УДК 519.622

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ АДДИТИВНЫХ НЕАВТОНОМНЫХ ЖЕСТКИХ ЗАДАЧ

Е. А. Новиков[1]

Построен аддитивный метод третьего порядка точности для решения жестких неавтономных систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Получены неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы. Приведены результаты расчетов кольцевого модулятора. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 11–01–00106 и 11–01–00224).

Ключевые слова: жесткая задача, аддитивный метод, контроль точности и устойчивости, кольцевой модулятор.

1. Введение. В некоторых важных приложениях возникает необходимость численного решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, правая часть которых представима в виде суммы двух функций $\varphi(t,y)$ и $g(t,y)$. Во многих случаях вещественные части собственных значений матрицы Якоби функции $g(t,y)$ сильно различаются по величине [1–4], в то время как для $\varphi(t,y)$ они примерно одного порядка. Например, при численном решении задач механики сплошной среды после дискретизации по пространственным переменным методом конечных разностей или конечными элементами возникает проблема решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$y' = \varphi(t,y) + g(t,y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leqslant t \leqslant t_k, \tag{1}$$

где $\varphi(t,y)$ — несимметричная часть (конвективные слагаемые), описываемая дифференциальным оператором первого порядка; $g(t,y)$ — симметричная часть, описываемая дифференциальным оператором второго порядка; t — независимая переменная, которая меняется на заданном конечном интервале $[t_0,t_k]$. Задача (1) является жесткой, причем вся жесткость сосредоточена в слагаемом $g(t,y)$, а $\varphi(t,y)$ — нежесткая часть.

Основные тенденции при построении численных методов связаны с расширением их возможностей для решения задач высокой размерности. Явные численные формулы имеют ограниченную область устойчивости и применяются для решения задач умеренной жесткости [5, 6]. Обычно для решения жестких задач используют L-устойчивые схемы, в которых при вычислении стадий применяется LU-разложение некоторой матрицы, размерность которой совпадает с размерностью исходной задачи. Декомпозиция осуществляется с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице. В случае достаточно большой размерности системы (1) быстродействие алгоритма интегрирования фактически полностью определяется временем декомпозиции этой матрицы.

Для повышения эффективности расчетов в ряде алгоритмов используется замораживание матрицы Якоби, т.е. применение одной и той же матрицы на нескольких шагах интегрирования [7, 8]. Наиболее успешно этот подход применяется в многошаговых методах [9, 10].

Не вызывает эта проблема особых трудностей и при построении алгоритмов интегрирования на основе других численных схем, если в них стадии вычисляются с участием матрицы Якоби в некотором итерационном процессе. В этом случае она не влияет на порядок точности численной схемы, а определяет только скорость сходимости итераций. Поэтому необходимость в ее пересчете возникает при значительном замедлении скорости сходимости итерационного процесса.

В безытерационных методах, к которым относятся методы типа Розенброка [11] и их различные модификации [7, 12], матрица Якоби включена непосредственно в численную формулу. Поэтому аппроксимация этой матрицы может приводить к потере точности численной схемы, что порождает определенные проблемы, связанные с ее замораживанием. В частности, в [8] показано, что максимальный порядок точности методов типа Розенброка с замораживанием матрицы Якоби равен двум. Это означает, что данные методы

[1] Институт вычислительного моделирования СО РАН, Академгородок, 660036, Красноярск; проф., главный науч. сотр., e-mail: novikov@icm.krasn.ru

будут эффективны при решении задач небольшой размерности или при невысокой точности расчетов. Заметим, что безытерационные методы более просты с точки зрения реализации на ЭВМ и, следовательно, более привлекательны для вычислителей.

Задачу Коши для системы дифференциальных уравнений вида

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leqslant t \leqslant t_k, \tag{2}$$

записанную в обычной форме, можно переписать следующим образом:

$$y' = \big[f(t, y) - By\big] + By, \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leqslant t \leqslant t_k, \tag{3}$$

где B — некоторая аппроксимация матрицы Якоби. Предполагая, что вся жесткость сосредоточена в слагаемом $g(t, y) = By$, выражение $\varphi(t, y) = f(t, y) - By$ можно интерпретировать как нежесткую часть [1–4]. Если при построении метода рассматривать задачу Коши в виде (3), то в алгоритме интегрирования можно использовать замораживание матрицы Якоби, которая может вычисляться как аналитически, так и численно. Для некоторых задач в качестве B можно применять диагональную аппроксимацию матрицы Якоби.

