Одношаговые алгоритмы численного интегрирования

Неявные методы Рунге-Кутты

Жесткие задачи. Понятия А-устойчивости и L-устойчивости

С самого начала применения численных методов обнаружилось, что с их помощью не всегда удается получить решение дифференциальных уравнений: иногда эти методы давали расходящийся процесс, хотя точные решения уравнений были заведомо сходящимися. Ч. Кёртисс и Дж. Хиршфельдер в знаменитой работе «Интегрирование жестких уравнений» [1] 1952 года ввели понятие жесткости для таких дифференциальных уравнений (в дальнейшем предлагались иные математические формулировки этого термина; общепризнанного определения до сих пор нет). Жесткими могут быть уравнения, описывающие образование свободных радикалов в сложной химической реакции (пример Кертисса и Хиршфельдера $\dot{x} = 5(x - t^2)$, «брюсселлятор»), диффузию, колебаний упругого стержня и др. Динамическая система, описываемая жесткими уравнениями, также называется жесткой. Свойства жесткости и метода, пригодного для решения жестких уравнений, наглядно демонстрирует оригинальная иллюстрация из статьи Кертисса и Хиршфельдера (рис. 2.7). Здесь $Y(x)$ – истинное решение уравнения; непригодный для жестких систем метод приводит к уклонению приближенного решения от истинного и уходу его в плюс или минус бесконечность в зависимости от константы итегрирования C. Пригодный для жестких систем метод дает сходящееся к $Y(x)$ решение (пунктирная линия) независимо от того, из какой точки (y_0, x_0) он стартует.

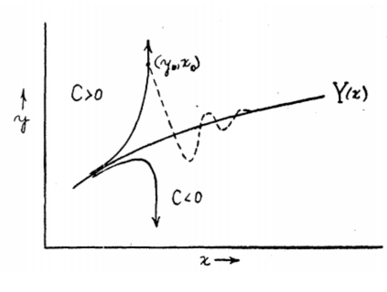

Рис. 2.7 – Свойства метода, пригодного для решения жестких систем.

Хайрер, Нерсетт и Ваннер [3] объясняют явление жесткости на примере задачи

$$\dot{x} = -50(x - \cos t)\,, \quad (2.32)$$

графики решения которого представлены на рис. 2.8. Вблизи $x \approx \cos t$ имеется медленно изменяющееся решение, а другие решения подходят к нему после быстрой «переходной фазы». Такие быстрые переходы типичны для жестких уравнений, но не являются ни достаточным, ни необходимым их признаком: так, у решения с начальным значением $x(0) = 2500/2501$ нет переходной фазы. На рис. 2.8 справа приведен график решения методом Эйлера для начального значения $x(0) = 0$ и длин шагов $h = 1{,}974/50$ и $h = 1{,}875/50$. Как только длина шага становится немного больше критической величины, численное решение уходит слишком далеко за равновесное, и возникают все более сильные колебания, отсутствующие в точном решении уравнения.

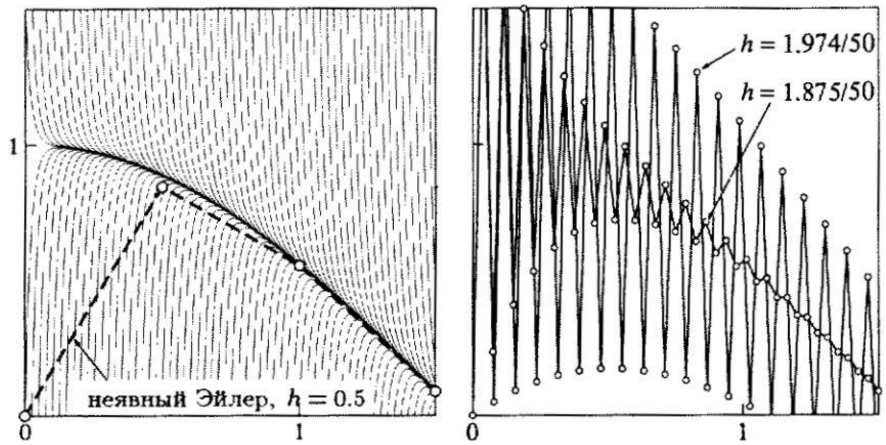

Рис. 2.8 – Кривые решения уравнения (2.32) [1]

Первоначально понятие жестких уравнений вызывало скепсис, так как считалось, что это очень частный случай, однако, по словам Г. Далквиста, «около 1960 года положение изменилось и все осознали, что мир полон жестких задач» [2].

