Известия Челябинского научного центра, вып. 2, 2001

МАТЕМАТИКА

УДК 519.622

ДИАГОНАЛЬНО НЕЯВНЫЕ МЕТОДЫ РУНГЕ-КУТТЫ

Н. В. ШИРОБОКОВ

e-mail: snv@susu.ac.ru

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Статья поступила в редакцию 12 марта 2001 года

Явные схемы высокой точности по временной переменной в задачах математической физики давно известны, например, явная схема третьего порядка Рунге-Кутты-Русанова [1]. По причине жесткого ограничения на шаг интегрирования по требованиям устойчивости они не имеют широкого распространения в вычислительной практике. В связи с этим возникает привлекательность идеи построения неявных методов высокого порядка точности, которые могут применяться с большим временным шагом.

Численные методы решения жестких задач, разработанные для обыкновенных дифференциальных уравнений, не нашли широкого применения при решении уравнений в частных производных [2, с.187], [3, предисловие редактора перевода]. В [4, с.416] это объясняется тем, что в задачах математической физики пространственная дискретизация должна быть хорошей не только в области аппроксимации, но и на краю спектра характеристических показателей, показатель "жесткости" системы, при этом, оказывается невеликим. По этой причине абсолютно устойчивые методы для жестких систем, рассчитанные на отличие спектра в области аппроксимации и на краю спектра в несколько десятичных порядков, оказываются не эффективными даже по сравнению с обычными конечно-разностными методами.

В работе построены диагонально неявные методы Рунге-Кутты до четвертого порядка, которые не обязательно являются абсолютно устойчивыми, однако успешно справляющимися с решением задач диффузии-конвекции.

1. Основные определения

Применительно к обыкновенному дифференциальному уравнению в конечномерном евклидовом пространстве

$$\dot{y}= f(t, y) \tag{1}$$

однократно диагонально неявные s - стадийные методы Рунге-Кутты [2, 3] описываются формулами:

$$y_{n+1} = y_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i f\left(t_n^i, Y_i\right), \tag{2}$$

где

$$t_n^i = t_n + c_i\tau; \quad Y_i = y_n + \tau \sum_{j=1}^{i} a_{ij} f\left(t_n^j, Y_j\right); \quad a_{ii} = const = g, \tag{3}$$

y_n представляет собой приближение точного решения $y(t)$ уравнения (1) при $t = t_n$; $\tau = t_{n+1} - t_n$; Y_i можно считать аппроксимацией $y(t)$ в промежуточной точке $t = t_n^i$. Выбор констант b_i (веса метода), c_i (абсциссы метода), a_{ij} (матрица метода) определяет конкретный метод. В дальнейшем предполагается, что веса и абсциссы метода расположены на отрезке $[0; 1]$, причем $c_i \neq c_j$ при

$i \neq j$. Это нужно сделать для возможности применения метода к решению задач математической физики, например, при интерпретации граничных условий.

Метод Рунге-Кутты имеет порядок аппроксимации p, если p – наибольшее натуральное число, для которого выполняется условие

$$y\left(t_{n+1}\right) - \hat{y}_{n+1} = O\left(\tau^{p+1}\right) \quad \text{при} \quad \tau \to 0,$$

где $y(t)$ - любое решение (1), дифференцируемое достаточное число раз, $\hat{y}_{n+1}$ вычисляется по формулам (2), (3), в которых вместо y_n принимается $y\left(t_n\right)$.

Наложим на коэффициенты метода Рунге-Кутты условия:

$$\sum_{i=1}^{s} b_i = 1, \quad \sum_{j=1}^{i} a_{ij} = c_i (i = 1, ..., s), \quad \sum_{i=1}^{s} b_i c_i = \frac{1}{2}, \tag{4}$$

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{i=1}^{s} b_i \sum_{j=1}^{i} a_{ij} c_j = \frac{1}{6}, \tag{5}$$

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^3 = \frac{1}{4}, \quad \sum_{i=1}^{s} b_i c_i \sum_{j=1}^{i} a_{ij} c_j = \frac{1}{8}, \quad \sum_{i=1}^{s} b_i \sum_{j=1}^{i} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \sum_{i=1}^{s} b_i \sum_{j=1}^{i} a_{ij} \sum_{k=1}^{j} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}. \tag{6}$$

Условия (4) при необходимом количестве производных правой части (1) являются достаточными, чтобы метод Рунге-Кутта имел бы 2-й порядок аппроксимации, условия (4), (5) - 3-й порядок, условия (4), (5), (6) - 4-й порядок (см., например, [2, с.130-137]).