В настоящей статье построен аддитивный метод третьего порядка точности для решения жестких неавтономных задач, допускающий различные виды аппроксимации матрицы Якоби. Получены оценка ошибки и неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы. Приведены результаты расчетов кольцевого модулятора алгоритмом переменного шага с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби, подтверждающие эффективность предложенного алгоритма интегрирования.

2. Численная схема. Для решения задачи Коши для неавтономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1) рассмотрим численную схему вида

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{6} p_i k_i,\\
&k_1 = h\varphi(t_n, y_n), \quad Dk_2 = h\big[\varphi(t_n, y_n) + g(t_n, y_n)\big], \quad Dk_3 = k_2,\\
&Dk_4 = h\varphi\left(t_n + c_4 h,\, y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j\right) + hg\left(t_n + c_5 h,\, y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j\right),\\
&Dk_5 = k_4 + \gamma k_3, \quad k_6 = h\varphi\left(t_n + c_6 h,\, y_n + \sum_{j=1}^{5} \beta_{6j} k_j\right),
\end{aligned} \tag{4}$$

где $D = E - ahg'_n$, $g'_n = \dfrac{\partial g(t_n, y_n)}{\partial y}$ — матрица Якоби функции $g(t, y)$; E — единичная матрица; k_i — стадии метода, $1 \leqslant i \leqslant 6$; a, c_4, c_5, c_6, p_i, α_{4j}, β_{4j}, β_{6j} и γ — числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости схемы (4).

В [4] для решения (1) приведен другой метод такого же типа:

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{6} p_i k_i,\\
&k_1 = h\varphi(t_n,\, y_n), \quad Dk_2 = h\big[\varphi(t_n,\, y_n) + g(t_n,\, y_n)\big], \quad Dk_3 = k_2,\\
&k_4 = h\varphi\left(t_n + c_4 h,\, y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j\right) + hg\left(t_n + c_5 h,\, y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j\right),\\
&Dk_5 = k_4 + \gamma k_3, \quad k_6 = h\varphi\left(t_n + c_6 h,\, y_n + \sum_{j=1}^{5} \beta_{6j} k_j\right).
\end{aligned} \tag{5}$$

Численная схема (5) отличается от (4) способом вычисления четвертой стадии. Несмотря на существенное повышение эффективности алгоритма интегрирования на основе численной формулы (5) с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби, в некоторых критических ситуациях эффективность алгоритма падает. Как показывает анализ результатов расчетов, причиной этого является применение неитерированного значения функции $g(t, y)$ в четвертой стадии [4].

3. Условия третьего порядка. Запишем условия третьего порядка точности схемы (4). Для этого разложим стадии k_i, $1 \leqslant i \leqslant 6$, по степеням h до членов с h^3 включительно и подставим в первую формулу (4). Учитывая, что имеет место соотношение $D^{-1} = E + ahg_y + a^2h^2{g_y}^2 + O\big(h^3\big)$, получим

