МАТЕМАТИКА

УДК 519.622

ДИАГОНАЛЬНЫЕ НЕОДНОКРАТНО НЕЯВНЫЕ МЕТОДЫ РУНГЕ–КУТТЫ

Н.В. Широбоков
e–mail: snv@susu.ac.ru

Южно–Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Статья поступила 31 января 2001 г.

В статье приведены обобщения результатов автора [1], только здесь рассматриваются непостоянные диагональные элементы матрицы методов Рунге–Кутты.

1. Основные определения

Коэффициенты диагонального неоднократно неявного s–стадийного метода Рунге–Кутты представим в табличном виде:

$$\begin{array}{c|c|} c^{\mathrm{T}} & A \\ \hline & b \end{array}\,,$$

где матрица метода $A=(a_{ij})$ — нижне–треугольная; $b=(b_1,\ ...,\ b_s)$ — веса метода; $c=(c_1,\ ...,\ c_s)$ — абсциссы метода. В дальнейшем предполагается, что веса и абсциссы метода расположены на отрезке $[0;\ 1]$, причем $c_i \neq c_j$ при $i \neq j$.

Наложим на коэффициенты метода Рунге–Кутты условия:

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

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

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

Условия (1) при необходимом количестве производных правой части дифференциального уравнения являются достаточными, чтобы метод Рунге–Кутта имел бы 2–й порядок аппроксимации, условия (1), (2) — 3–й порядок, условия (1), (2), (3) — 4–й порядок [2, с. 130—137].

Функцией устойчивости метода называется

$$R(z) = \frac{\det\left(E - zA + zeb\right)}{\det\left(E - zA\right)}, \tag{4}$$

где E — единичная матрица; e — вектор–столбец, состоящий из s единиц. Вещественной областью устойчивости называется множество тех вещественных z, при которых $R(z) \le 1$. Абсолютно устойчивые методы содержат в своей области устойчивости полуинтервал $(-\infty;\ 0]$.

2. Оптимальные методы

На множестве всех s–стадийных диагональных методов вида при фиксированном отрицательном числе Z рассмотрим функционал

$$J = \max_{z\in[Z;\ 0]} \left| R(z) - \exp(z) \right|, \qquad (5)$$

Определение. Диагональный s–стадийный численный метод называется Z–оптимальным, если он доставляет минимум функционалу (5) среди всех диагональных методов с порядком аппроксимации s.

Теорема. Если $s \le 3$, то функция устойчивости (4) зависит только от диагональных элементов матрицы метода.

Доказательство. Диагональные элементы матрицы метода обозначим через $g_i = a_{ii}$. При $s = 2$ условия (1) записываются в виде:

$$b_1 + b_2 = 1,\quad a_{11} = c_1,\quad a_{21} + a_{22} = c_2,\quad b_1c_1 + b_2c_2 = \frac{1}{2}.$$

Подставив полученные значения и $a_{21} = c_2 - g_2$ в функцию устойчивости (4), получаем

$$R(z) = \frac{\left(g_1g_2 - g_1 - g_2 + \frac{1}{2}\right)z^2 + (1 - g_1 - g_2)z + 1}{(1 - g_1z)(1 - g_2z)}.$$

При $s = 3$ из первого, третьего уравнений в (1) и первого уравнения в (2) выражаем веса метода через абсциссы метода. Подставляя найденные веса во второе уравнение (2) с заменой $a_{21} = c_2 - g_2$, $a_{32} = c_3 - g_3 - a_{31}$ (которые вытекают из второго уравнения в (1)), выражаем коэффициент a_{31} через абсциссы метода и диагональные элементы матрицы метода. Эту громоздкую операцию легче всего осуществить с использованием пакета символьных вычислений MAPLE или MATHEMATICA. Эти же пакеты помогут вычислить функцию устойчивости (4):

$$R(z) = \frac{\left(-g_1g_2g_3 + g_1g_2 + g_1g_3 + g_2g_3 - \frac{1}{2}(g_1 + g_2 + g_3) + \frac{1}{6}\right)z^3}{(1 - g_1z)(1 - g_2z)(1 - g_3z)} +$$

$$+ \frac{\left(g_1g_2 + g_1g_3 + g_2g_3 - g_1 - g_2 - g_3 + \frac{1}{2}\right)z^2 + (-g_1 - g_2 - g_3 + 1)z + 1}{(1 - g_1z)(1 - g_2z)(1 - g_3z)},$$

т. е. функция устойчивости зависит только от диагональных элементов матрицы метода.

