и науки Российской Федерации
«Московский физико-технический институт (государственный
университет)»**

**Физтех-школа Прикладной Математики и Информатики (ФПМИ)
Кафедра вычислительных технологий и моделирования в геофизике и
биоматематике**

Выпускная квалификационная работа бакалавра

**Решение жестких систем реакций свертывания
крови и моделирование образования тромба в
придатке левого желудочка**

Автор:

Студент 871 группы
Бутаков Иван Дмитриевич

Научный руководитель:

к.ф.-м.н.
Терехов Кирилл Михайлович

Научный консультант:

научная степень
Сергеев Сергей Сергеевич



Москва 2022

Аннотация

Решение жестких систем реакций свертывания крови и моделирование образования тромба в придатке левого желудочка

Бутаков Иван Дмитриевич

При патологиях в сердце характер течения в придатке левого предсердия меняется, повышается риск образования в нем тромба. Для моделирования процесса образования тромба требуется решать систему переноса-диффузии-реакции, где реакционная часть представлена жёсткой системой каскада свёртывания крови. Применение традиционных численных схем при интегрировании данной системы может вести к неустойчивости, нефизичным осцилляциям, к отсутствию сходимости итерационных методов решения возникающих нелинейных уравнений. В данной работе предложены два метода для неявного численного интегрирования жёстких нелинейных систем, способные до некоторой степени решить указанные проблемы. Методы основаны на «сглаживании» спектра матрицы Якоби правой части системы. Сглаживание производится путём комбинирования явного и неявного метода Эйлера с матричным весом. Весовая матрица вычисляется путём применения специально подобранной функции к спектру матрицы Якоби правой части. Подбор функции осуществлён с целью получения экспоненциального интегратора. В ходе работы полученные методы были проверены на следующих жёстких системах: модель Лотки-Вольтерры, модель осциллятора Ван-дер-Поля, модель каскада свёртывания крови. Во всех случаях предложенные методы показали улучшение устойчивости в сравнении с невзвешенным вариантом. В работе также описаны детали программной реализации предложенных методов. Наконец, дан краткий обзор возможностей по применению предложенной техники для построения других методов интегрирования, обладающих схожими свойствами.

Abstract

Solving stiff blood coagulation system and modeling clot formation in left atrial appendage

Оглавление

1	Введение	5
2	Теоретические сведения	7
2.1	Линейная теория устойчивости	7
2.1.1	Линейная устойчивость	8
2.1.2	Линейная жёсткость	11
2.1.3	Методы Рунге-Кутты	13

Глава 1

Введение

Написание данной работы мотивировано необходимостью решать жёсткие нелинейные уравнения реакции при моделировании образования тромба в придатке левого предсердия. Моделирование заключается в решении системы переноса-диффузии-реакции в геометрии левого предсердия или только его придатка. В качестве реакционной части выступает существенно упрощённая модель каскада свёртывания крови, описываемая девятью компонентами [1]. Каскад свёртывания крови — это жёсткая система дифференциальных уравнений, имеющая пороговый отклик на изменение параметров модели [23]. Это вынуждает использовать малый шаг по времени при неявном численном интегрировании. В свою очередь, это приводит к непрактично большому времени расчёта упомянутой модели. С целью увеличения допустимого шага по времени в работе [19] были предложены некоторые модификации реакционной части модели. Данные модификации заключались в замене нескольких компонент, дающих большой вклад во внедиагональную часть матрицы Якоби, на их экстраполированные значения. В данной работе мы фокусируемся исключительно на реакционной части модели, исследуя некоторые обобщения предложенного метода. Предложенный в настоящей работе метод основан на замечании, что матрица Якоби правой части уравнения реакции обладает седловой структурой, которая проявляется себя при численном интегрировании с большим шагом по времени. Мы сосредотачиваем своё внимание на одношаговых схемах интегрирования по времени, чтобы в дальнейшем встроить полученный метод в полностью неявный интегратор уравнения переноса-диффузии.