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} = y_n &+ \big[p_1+p_2+p_3+p_4+(\gamma+1)p_5+p_6\big]h\varphi + \big[p_2+p_3+p_4+(\gamma+1)p_5\big]hg + \big[c_4(p_4+p_5)+c_6p_6\big]h^2\varphi_t + \\
&+ c_5(p_4+p_5)h^2g_t + \Big[(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5) + \big[\beta_{61}+\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]p_6\Big]h^2\varphi_y\varphi + \\
&+ \Big[(\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5) + \big[\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]p_6\Big]h^2\varphi_y g + \Big[a\big[p_2+2p_3+p_4+(3\gamma+2)p_5\big] + \\
&+ \big(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43}\big)(p_4+p_5)\Big]h^2g_y\varphi + \Big[a\big[p_2+2p_3+p_4+(3\gamma+2)p_5\big] + (\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)\Big]h^2g_yg + \\
&+ c_4(\beta_{64}+\beta_{65})p_6h^3\varphi_y\varphi_t + c_5(\beta_{64}+\beta_{65})p_6h^3\varphi_yg_t + ac_4(p_4+2p_5)h^3g_y\varphi_t + ac_5(p_4+2p_5)h^3g_yg_t + \\
&+ \frac{1}{2}\big[c_4^2(p_4+p_5)+c_6^2p_6\big]h^3\varphi_{tt} + \frac{1}{2}\,c_5^2(p_4+p_5)h^3g_{tt} + \Big[c_4\big(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43}\big)(p_4+p_5) + \big[\beta_{61}+\beta_{62}+\beta_{63} + \\
&+ \beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]c_6p_6\Big]h^3\varphi_{ty}\varphi + \Big[c_4\big(\beta_{42}+\beta_{43}\big)(p_4+p_5) + \big[\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]c_6p_6\Big]h^3\varphi_{ty}g + \\
&+ c_5(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)h^3g_{ty}\varphi + c_5(\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)h^3g_{ty}g + (\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})\times \\
&\times p_6h^3\varphi_y^2\varphi + (\beta_{42}+\,!\beta_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6h^3\varphi_y^2g + a\Big[a\big[p_2+3p_3+p_4+(6\gamma+3)p_5\big] + (\alpha_{41}+2\alpha_{42}+3\alpha_{43})p_4 + \\
&+ (2\alpha_{41}+3\alpha_{42}+4\alpha_{43})p_5\Big]h^3g_y^2\varphi + a\Big[a\big[p_2+3p_3+p_4+(6\gamma+3)p_5\big] + (2\alpha_{42}+3\alpha_{43})p_4 + (3\alpha_{42}+4\alpha_{43})p_5\Big]\times \\
&\times h^3g_y^2g + \bigg[a\Big((\beta_{42}+2\beta_{43})(p_4+p_5) + \big[\beta_{62}+2\beta_{63}+\beta_{64}+(3\gamma+2)\beta_{65}\big]p_6\Big) + (\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6\bigg]\times \\
&\times h^3\varphi_yg_y\varphi + \bigg[a\Big((\beta_{42}+2\beta_{43})(p_4+p_5) + \big[\beta_{62}+2\beta_{63}+\beta_{64}+(3\gamma+2)\beta_{65}\big]p_6\Big) + (\alpha_{42}+\alpha_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6\bigg]\times \\
&\times h^3\varphi_yg_yg + a(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+2p_5)h^3g_y\varphi_y\varphi + a(\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+2p_5)h^3g_y\varphi_yg + \frac{1}{2}\Big[(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})^2\times \\
&\times (p_4+p_5) + \big[\beta_{61}+\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]^2p_6\Big]h^3\varphi_{yy}\varphi^2 + \frac{1}{2}\Big[(\beta_{42}+\beta_{43})^2(p_4+p_5) + \big[\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64} + \\
&+ (\gamma+1)\beta_{65}\big]^2p_6\Big]h^3\varphi_{yy}g^2 + \frac{1}{2}\,(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})^2(p_4+p_5)h^3g_{yy}\varphi^2 + \frac{1}{2}\,(\alpha_{42}+\alpha_{43})^2(p_4+p_5)h^3g_{yy}g^2 + \\
&+ \Big[(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5) + \big[\beta_{61}+\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]\big[\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64} + \\
&+ (\gamma+1)\beta_{65}\big]p_6\Big]h^3\varphi_{yy}\varphi g + (\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})(\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)h^3g_{yy}\varphi g + O\big(h^4\big),
\end{aligned}
$$

где элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n.

Разложение точного решения $y(t_{n+1})$ в ряд Тейлора в окрестности точки t_n имеет вид

$$
\begin{aligned}
y(t_{n+1}) = y(t_n) &+ h(\varphi+g) + \frac{1}{2}\,h^2(\varphi_t + g_t + \varphi_y\varphi + \varphi_yg + g_y\varphi + g_yg) + \\
&+ \frac{1}{6}\,h^3\big(\varphi_y\varphi_t + \varphi_yg_t + g_y\varphi_t + g_yg_t + \varphi_{tt} + g_{tt} + 2\varphi_{ty}\varphi + 2\varphi_{ty}g + 2g_{ty}\varphi + \\
&+ 2g_{ty}g + \varphi_y^2\varphi + \varphi_y^2g + g_y^2\varphi + g_y^2g + \varphi_yg_y\varphi + \varphi_yg_yg + g_y\varphi_y\varphi + g_y\varphi_yg + \\
&+ \varphi_{yy}\varphi^2 + 2\varphi_{yy}\varphi g + \varphi_{yy}g^2 + g_{yy}\varphi^2 + 2g_{yy}\varphi g + g_{yy}g^2\big) + O\big(h^4\big),
\end{aligned}
$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$.