Исследование свойств методов, пригодных для решения жестких уравнений, привело к возникновению понятия абсолютной устойчивости, или A-устойчивости (введено Г. Далквистом в 1963 г.). Метод называется A-устойчивым, если для любых собственных чисел λ, у которых $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$, и любого шага интегрирования при решении линеаризованного уравнения

$$\dot{x} = \lambda x \quad (2.33)$$

он дает сходящееся решение [3]. Было выдвинуто предположение, что методы, пригодные для решения жестких систем, должны быть *A*-устойчивыми.

При исследовании одношагового метода на предмет *A*-устойчивости его применяют к задаче (2.33) и приводят к виду

$$x_{n+1} = R(z)x_n, \quad z = h\lambda. \qquad (2.34)$$

Затем на комплексной плоскости $z \in C$ строятся области, где $|R(z)| < 1$. Если вся левая часть комплексной плоскости попадает в область устойчивости, то метод является *A*-устойчивым.

Произвольный метод Рунге-Кутты имеет функцию устойчивости

$$R(z) = \frac{\det(I - zA + z\mathbf{1}b^{\mathrm{T}})}{\det(I - zA)}, \quad (2.35)$$

где $\mathbf{1} = (1 \quad \ldots \quad 1)^{\mathrm{T}}$ $b^{\mathrm{T}} = (b_1 \quad \ldots \quad b_s)$. Используя выражение (2.35), построим области устойчивости для неявных методов Рунге-Кутты: неявного метода Эйлера (рис. 2.9(a)), неявной средней точки и трапеций (рис. 2.9.(b)), Lobatto IIIC второго порядка (рис. 2.9(c)), Lobatto IIIC 4-го порядка (рис. 2.9(d)), Radau IA 3 порядка (рис. 2.9(e)), Гаусса-Лежандра 5 порядка (рис. 2.9(f)).