Согласно теореме Кантаровича [13; 18], для липшицевых в окрестности корня функций метод Ньютона локально сходится с квадратичной скоростью. В случае уравнений, возникающих при решении жёстких систем, константа Липшица может оказаться сколь угодно большой, и сходимость ухудшается [6; 7]. Среди методов по улучшению сходимости метода Ньютона можно перечислить линейный поиск [4; 24], метод доверительных областей [21] и различного рода ускорения [3; 9; 17]. Линейный поиск минимизирует невязку вдоль выбранного направления путём подбора оптимального шага. Метод доверительных областей изменяют направление шага, используя информацию о производных высшего порядка. Ускоренные методы используют историю шагов при решении задачи оптимизации. Возможна также комбинация упомянутых методов [10]. Квазиньютоновские методы активно используются для ре-

шения уравнений, возникающих при интегрировании жёстких систем [2; 8; 16; 20]. Данная группа методов решает задачу оптимизации или поиска корней уравнения, используя аппроксимации производных, а не их точные значения. Все эти методы отличаются необходимым количеством вычислений невязки, якобиана или гессиана в ходе поиска решения. Наш подход заключается в улучшении сходимости метода Ньютона в случае неявного метода Эйлера численного интегрирования. Предложенный способ можно рассматривать как вариант квазиньютоновского метода, где на каждой итерации используется модифицированная матрица Якоби. В настоящей работе предложен способ получения модифицированной матрицы Якоби, основанный на решении вспомогательной задачи, связанной с построением численной схемы специального вида.

Много работ посвящено устойчивости и выбору численных схем [6; 11; 12; 15]. Среди популярных схем можно перечислить метод трапеций, семейство многостадийных методов Рунге-Кутты, формулу дифференцирования назад, методы Розенброка и многие другие. Простейшим методом является явный метод Эйлера, но он имеет малую область абсолютной устойчивости. Неявный метод Эйлера обладает гораздо большей областью абсолютной устойчивости, однако требует решения нелинейного уравнения на каждом шаге. Метод трапеций — арифметическое среднее между явным и неявным методом Эйлера — всё еще достаточно простая схема, дающая, однако, хорошие результаты для некоторых жёстких систем [5]. В настоящей работе строится аналогичная схема, где явная и неявная части комбинируются при помощи весовой матрицы. Данная матрица зависит от производной правой части системы дифференциальных уравнений и подбирается так, чтобы итоговая схема давала экспоненциальный интегратор.

Глава 2

Теоретические сведения

Прежде чем перейти к описанию численных методов, остановимся подробнее на теории жёстких систем дифференциальных уравнений. В данном разделе приведены необходимые для дальнейшего анализа элементы линейной и нелинейной теории устойчивости численных методов. Отметим, что данная теория гораздо более полно описана в работах [14; 25].

В дальнейшем часто будет рассматриваться задача Коши вида

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(t, \mathbf{x}), \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \end{cases}$$

Поскольку любую систему обыкновенных дифференциальных уравнений можно свести к автономной, добавив уравнение $dt/dt = 1$, запись задачи можно упростить:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x}), \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \end{cases} \quad (2.1)$$

Раскладывая $f(\mathbf{x})$ в ряд Тейлора в окрестности \mathbf{x}_0 и пренебрегая членами, содержащими производные порядка выше второго, можно получить линеаризованную задачу Коши:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = f_0 + F(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \end{cases} \quad (2.2)$$

где $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}|_{\mathbf{x}_0} = F(\mathbf{x}_0) \equiv F_0$ — матрица Якоби правой части уравнения в точке \mathbf{x}_0 .

Для линеаризованной задачи (2.2) известно точное решение. В случае, если F_0 обратима, оно имеет вид

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + (\exp(t \cdot F_0) - I)F_0^{-1} \cdot f_0$$

2.1 Линейная теория устойчивости

В рамках линейной теории устойчивости рассматривается поведение численного метода при решении уравнения (2.2). В случае невырожденной F_0 при помощи линейной

замены $\mathbf{x}' = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 + F_0^{-1}f_0$ задача сводится к уравнению Далквиста:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = F_0 \cdot \mathbf{x}, \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \end{cases} \iff \mathbf{x}(t) = \exp(t \cdot F_0) \cdot \mathbf{x}_0 \quad (2.3)$$