Сравнивая разложения для y_{n+1} и $y(t_{n+1})$ до членов с h^3 включительно при условии $y_n = y(t_n)$, получим следующие условия третьего порядка точности схемы (4):

(1) $p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + (\gamma+1)p_5 + p_6 = 1$,

(2) $p_2 + p_3 + p_4 + (\gamma+1)p_5 = 1$,

(3) $c_4(p_4+p_5) + c_6p_6 = \dfrac{1}{2}\,$,

(4) $c_5(p_4+p_5) = \dfrac{1}{2}\,$,

(5) $(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5) + \big(\beta_{61}+\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big)p_6 = \dfrac{1}{2}\,$,

(6) $(\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5)+\bigl(\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\bigr)p_6=\dfrac{1}{2}\,,$

(7) $a\bigl(p_2+2p_3+p_4+(3\gamma+2)p_5\bigr)+(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)=\dfrac{1}{2}\,,$

(8) $a\bigl(p_2+2p_3+p_4+(3\gamma+2)p_5\bigr)+(\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)=\dfrac{1}{2}\,,$

(9) $c_4(\beta_{64}+\beta_{65})p_6=\dfrac{1}{6}\,,$

(10) $c_5(\beta_{64}+\beta_{65})p_6=\dfrac{1}{6}\,,$

(11) $ac_4(p_4+2p_5)=\dfrac{1}{6}\,,$

(12) $ac_5(p_4+2p_5)=\dfrac{1}{6}\,,$

(13) $c_4^2(p_4+p_5)+c_6^2p_6=\dfrac{1}{3}\,,$

(14) $c_5^2(p_4+p_5)=\dfrac{1}{3}\,,$

(15) $c_4(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5)+\bigl(\beta_{61}+\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\bigr)c_6p_6=\dfrac{1}{3}\,,$

(16) $c_4(\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5)+\bigl(\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\bigr)c_6p_6=\dfrac{1}{3}\,,$

(17) $(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})c_5(p_4+p_5)=\dfrac{1}{3}\,,$

(18) $(\alpha_{42}+\alpha_{43})c_5(p_4+p_5)=\dfrac{1}{3}\,,$

(19) $(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6=\dfrac{1}{6}\,,$

(20) $(\beta_{42}+\beta_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6=\dfrac{1}{6}\,,$

(21) $a\Bigl[a\bigl(p_2+3p_3+p_4+(6\gamma+3)p_5\bigr)+(\alpha_{41}+2\alpha_{42}+3\alpha_{43})p_4+(2\alpha_{41}+3\alpha_{42}+4\alpha_{43})p_5\Bigr]=\dfrac{1}{6}\,,$

(22) $a\Bigl[a\bigl(p_2+3p_3+p_4+(6\gamma+3)p_5\bigr)+(2\alpha_{42}+3\alpha_{43})p_4+(3\alpha_{42}+4\alpha_{43})p_5\Bigr]=\dfrac{1}{6}\,,$

(23) $a\Bigl((\beta_{42}+2\beta_{43})(p_4+p_5)+\bigl(\beta_{62}+2\beta_{63}+\beta_{64}+(3\gamma+2)\beta_{65}\bigr)p_6\Bigr)+(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6=\dfrac{1}{6}\,,$

(24) $a\Bigl((\beta_{42}+2\beta_{43})(p_4+p_5)+\bigl(\beta_{62}+2\beta_{63}+\beta_{64}+(3\gamma+2)\beta_{65}\bigr)p_6\Bigr)+(\alpha_{42}+\alpha_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6=\dfrac{1}{6}\,,$

(25) $a(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+2p_5)=\dfrac{1}{6}\,,$

(26) $a(\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+2p_5)=\dfrac{1}{6}\,,$

(27) $(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})^2(p_4+p_5)+\bigl(\beta_{61}+\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\bigr)^2p_6=\dfrac{1}{3}\,,$