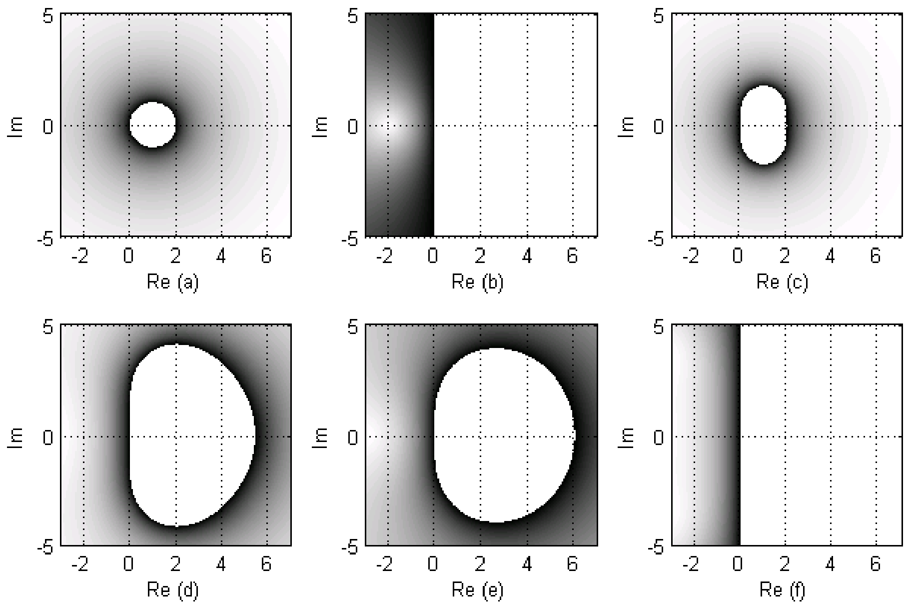

Рис. 2.9 – Области устойчивости неявных методов Рунге-Кутты

Опыт показал, что многие A-устойчивые методы на практике все равно не всегда пригодны. Если область устойчивости метода полностью совпадает с левой комплексной полуплоскостью, то из свойств рациональной функции следует $|R(z)|_{z\to-\infty} \to 1$. А это означает, что при очень большой по модулю отрицательной вещественной части собственных чисел уравнения метод с такой функцией устойчивости будет очень плохо сходиться. Обратимся снова к примеру Хайрера, Нерсетта и Ваннера:

$$\dot{x} = -2000(x - \cos t),\ x(0) = 0. \qquad (2.36)$$

Сравним A-устойчивые методы – метод трапеций и неявный метод Эйлера – на задаче (2.36). На рис. 2.10 для метода трапеций мы наблюдаем картину, сходную с картиной на рис. 2.8 для явного метода Эйлера.

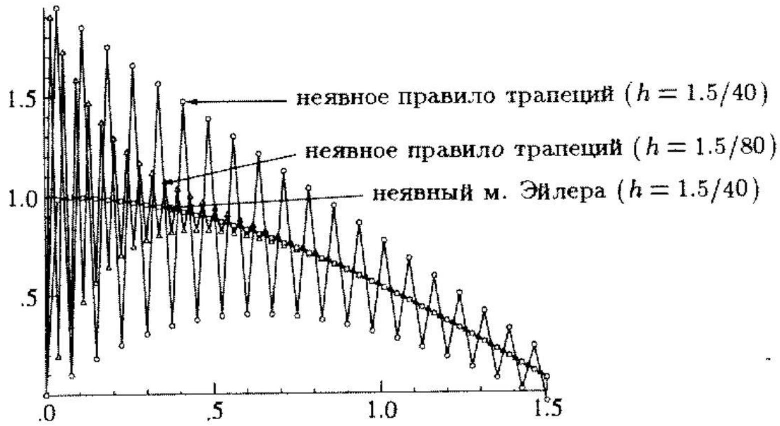

Рис. 2.10

Свойство, которым не обладает метод трапеций, и которое позволяет неявному методу Эйлера быстро сходиться, было названо L-устойчивостью. Метод называется L-устойчивым, если он A-устойчив и

$$\lim_{z\to-\infty} |R(z)| = 0$$

Кроме того, существует множество методов, не являющихся A-устойчивыми, но практически пригодными для решения жестких задач. Те же методы ФДН, впервые рассмотренные Кертиссом и Хиршфельдером, для высоких порядков имеют область устойчивости, не покрывающие всю комплексную полуплоскость. Тем не менее, они отлично справляются с уравнениями (2.32), (2.33) и многими другими; более того, Хайрер и др.

интерпретируют само понятие жесткости так: «жесткие уравнения — это уравнения, для которых определенные неявные методы, в частности ФДН, дают лучший результат, обычно несравненно более хороший, чем явные методы».

Введем понятие $A(\alpha)$-устойчивости. Метод называется $A(\alpha)$- устойчивым, если сектор $S_\alpha = \{z; |\arg(-z)| \le \alpha, z \ne 0\}$ содержится в области устойчивости (рис. 2.11).

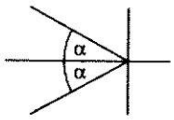

Рис. 2.11

Методы ФДН (см. главу 3) при $k = 1...6$ являются $A(\alpha)$-устойчивыми.

ЛИТЕРАТУРА

1) Curtiss C.F., Hirschfelder J.O., Integration of stiff equations // Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 1952, T.38, №3, C. 235–243

2) Dahlquist G. G. A special stability problem for linear multistep methods // BIT Num. Math. 1963, p. 27–43. C. 35.

3) Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, 1987.