Для линейных (возможно, многошаговых) численных схем в случае $f(\mathbf{x}) = F_0 \cdot \mathbf{x}$ один шаг можно [14] записать в виде

$$\mathbf{x}^{n+1} = R(\Delta t \cdot F_0) \cdot \mathbf{x}^n, \quad (2.4)$$

где $R(z)$ — функция устойчивости, а $R(\Delta t \cdot F_0)$ — матрица перехода. Обычно $R(z)$ рассматривается как функция комплексного переменного, и потом естественным образом обобщается на матричный аргумент. По умолчанию так и будет далее подразумеваться. Однако в силу специфики данной работы, понятие функции устойчивости будет иногда обобщаться, сразу предполагая матричный характер (то есть прообраз среди функций комплексного переменного может отсутствовать).

Приведём несколько примеров линейных численных схем и их функций устойчивости. Эти примеры понадобятся при дальнейшем анализе.

<i>Явный метод Эйлера:</i>	$\frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} = f(\mathbf{x}^n)$	$R(z) = 1 + z$
<i>Неявный метод Эйлера:</i>	$\frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} = f(\mathbf{x}^{n+1})$	$R(z) = \frac{1}{1 - z}$
<i>Метод трапеций:</i>	$\frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}f(\mathbf{x}^n) + \frac{1}{2}f(\mathbf{x}^{n+1})$	$R(z) = \frac{2 + z}{2 - z}$

В общем случае двухточечной схемы:

$$\frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} = (1 - M)f(\mathbf{x}^n) + Mf(\mathbf{x}^{n+1}) \quad R(z) = (1 - Mz)^{-1}(1 + (1 - M)z),$$

где M , вообще говоря, может быть матрицей (в таком случае $R(z)$ следует изначально рассматривать как матричную функцию). Если же M — число, то данная схема называется θ -методом.

2.1.1 Линейная устойчивость

Рассмотрим формально вопросы затухания аналитического и численного решения с течением времени. Для этого потребуются следующие определения и теоремы:

Определение 2.1. Пусть $\sigma(A) \subseteq \mathbb{C}$ — спектр линейного оператора A . Число $r(A) = \sup\{|\lambda| \mid \lambda \in \sigma(A)\}$ называется спектральным радиусом линейного оператора A , а $s(A) = \sup\{\operatorname{Re} \lambda \mid \lambda \in \sigma(A)\}$ — спектральной границей.

Теорема 2.2 (формула Бёрлинга-Гельфанда). Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве X над \mathbb{C} . Тогда $r(A) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|A^n\|^{\frac{1}{n}} = \inf_{n \in \mathbb{N}} \|A^n\|^{\frac{1}{n}}$.

Следствие 2.3. Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве X над \mathbb{C} . Тогда

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0 \quad (r(A))^n \leq \|A^n\| < (r(A) + \varepsilon)^n$$

Доказательство. По теореме 2.2

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0 \quad \left| \|A^n\|^{\frac{1}{n}} - r(A) \right| < \varepsilon,$$

причём $\forall n \in \mathbb{N} \quad r(A^n) = (r(A))^n \leq \|A^n\|$. Тогда

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0 \quad r(A) \leq \|A^n\|^{\frac{1}{n}} < r(A) + \varepsilon,$$

откуда получаем искомое неравенство. \square

Теорема 2.4 (об отображении спектра; [22], предложение 2.8). Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве X над \mathbb{C} , f — регулярная в окрестности $\sigma(A)$ функция. Тогда

$$\sigma(f(A)) = f(\sigma(A))$$

Лемма 2.5. Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве X над \mathbb{C} . Тогда

$$s(A) = \inf \left\{ \omega \in \mathbb{R} : \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-\omega t} \cdot \|\exp(t \cdot A)\| = 0 \right\}$$