Функцией устойчивости метода (2), (3) называется

$$R(z) = \frac{\det(E - zA + zeb)}{\det(E - zA)}, \tag{7}$$

где E – единичная матрица; e – вектор-столбец, состоящий из s единиц; b – вектор-строка, состоящая из весов ; A – матрица коэффициентов a_{ij}. Вещественной областью устойчивости называется множество тех вещественных z при которых $|R(z)| \leq 1$. Абсолютно устойчивые методы содержат в своей области устойчивости полуинтервал $(-\infty; 0]$.

Задача Коши для дифференциального уравнения (1) называется жесткой, если у линеаризованной системы характеристические показатели можно разбить на две группы: близкие к нулю и малые отрицательные. Идея методов решения жестких задач такова, что в процессе счета по времени обеспечивается хорошая точность воспроизведения близких к нулю характеристических показателей, малые же отрицательные показатели сильно искажаются, но при этом обеспечивается устойчивость счета. В связи с этим, параметры неявных методов Рунге-Кутта [3] выбирались из условия абсолютной устойчивости метода и наивысшего порядка аппроксимации. Численные расчеты уравнения Бюргерса (см. ниже) показали их малую эффективность в смысле увеличения шагов по времени и по пространству. Мы предлагаем другой способ выбора параметров методов Рунге-Кутта, который основан на том, чтобы метод обладал бы достаточно большим интервалом устойчивости и имел бы хорошие аппроксимационные свойства.

2. Выбор диагональных элементов оптимальных методов

На множестве всех методов вида (2), (3) при фиксированном отрицательном числе z_0 рассмотрим функционал

$$J = \max_{z \in [z_0; 0]} |R(z) - \exp(z)|. \tag{8}$$

Определение. *s-стадийный численный метод (2),(3) называется (M, z_0)-оптимальным, если среди всех методов Рунге-Кутта вида (2),(3), имеющих порядок аппроксимации s и содержащих интервал сходимости (-M;0], он доставляет минимум функционалу (8).*

Теорема. *Если $s \leq 4$,то функция устойчивости (7) зависит только от одного параметра метода (2),(3), например, от диагонали метода g.*

Доказательство. При $s = 2, 3$ утверждение теоремы получается прямым вычислением функции устойчивости. При $s = 4$, из первого и третьего уравнений (4), первого уравнения (5), первого уравнения (6) выражаем веса метода через абсциссы. Учитывая второе уравнение (4), оставшиеся четыре уравнения (5) и (6) представим в виде системы относительно неизвестных $c_2, a_{31}, a_{41}, a_{42}$. Методами пакета символьных вычислений Maple5 находим явное выражение указанных неизвестных через g, c_3. Эти выражения имеют довольно громоздкий вид, поэтому здесь не приводятся. Средствами Maple5 перевычисляем веса и находим функцию устойчивости, которая будет зависеть только от параметра g.

Таким образом, функция устойчивости для методов порядка не выше четвертого является функцией двух переменных: $R = R(g, z)$. Поиск оптимальных методов сводится к нахождению параметра $g \in [0; 1]$, доставляющего минимум функционалу (8) с ограничением: вещественные корни уравнения $|R(g, z)| = 1$ должны лежать вне заданного интервала $[-M; 0]$.