При $s = 4$ нам не удалось получить доказательства аналогичной теоремы. Можно подтвердить ее верность при некоторых фиксированных значениях последней абсциссы метода. Фиксируя, например, $c_4 = 1$ (это важно для приложений к задачам математической физики), из первого и третьего уравнений (1), первого уравнения (2), первого уравнения (3) выражаем веса метода через абсциссы. Учитывая второе уравнение (1), оставшиеся четыре уравнения (2) и (3) представим в виде системы относительно неизвестных c_2, a_{31}, a_{41}, a_{42}. Методами пакета символьных вычислений MAPLE находим явное выражение указанных неизвестных через g_1, g_2, g_3, g_4, c_3. Эти выражения имеют довольно громоздкий вид, поэтому здесь не приводятся. Средствами MAPLE перевычисляем веса и находим функцию устойчивости, которая будет зависеть только от диагональных элементов матрицы метода:

$$R(z)=\Big(\ (g_1g_2g_3g_4-g_1g_2g_3-g_1g_2g_4-g_1g_3g_4-g_2g_3g_4+(g_1g_2+g_1g_3+g_1g_4+g_2g_3+g_2g_4+g_3g_4)/2-$$
$$-(g_1+g_2+g_3+g_4)/6+1/24)z^4+(-g_1g_2g_3-g_1g_2g_4-g_1g_3g_4-g_2g_3g_4+g_1g_2+g_1g_3+g_1g_4+g_2g_3+$$
$$+g_2g_4+g_3g_4-(g_1+g_2+g_3+g_4)/2+1/6)z^3+(g_1g_2+g_1g_3+g_1g_4+g_2g_3+g_2g_4+g_3g_4-g_1-$$
$$-g_2-g_3-g_4+1/2)z^2+(-g_1-g_2-g_3-g_4+1)z+1\Big)\Big/\big((1-g_1z)(1-g_2z)(1-g_3z)(1-g_4z)\big).$$

Таким образом, поиск оптимальных методов не выше четвертого порядка сводится к нахождению параметров $g_i \in [0;\ 1]$, доставляющих минимум функционалу (5). Параметры g_i можно найти с заданной степенью точности (при $s=2$ точность 0,0001; при $s=3$ — 0,001; при $s=4$ — 0,01).

Для $Z=-1$ оптимальными методами являются:

a) $s=2$, Метод 2

0,2176	0,2176	0
1	0,7757	0,2243
	0,6390593047	0,3609406953

b) $s=3$, Метод 3

0,124	0,124	0	0
0,5	0,37	0,13	0
1	0,1048012766	0,7541987234	0,141
	0,2530036594	0,5567375887	0,1902587519

c) $s=4$, Метод 4

0,05	0,05	0	0	0
0,2643835616	0,1643835616	0,1	0	0
0,6666666667	–0,02404780168	0,5907144684	0,1	0
1	0,4995406888	–0,2646519541	0,6551112653	0,11
	0,1296739820	0,3064931964	0,4540448508	0,1097879709

Заметим, что для Метода 2 интервал устойчивости содержит интервал $[-17;\ 0]$, для Метода 3 — $[-12;\ 0]$, для Метода 4 — $[-11;\ 0]$. При численном решении задач математической физики столь малые интервалы устойчивости оказываются недостаточными для устойчивости счета. Если искать оптимальные методы среди методов, содержащих интервал устойчивости $[-100;\ 0]$, то ими будут:

a) $s=2$, Метод 2–100

0,9206	0,9206	0
0,5	–0,4293	0,9293
	0	1

b) $s=3$, Метод 3–100

0,312	0,312	0	0
0,5	0,172	0,328	0
1	1,797090383	–1,127090383	0,33
	0,6442767607	0,1134751773	0,2422480620

c) $s = 4$, Метод 4–100

0,38	0,38	0	0	0
0,09021201413	–0,3197879859	0,41	0	0
0,6666666667	–0,0753716856	0,3220383523	0,42	0
1	3,007516785	–0,6492387213	–1,798278064	0,44
	0,2474021139	0,2339492980	0,4012992863	0,1173493018

Отметим, что Метод 3–100 содержит интервал стабильности $[-109;\ 0]$, другие же методы являются абсолютно устойчивыми.