Доказательство. Обозначим $T(t) = \exp(t \cdot A)$. Тогда

$$T(t) = \exp((n\Delta t + \tau) \cdot A) = (T(\Delta t))^n \cdot T(\tau),$$

где $\Delta t > 0$, $n = \lfloor t/\Delta t \rfloor$, $\tau = t - n\Delta t \in [0; \Delta t)$. В силу ограниченности A имеем $\|T(t)\| \leq e^{t \cdot \|A\|}$. Согласно теореме 2.4, $\sigma(T(t)) = \exp(t \cdot \sigma(A))$, из чего следует $r(T(t)) = e^{t \cdot s(A)}$. Применяя следствие 2.3 и учитывая, что

$$C^{-1} = e^{-\Delta t \cdot \|A\|} \leq \|T(-\tau)\|^{-1} = \|T(\tau)^{-1}\|^{-1} \leq \|T(\tau)\| \leq e^{\Delta t \cdot \|A\|} = C,$$

получаем, что $\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0$

$$C^{-1} \cdot e^{n\Delta t \cdot s(A)} \leq \|T(t)\| \leq C \cdot e^{n\Delta t \cdot (s(A) + \varepsilon)}$$

Наконец, так как $n\Delta t = t - \tau$, $\forall \varepsilon > 0 \quad \exists t_0 > 0 : \forall t > t_0$

$$M^{-1} \cdot e^{t \cdot s(A)} \leq \|T(t)\| \leq M \cdot e^{t \cdot (s(A) + \varepsilon)},$$

где $M = C \cdot e^{\Delta t \cdot |s(A)|} = e^{\Delta t \cdot (\|A\| + |s(A)|)}$. Отсюда получаем доказываемое утверждение. \square

Следствие 2.3 позволяет на основе данных о спектре линейного оператора A оценить асимптотику $\|A^n\|$, а лемма 2.5 — $\|\exp(t \cdot A)\|$.

Вернёмся к уравнению Далквиста (2.3). Нас интересуют равномерные оценки на норму численного решения, получаемого заданным методом при заданном постоянном шаге интегрирования. Для этого введём следующее определение и утверждение:

Определение 2.6. Множество $\mathbf{R} = \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| < 1\}$ называется областью абсолютной устойчивости численного метода, обладающего функцией устойчивости $R(z)$. Множество $\overline{\mathbf{R}} = \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| \leq 1\}$ — замыкание области абсолютной устойчивости.

Утверждение 2.7. Пусть численное решение уравнения (2.3) ищется интегрированием с постоянным шагом Δt при помощи метода, обладающего функцией устойчивости $R(z)$ и соответствующей областью абсолютной устойчивости \mathbf{R} . Пусть также $R(z)$ регулярна в окрестности $\Delta t \cdot \sigma(F_0)$. Тогда $\mathbf{x}^n = (R(\Delta t \cdot F_0))^n \cdot \mathbf{x}_0$, и выполнено

$$\begin{aligned} \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbf{R} & \iff \| (R(\Delta t \cdot F_0))^n \| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \\ \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C} \setminus \overline{\mathbf{R}} & \implies \| (R(\Delta t \cdot F_0))^n \| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty \end{aligned}$$

Доказательство. В силу (2.4) имеем первое утверждение: $\mathbf{x}^n = (R(\Delta t \cdot F_0))^n \cdot \mathbf{x}_0$. Далее заметим, что по теореме 2.4

$$\sigma(R(\Delta t \cdot F_0)) = R(\Delta t \cdot \sigma(F_0))$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbf{R} & \iff r(R(\Delta t \cdot F_0)) < 1 \\ \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C} \setminus \overline{\mathbf{R}} & \iff r(R(\Delta t \cdot F_0)) > 1 \end{aligned}$$

Наконец, применяя следствие 2.3, завершаем доказательство утверждения. \square

В теории линейной устойчивости важная роль отводится A -устойчивости — свойству численного решения уравнения Далквиста не возрастать по норме, если не возрастает норма истинного решения. Если к тому же при увеличении шага интегрирования норма численного решения на следующей итерации (или, быть может, через некоторое заранее известное число итераций) также стремится к нулю, то говорят об L -устойчивости. Дадим формальное определение.

Определение 2.8. Численный метод называется A -устойчивым в случае, если $\mathbb{C}^- \equiv \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re} z < 0\} \subseteq \mathbf{R}$.

Определение 2.9. Численный метод называется L -устойчивым в случае, если он A -устойчив и выполнено $\lim_{\operatorname{Re} z \rightarrow -\infty} R(z) = 0$.