Поставленная задача решалась численно перебором значений параметра g с шагом $\Delta g = 0.005$. При некоторых значениях z_0 и M результаты вычислений приведены в табл. 1, где первое число означает значение параметра g для метода второго порядка аппроксимации, второе - для метода третьего порядка, третье - для метода четвертого порядка. par

Таблица 1. Значения параметра g оптимальных методов

	M=-10	M=-50
z_0=-0.5	0.215; 0.13; 0.175	0.86; 0.135; 0.4
z_0=-1	0.22; 0.32; 0.18	0.925; 0.32; 0.41
z_0=-2	0.23; 0.135; 0.185	0.24; 0.335; 0.43

По заданному оптимальному g выбор остальных параметров метода осуществляется с большой долей неопределенности. Их выбор производился так, чтобы абсциссы и веса лежали бы на отрезке [0;1], правая абсцисса желательно равнялась бы 1, один из элементов матрицы метода равнялся бы 0. Эти параметры приведены в табл. 2, 3 и 4, где звездочкой помечены номера абсолютно устойчивых методов.

Таблица 2. Параметры оптимальных методов второго порядка

N	1	2	3	4^*	5^*	6^*
c_1	0.215	0.22	0.23	0.86	0.925	0.24
c_2	1	1	1	0.5	0.5	1
b_1	100/157	25/39	50/77	0	0	25/38
$a_{11} = a_{22} = c_1, a_{21} = c_2 - a_{22}, b_2 = 1 - b_1$						

Таблица 3. Параметры оптимальных методов третьего порядка

N	1	2	3	4	5^*
c_1	0.13	0.32	0.135	0.315	0.335
c_2	0.39537712	0.03794340	0.62242787	0.04968229	0.01383535
c_3	1	0.96	1	0.95	0.95
b_1	0.13436482	0.71579551	0.34283363	0.70816678	0.68571954
b_2	0.63362240	0.00205071	0.53883454	0.00033488	0.03021101
$a_{11} = a_{22} = a_{33} = c_1, a_{21} = c_2 - a_{22}, b_3 = 1 - b_1 - b_2$					

Таблица 4. Значения параметров оптимальных методов четвертого порядка

N	1	2	3	4^*	5^*	6^*
c_1	0.175	0.18	0.185	0.4	0.41	0.43
c_2	0.6986220	0.7162694	0.7325557	0.0923076	0.0715218	0.0395804
c_3	0.5224132	0.5424980	0.5689612	0.6130177	0.6199390	0.6148197
b_1	0.4151973	0.4254950	0.4366128	0.1507330	0.2323312	0.3298338
b_2	0.4606346	0.4440867	0.4300243	0.2551112	0.2249153	0.1918582
b_3	0.0390234	0.0548479	0.0676342	0.4599634	0.4054497	0.3316117
a_{31}	0.4861769	0.5210319	0.5648495	0	0	0
a_{41}	-0.024452	-0.046234	-0.080130	2.953268	2.895067	3.029910
a_{42}	0	0	0	-0.344663	-0.265902	-0.144441
$a_{11} = a_{22} = a_{33} = a_{44} = c_1, a_{21} = c_2 - a_{22}$ $a_{32} = c_3 - a_{31} - a_{33}, a_{43} = c_4 - a_{41} - a_{42} - a_{44}, b_4 = 1 - b_1 - b_2 - b_3$						

3. Тестовые расчеты для уравнения Бюргерса

В качестве тестового примера рассмотрим задачу из [5]: уравнение Бюргерса

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u \frac{\partial u}{\partial x} \quad (\nu > 0) \tag{9}$$

с точным решением

$$u(x,t) = \frac{1}{1 + exp\left(\frac{2x\nu - t}{4\nu}\right)}. \tag{10}$$

В численных расчетах принимаем граничные условия $u(x,0)$, $u(0,t)$, $u(1,t)$, $(0 \le x \le 1, \quad 0 \le t \le 1)$, согласованные с точным решением (10). При $\Delta x = 1/m(m = const), x_k = k\Delta x$, введем обозначения:

$$D^2 u_k = \left(u(x_{k-1},t) - 2u(x_k,t) + u(x_{k+1},t)\right)/(\Delta x)^2,$$

$$\Delta^0 u_k = \left(u(x_{k+1},t) - u(x_{k-1},t)\right)/(2\Delta x).$$

Замена производных по переменной x в (9) на их конечно-разностные аппроксимации приводит к непрерывной по времени полудискретной задаче

$$\frac{du_k}{dt} = \nu D^2 u_k - u_k \Delta^0 u_k \quad (k = 1, ..., m-1) \tag{11}$$