3. Численные результаты

Для тестирования предложенных методов рассматривалось уравнение Бюргерса:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u\frac{\partial u}{\partial x} \quad \left(v = \mathrm{const} > 0,\quad 0 \le x \le 1,\quad 0 \le t \le 1\right)$$

с заданным точным решением, имитирующим фронт ударной волны [3]:

$$u(x,\ t) = \frac{1}{1 + \exp\left(\dfrac{2xv - t}{4v}\right)}.$$

Для решения уравнения применим метод прямых, который приведет к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (подробности см. в работе [1]). Оптимальные методы сравнивались с абсолютно устойчивыми неявными методами: Эйлера (Euler), Кранка–Николсона (Crank), Нерсетта (Norsett) [4, (3.5.1)] и Барриджа (Barrage) [4, (3.5.3)]. Результаты расчетов приведены в таблице "Погрешность e_2". Здесь квадратичная ошибка численных расчетов определяется известной формулой:

$$e_2 = \sqrt{\Delta x \sum_{k=1}^{m} \left(u\left(x_k,\ 1\right) - u_k\right)^2},$$

где $u(x_k,\ 1)$ и u_k — соответственно точное и приближенное значение решения в момент времени $t = 1$ в расчетных точках x_k переменной x.

Погрешность e_2

Название метода	$v = 0{,}01$ $\Delta t = 1/10$ $\Delta x = 1/50$	$v = 0{,}005$ $\Delta t = 1/20$ $\Delta x = 1/100$	$v = 0{,}001$ $\Delta t = 1/100$ $\Delta x = 1/500$	$v = 0{,}001$ $\Delta t = 1/50$ $\Delta x = 1/500$	$v = 0{,}001$ $\Delta t = 1/100$ $\Delta x = 1/400$	$v = 0{,}001$ $\Delta t = 1/50$ $\Delta x = 1/400$
Euler	0,0098	0,0050	0,0010	0,0017	0,0011	0,0019
Crank	0,0049	0,0024	0,0005	0,0014	0,0007	0,0016
Norsett	0,0048	0,0024	0,0005	0,0014	0,0006	0,0016
Barrage	0,0037	0,0018	0,0004	0,0009	0,0005	0,0010
Метод 2	0,0016	0,0008	0,0002	∞	0,0003	0,0035
Метод 2–100	0,0032	0,0016	0,0003	0,0008	0,0005	0,0010
Метод 3	0,0015	0,0007	0,0001	∞	0,0003	∞
Метод 3–100	0,0019	0,0009	0,0002	0,0006	0,0003	0,0008
Метод 4	0,0017	0,0009	0,0002	∞	0,0003	∞
Метод 4–100	0,0019	0,0009	0,0002	0,0005	0,0003	0,0007

Для хорошей аппроксимации по пространственной переменной x шаг Δx выбирался так, чтобы сеточное число Рейнольдса $u\Delta x/\nu$ равнялось бы 2 (кроме последних двух столбцов таблицы). Оказывается, что устойчивость счета по временной переменной t достигается при относительно большом шаге Δx, что объясняется выбором неявных методов. Наилучшие результаты достигаются предложенными в настоящей статье оптимальными методами, несмотря на то, что некоторые методы не являются абсолютно устойчивыми.

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. Выяснено, что важную роль в неявных конечно–разностных методах играет выбор сеточного числа Рейнольдса.

Список литературы

1. Широбоков Н.В. Диагонально неявные методы Рунге–Кутты // Известия Челябинского научного центра. — 2001. — Вып. 2. — С. 3—7.
2. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла, Дж. Уатта. — М.: Мир — 1979. — 312 с.
3. Лебедев В.И. Как решать явными методами жесткие системы дифференциальных уравнений // Вычислительные процессы и системы. — 1991. — Вып. 8. — С. 237—291.
4. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге–Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. — М.: Мир, 1988. — 332 с.