Утверждение 2.10. Пусть $R(z)$ регулярна в \mathbb{C}^- . Соответствующий численный метод A -устойчив тогда и только тогда, когда $\forall F_0$ выполнено

$$\|\exp(t \cdot F_0)\| \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0 \implies \forall \Delta t > 0 \quad \|(R(\Delta t \cdot F_0))^n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

Доказательство. В силу леммы 2.5 импликацию из утверждения можно переписать в виде

$$\sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C}^- \implies \forall \Delta t > 0 \quad \|(R(\Delta t \cdot F_0))^n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

Если также воспользоваться 2.7, получаем

$$\sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C}^- \implies \forall \Delta t > 0 \quad \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbf{R},$$

что при произвольном F_0 равносильно $\mathbb{C}^- \subseteq \mathbf{R}$. Это даёт определение 2.8. \square

Утверждение 2.11. Пусть $R(z)$ регулярна в \mathbb{C}^- . Если соответствующий численный метод L -устойчив, то $\forall F_0$ выполнено

$$\|\exp(t \cdot F_0)\| \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0 \implies r(R(\Delta t \cdot F_0)) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow +\infty} 0$$

Доказательство. Аналогично доказательству утверждения 2.10, перепишем импликацию в виде

$$\sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C}^- \implies r(R(\Delta t \cdot F_0)) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow +\infty} 0$$

В силу теоремы 2.4 это эквивалентно

$$\sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C}^- \implies \sup\{|\lambda| \mid \lambda \in R(\Delta t \cdot \sigma(F_0))\} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow +\infty} 0,$$

что при произвольном F_0 равносильно $\forall z \in \mathbb{C}^- \quad |R(\Delta t \cdot z)| \xrightarrow{\Delta t \rightarrow +\infty} 0$. Это верно для L -устойчивых методов по определению 2.9. \square

Стоит отметить, что утверждение 2.11, в отличие от 2.10, сформулировано в форме признака, а не критерия. Также в нём получено лишь утверждение о пределе спектрального радиуса, а не нормы. По сути, это означает, что получаемая для L -устойчивого метода матрица перехода с увеличением размера шага становится «почти нильпотентной». Если F_0 диагонализуема, то из стремления к нулю спектрального радиуса матрицы перехода будет автоматически следовать и стремление к нулю её нормы.

2.1.2 Линейная жёсткость

Как видно из приведённых результатов, спектр матрицы F_0 может задавать определённые ограничения на шаг интегрирования Δt . Действительно, если $s(F_0) < 0$, но численный метод не A -устойчив, полученное данным методом решение может вести себя некорректно при некоторых F_0 и Δt : если $\Delta t \cdot \sigma(F_0) \not\subseteq \mathbf{R}$, то численное решение может возрасти, в то время как аналитическое решение убывает. В тоже время, такая ситуация невозможна независимо от Δt при использовании A -устойчивых методов. Но A -устойчивость не гарантирует соизмеримую с аналитическим решением скорость затухания численного; возможен даже случай $\lim_{\operatorname{Re} z \rightarrow -\infty} |R(z)| = 1$, что приводит к слабо затухающим осцилляциям численного решения вокруг нуля при

сравнительно быстром стремлении к нулю истинного решения. Если требуется рост скорости затухания за конечное число шагов при увеличении Δt , следует пользоваться L-устойчивыми методами.

На рисунках 2.1, 2.2 проиллюстрировано поведение явного метода Эйлера (не A-устойчивый), метода трапеций (A-устойчивый, но не L-устойчивый) и неявного метода Эйлера (L-устойчивый) при разных значениях $z = \Delta t \cdot F_0$ в одномерной задаче Далквиста.