с заданными u_0, u_m и $u_k(0)$. Ясно, что (11) представляет собой обыкновенное дифференциальное уравнение в $m-1$ мерном евклидовом пространстве и метод Рунге-Кутты, примененный к нему, запишется в виде (2), (3), если под y понимать вектор с координатами u_k. Для определения Y_i требуется решить краевую задачу

$$Y_{i,k} = u_k(t_n) + \tau \sum_{j=1}^{i} a_{ij} \left(\nu D^2 Y_{i,k} - Y_{i,k}\Delta^0 Y_{i,k}\right), \tag{12}$$

$$Y_{i,0} = u\left(x_0, t_i\right), \quad Y_{i,m+1} = u\left(x_m, t_i\right) \quad (k = 1, ..., m).$$

Уравнение (12) нелинейное, поэтому для его решения применяется метод Ньютона.

Оптимальные методы Рунге-Кутты будем обозначать как "Порядок k N n", где k - метод с параметрами таблицы k $(2 \le k \le 4)$, n - номер столбца соответствующей таблицы. Эти методы будем сравнивать с известными: неявным методом Эйлера (обозначение "Эйлер"), методом Кранка-Николсона, методом Нёрсетта 2-го порядка [3, формула (3.5.1)], методом Барриджа 3-го порядка [3, формула (3.5.3)].

Результаты расчетов при $\nu = 0.01$ и $\nu = 0.005$ показывают, что: 1)предлагаемые оптимальные методы лучше методов Нёрсетта и Барриджа; 2)неявные методы Эйлера и Кранка-Николсона имеют плохую аппроксимацию по сравнению с предложенными методами; 3)при увеличении пространственного шага Δx) лучше использовать методы с ограниченной областью устойчивости, чем абсолютно устойчивые методы.

Таблица 5. Решение уравнения Бюргерса при $\nu = 0.01, t = 1; \Delta t = 0.1$

	$\Delta x = 1/40$			$\Delta x = 1/160$			
x	Эйлер	Кранк-Николсон	Порядок 2 N 1	Нерсетт	Барридж	Порядок 3 N 5	Точное решение
0.2	0.9994	0.9940	1.0000	1.0007	1.0002	1.0001	1.0000
0.4	0.9229	1.0915	0.9932	1.0292	1.0216	0.9967	0.9933
0.6	0.1065	0.0125	0.0071	0.0117	0.0110	0.0077	0.0067
0.8	0.0006	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

При $\nu = 0.1$ или $\nu = 1$ дифференциальная задача становится типично жесткой и для ее решения более пригодны абсолютно устойчивые методы, хотя при больших Δt и Δx все методы решают задачу примерно одинаково за исключением неявного метода Эйлера.

При $\nu = 0.001$ решение дифференциальной задачи резко убывает от 1 до 0 в малых окрестностях некоторых точек оси x и поэтому необходимо применять малый пространственный шаг: $\Delta x \leq 1/350$. Наилучшие результаты имеют метод четвертого порядка: при $\Delta t = 1/50$ очень точно решают задачу не абсолютно устойчивые методы N 1 – N 3, а методы N 4 – N 6 дают плохие результаты, хотя они являются абсолютно устойчивыми. Это объясняется увеличением роли конвективной составляющей задачи и уменьшением жесткости задачи.

Заключение

Построены эффективные методы решения эволюционных задач математической физики, которые найдут применение в гидродинамике для расчета плоских и пространственных течений жидкости с большими числами Рейнольдса. Интересно найти точное решение поставленной задачи оптимального нахождения параметров численных методов.

Список литературы

1. Русанов В.В. – Разностные схемы третьего порядка точности для сквозного расчета разрывных решений// *Докл. АН СССР.* 1968. Т. 180. N 6. С. 1303-1305.

2. *Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений*// Под ред. Дж.Холла и Дж.Уатта. М.: Мир, 1979. – 312 с.

3. Деккер К., Вервер Я. *Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений* М.: Мир, 1988. – 332 с.

4. Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. *Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике* // М.: Наука, 1978. – 688 с.

5. Лебедев В.И. – Как решать явными методами жесткие системы дифференциальных уравнений// *Вычислительные процессы и системы.* 1991. вып. 8. С. 237-291.