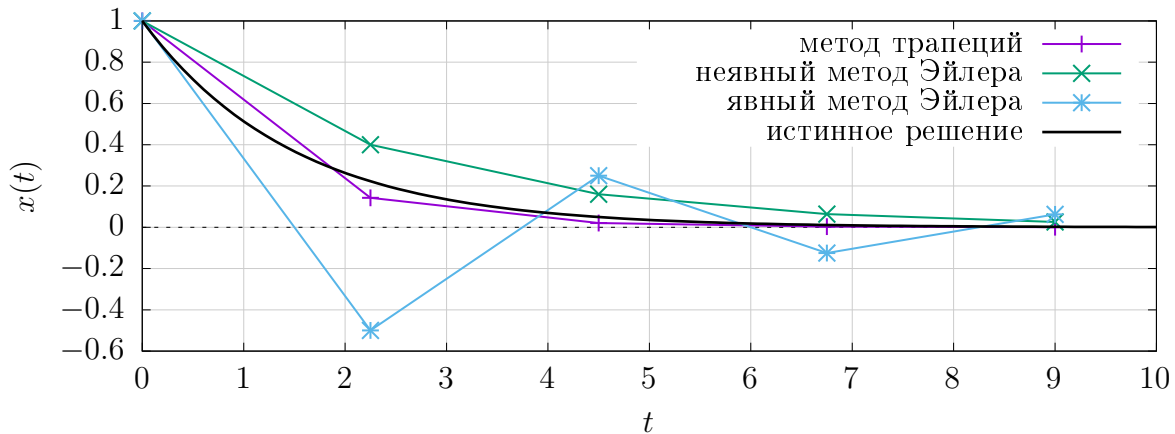


Рис. 2.1: Поведение простейших численных методов при решении одномерного уравнения Далквиста ($z = -1.5$)

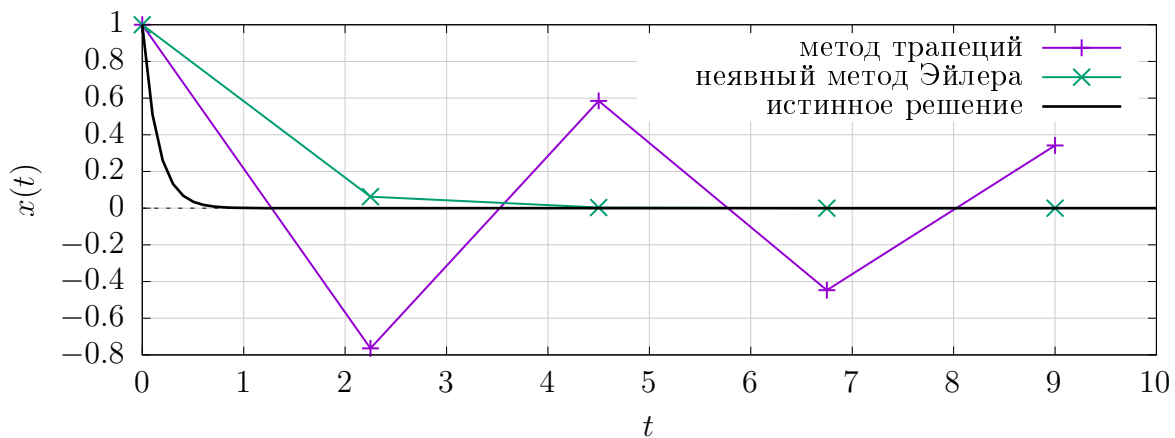


Рис. 2.2: Поведение простейших численных методов при решении одномерного уравнения Далквиста ($z = -15$)

Зачастую область устойчивости не A-устойчивых методов ограничена (в частности, это верно для всех явных линейных численных методов) или содержит лишь некоторый подсектор \mathbb{C}^- , поэтому ограничение на шаг интегрирования оказывается

ограничением сверху. Таким образом, спектральные свойства F_0 обуславливают максимально допустимый шаг численного интегрирования. Ситуацию осложняет следующая теорема, требующая в случае одностадийных схем делать выбор между устойчивостью и высоким порядком аппроксимации:

Теорема 2.12 (второй барьер Далквиста). *Не существует A -устойчивых линейных многостадийных схем с порядком аппроксимации выше второго.*

Ограничение на Δt может сохраняться даже при решении нелинейных задач вида (2.1). Рассмотрим случай, когда характерное время изменения $F = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}(t))$ много больше $\tau = 1/r(F)$ — характерного времени реакции системы на небольшие возмущения. В таком случае линеаризация (2.2) остаётся достаточно точной дольше характерного времени τ . Это автоматически оставляет в силе ограничения на шаг интегрирования, полученные для линейных систем. В частности, если $s(F) < 0$, но $\Delta t \cdot \sigma(F) \notin \mathbf{R}$, численное решение может вести себя неустойчиво к небольшим возмущениям, в то время как истинное решение, наоборот, будет обладать эффектом демпфирования.

Приведённые выше рассуждения показывают, что определённые системы дифференциальных уравнений могут обладать свойствами, вынуждающими использовать малый шаг интегрирования при их решении недостаточно устойчивыми в смысле 2.8 и 2.9 методами. Традиционно такие системы называются *жесткими*. Как указано в [14; 25], существует несколько определений жесткости, каждое из которых обладает своими достоинствами и недостатками. Одно из наиболее популярных определений звучит следующим образом:

Определение 2.13. Система вида $\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = f(t, \mathbf{x})$ называется жесткой в том случае, если для получения корректного численного решения необходимо использовать шаг интегрирования, много меньший характерных масштабов времени, на которых меняется истинное решение.

Данное определение слишком общее и не отвечает на вопросы о природе ограничения на шаг интегрирования. На основе всего вышеизложенного анализа мы дадим более узкое, но в некоторой степени и более информативное определение жесткости.

Определение 2.14. Система вида $\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = f(\mathbf{x})$ называется линейно жесткой в том случае, если характерное время (линейной) реакции системы на небольшие возмущения $\tau = 1/r(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}) = 1/r(F)$ много меньше характерных масштабов времени, на которых меняется истинное решение.

Для численных методов с ограниченной областью устойчивости условие $\Delta t \cdot \sigma(F) \subseteq \mathbf{R}$ влечет $\Delta t \sim \tau$. Тогда 2.14 оказывается частным случаем 2.13, причём необходимость выбора малого шага оказывается обусловленной «жестким» линейным поведением системы в окрестности истинных решений.

2.1.3 Методы Рунге-Кутты

Отдельно стоит упомянуть подкласс одношаговых многостадийных линейных численных схем — *методы Рунге-Кутты*. Строгое определение данных методов можно

найти в работах [14; 25]. Ограничимся лишь формальным их определением для автономных систем через *таблицы Бутчера*:

Определение 2.15. *Методом Рунге-Кутты с числом стадий s называется метод вида*

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \Delta t \cdot \sum_{i=1}^s b_i \cdot \mathbf{k}_i$$

$$\mathbf{k}_i = f \left(\mathbf{x}^n + \Delta t \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} \cdot \mathbf{k}_j \right),$$

где вектор $b = (b_i)$ и матрица $A = (a_{ij})$ образуют таблицу Бутчера:

$$\left[\begin{array}{c} A \\ b \end{array} \right] = \begin{array}{cccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,s} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,s} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ a_{s,1} & a_{s,2} & \cdots & a_{s,s} \\ \hline b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array}$$

Справедлива [25] следующая теорема:

Теорема 2.16. *Если метод Рунге-Кутты имеет порядок аппроксимации p , то*

$$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \dots + \frac{z^p}{p!} + \mathcal{O}(z^{p+1}) = e^z + \mathcal{O}(z^{p+1})$$

Утверждение 2.17. *Функцию устойчивости произвольного метода Рунге-Кутты можно найти по формуле*

$$R(z) = 1 + z \cdot b^T (I - z \cdot A)^{-1} e = \frac{\det(I - z \cdot A + z \cdot e b^T)}{\det(I - z \cdot A)},$$

где $e = (1, 1, \dots, 1)^T$.

Список литературы

1. A mathematical model to quantify the effects of platelet count, shear rate, and injury size on the initiation of blood coagulation under venous flow conditions / A. Bouchnita [и др.] // PloS one. — 2020. — Т. 15, № 7. — e0235392.
2. *Alexander R.* The modified Newton method in the solution of stiff ordinary differential equations // mathematics of computation. — 1991. — Т. 57, № 196. — С. 673—701.
3. *Anderson D. G.* Iterative procedures for nonlinear integral equations // Journal of the ACM (JACM). — 1965. — Т. 12, № 4. — С. 547—560.
4. *Armijo L.* Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives // Pacific Journal of mathematics. — 1966. — Т. 16, № 1. — С. 1—3.
5. *Auzinger W., Frank R.* Asymptotic error expansions for stiff equations: an analysis for the implicit midpoint and trapezoidal rules in the strongly stiff case // Numerische Mathematik. — 1989. — Т. 56, № 5. — С. 469—499.
6. *Auzinger W., Frank R., Kirlinger G.* Modern convergence theory for stiff initial-value problems // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 1993. — Т. 45, № 1/2. — С. 5—16.
7. *Auzinger W., Frank R., Kirlinger G.* A note on convergence concepts for stiff problems // Computing. — 1990. — Т. 44, № 3. — С. 197—208.
8. *Brown P. N., Hindmarsh A. C., Walker H. F.* Experiments with quasi-Newton methods in solving stiff ODE systems // SIAM journal on scientific and statistical computing. — 1985. — Т. 6, № 2. — С. 297—313.
9. *Brown P. N., Saad Y.* Convergence theory of nonlinear Newton–Krylov algorithms // SIAM Journal on Optimization. — 1994. — Т. 4, № 2. — С. 297—330.
10. Composing scalable nonlinear algebraic solvers / P. R. Brune [и др.] // siam REVIEW. — 2015. — Т. 57, № 4. — С. 535—565.
11. *Dahlquist G.* On stability and error analysis for stiff non-linear problems PART I : тех. отч. / CM-P00069396. — 1975.
12. *Dahlquist G. G.* A special stability problem for linear multistep methods // BIT Numerical Mathematics. — 1963. — Т. 3, № 1. — С. 27—43.
13. *Kantorovich L. V.* On Newton’s method // Trudy MIAN SSSR. — 1949. — Т. 28. — С. 104—144.
14. *Lambert J. D.* Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem. — 1-е изд. — Wiley, 1991. — ISBN 0471929905; 9780471929901.

15. *Liu M., Zhang L., Zhang C.* Study on Banded Implicit Runge–Kutta Methods for Solving Stiff Differential Equations // *Mathematical Problems in Engineering*. — 2019. — Т. 2019.
16. *Moore P. K., Petzold L. R.* A stepsize control strategy for stiff systems of ordinary differential equations // *Applied numerical mathematics*. — 1994. — Т. 15, № 4. — С. 449–463.
17. *Nesterov Y.* A method of solving a convex programming problem with convergence rate $\mathcal{O}(1/k^2)$ // *Dokl. akad. nauk Sssr*, т. 27. — 1983. — С. 543–547.
18. *Ortega J. M., Rheinboldt W. C.* Iterative solution of nonlinear equations in several variables. — SIAM, 2000.
19. *Parallel Finite Volume Computation on General Meshes* / Y. Vassilevski [и др.]. — Springer Nature, 2020.
20. *Schlenkrich S., Walther A., Griewank A.* Application of AD-based quasi-Newton methods to stiff ODEs // *Automatic Differentiation: Applications, Theory, and Implementations*. — Springer, 2006. — С. 89–98.
21. *Sorensen D. C.* Newton’s method with a model trust region modification // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. — 1982. — Т. 19, № 2. — С. 409–426.
22. *Takesaki M.* Theory of operator algebras 1. — Springer, 2001. — (Encyclopaedia of mathematical sciences, Operator algebras and non-commutative geometry 124-125, 127, 5-6, 8). — ISBN 354042248X; 9783540422488; 354042914X; 9783540429142; 9783540429135; 3540429131.
23. Threshold response of initiation of blood coagulation by tissue factor in patterned microfluidic capillaries is controlled by shear rate / F. Shen [и др.] // *Arteriosclerosis, thrombosis, and vascular biology*. — 2008. — Т. 28, № 11. — С. 2035–2041.
24. *Wolfe P.* Convergence conditions for ascent methods // *SIAM review*. — 1969. — Т. 11, № 2. — С. 226–235.
25. *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений: жёсткие и дифференциально-алгебраические задачи / пер. Е. Л. Старостиной [и др.]. — 2-е изд. — Мир, 1999.