(28) $(\beta_{42}+\beta_{43})^2(p_4+p_5)+\bigl(\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\bigr)^2p_6=\dfrac{1}{3}\,,$

(29) $(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})^2(p_4+p_5)=\dfrac{1}{3}\,,$

(30) $(\alpha_{42}+\alpha_{43})^2(p_4+p_5)=\dfrac{1}{3}\,,$

(31) $(\beta_{41}+\beta_{42}+\beta_{43})(\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5)+\bigl(\beta_{61}+\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\bigr)\bigl(\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\bigr)p_6=\dfrac{1}{3}\,,$

(32) $(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})(\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)=\dfrac{1}{3}\,.$

Исследуем совместность данной нелинейной системы алгебраических уравнений.
Из двадцать пятого и двадцать шестого равенств получим $\beta_{41}=0$.
Из седьмого и восьмого следует $\alpha_{41}=0$, а из пятнадцатого и шестнадцатого имеем $\beta_{61}=0$.
Из девятого и десятого уравнений следует $c_4=c_5$, а из третьего и четвертого — $c_6=0$.
Подставим третье равенство в тринадцатое и учтем, что $c_6=0$, получим $c_4=2/3$.
Из шестнадцатого и восемнадцатого уравнений имеем $\alpha_{42}+\alpha_{43}=\beta_{42}+\beta_{43}=2/3$.
Тогда из двадцать восьмого соотношения следует $\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}=0$.

С учетом полученных выражений, из третьего и одиннадцатого уравнений для порядка имеем

$$p_5 = -\frac{3}{4} + \frac{1}{4a}\,, \quad p_4 = \frac{3}{2} - \frac{1}{4a}\,.$$

Вычитая второе уравнение из первого, получим $p_1 = -p_6$.

В итоге условия для порядка можно переписать в виде

$$\begin{aligned}
&(1)\ p_2 + p_3 = \frac{1}{4a}\big(a(3\gamma+1) - \gamma\big),\\
&(2)\ p_2 + 2p_3 = \frac{1}{4a}\,(9a\gamma - 3\gamma - 1),\\
&(3)\ p_2 + 3p_3 = \frac{1}{4a}\big(3a(6\gamma+1) - 6\gamma - 3\alpha_{43} - 4\big),\\
&(4)\ (\beta_{64} + \beta_{65})p_6 = \frac{1}{4}\,,\\
&(5)\ \big(\beta_{63} + (2\gamma+1)\beta_{65}\big)p_6 + \frac{3}{4}\,\beta_{43} + \frac{1}{2} = 0,\\
&(6)\ \alpha_{41} = \beta_{41} = \beta_{61} = c_6 = \beta_{62} + \beta_{63} + \beta_{64} + (\gamma+1)\beta_{65} = 0,\\
&(7)\ c_4 = c_5 = \alpha_{42} + \alpha_{43} = \beta_{42} + \beta_{43} = \frac{2}{3}\,,\\
&(8)\ p_1 = -p_6, \quad p_4 = \frac{3}{2} - \frac{1}{4a}\,, \quad p_5 = -\frac{3}{4} + \frac{1}{4a}\,.
\end{aligned} \tag{6}$$

Выражая p_2 и p_3 из первого и второго уравнений данной системы, получим $p_2 = \dfrac{1}{4a}\big[a(-3\gamma+2) + \gamma + 1\big]$, $p_3 = \dfrac{1}{4a}\big[a(6\gamma-1) - 2\gamma - 1\big]$.

Подставляя эти соотношения в третье равенство (6), имеем $\alpha_{43} = \dfrac{1}{3}\big[a(3\gamma+4) - \gamma - 2\big]$.

Из этого равенства и седьмого уравнения системы (6) запишем $\alpha_{42} = \dfrac{1}{3}\big[-a(3\gamma+4) + \gamma + 4\big]$. Таким образом, система (6) эквивалентна следующей системе:

$$\begin{aligned}
&(\beta_{64} + \beta_{65})p_6 = \frac{1}{4}\,, \quad \big[\beta_{63} + (2\gamma+1)\beta_{65}\big]p_6 + \frac{3}{4}\,\beta_{43} + \frac{1}{2} = 0,\\
&\alpha_{41} = \beta_{41} = \beta_{61} = c_6 = \beta_{62} + \beta_{63} + \beta_{64} + (\gamma+1)\beta_{65} = 0,\\
&c_4 = c_5 = \beta_{42} + \beta_{43} = \frac{2}{3}\,,\\
&\alpha_{42} = \frac{1}{3}\big[-a(3\gamma+4) + \gamma + 4\big], \quad \frac{1}{3}\,\alpha_{43} = \big[a(3\gamma+4) - \gamma - 2\big],\\
&p_1 = -p_6, \quad p_2 = \frac{1}{4a}\big[a(-3\gamma+2) + \gamma + 1\big],\\
&p_3 = \frac{1}{4a}\big[a(6\gamma-1) - 2\gamma - 1\big], \quad p_4 = \frac{3}{2} - \frac{1}{4a}\,, \quad p_5 = -\frac{3}{4} + \frac{1}{4a}\,.
\end{aligned} \tag{7}$$

4. Исследование устойчивости численной схемы. Применение общепринятого тестового уравнения $y' = \lambda y$, $\mathrm{Re}\,(\lambda) \leqslant 0$, для исследования устойчивости схемы (4) неправомерно, поскольку теряется смысл в разделении правой части системы (1) на жесткую и нежесткую части. Положим в (1) $\varphi(y) = \lambda_1 y$ и $g(y) = \lambda_2 y$, где λ_1 и λ_2 произвольные комплексные числа, причем $\mathrm{Re}\,(\lambda_1) \leqslant 0$ и $\mathrm{Re}\,(\lambda_2) \leqslant 0$. Смысл λ_1 и λ_2 — некоторые собственные значения матриц Якоби функций $\varphi(t,y)$ и $g(t,y)$ соответственно. Применяя (4) для решения задачи $y' = \lambda_1 y + \lambda_2 y$, $y(0) = y_0$, $t \geqslant 0$, и используя обозначения $x = \lambda_1 h$ и $z = \lambda_2 h$ для стадий k_i, $1 \leqslant i \leqslant 6$, можно записать

$$\begin{aligned}
&k_1 = x\,y_n,\\
&k_2 = [x+z]\,\frac{y_n}{1-az}\,,\\
&k_3 = [x+z]\,\frac{y_n}{(1-az)^2}\,,\\
&k_4 = \big\{a(a-\alpha_{42})z^3 + a(a-\alpha_{42}-\beta_{42})xz^2 + (\alpha_{42}+\alpha_{43}-2a)z^2 - a\beta_{42}x^2 z +
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+(-2a+\beta_{42}+\beta_{43}+\alpha_{42}+\alpha_{43})xz+z+(\beta_{42}+\beta_{43})x^2+x\Big\}\,\frac{y_n}{(1-az)^3}\,,\\
k_5=\Big\{&a(a-\alpha_{42})z^3+a(a-\alpha_{42}-\beta_{42})z^2x+\big[-a(\gamma+2)+\alpha_{42}+\alpha_{43}\big]z^2-a\beta_{42}zx^2+\\
&+\big[-a(\gamma+2)+\alpha_{42}+\alpha_{43}+\beta_{42}+\beta_{43}\big]zx+(\gamma+1)z+(\beta_{42}+\beta_{43})x^2+(\gamma+1)x\Big\}\,\frac{y_n}{(1-az)^4}\,,\\
k_6=\Big\{&a^2\big[a^2-a\beta_{62}+\beta_{64}(\alpha_{42}-a)\big]z^4x-a^2\big[\beta_{42}+a\beta_{62}+\beta_{64}(a-\alpha_{42}-\beta_{42})\big]z^3x^2-\\
&-a\big[a(4a-3\beta_{62}-\beta_{63}-3\beta_{64}-\beta_{65})+(2\alpha_{42}+\alpha_{43})\beta_{64}+\alpha_{42}\beta_{65}\big]z^3x+\beta_{42}\beta_{64}a^2z^2x^3+\\
&+\Big(a^2(3\beta_{62}+\beta_{63}+3\beta_{64}+\beta_{65})-a\big[(2\alpha_{42}+\alpha_{43}+2\beta_{42}+\beta_{43})\beta_{64}+(\alpha_{42}+\beta_{42})\beta_{65}\big]\Big)z^2x^2+\\
&+\Big(6a^2-a\big[3\beta_{62}+2\beta_{63}+3\beta_{64}+(\gamma+2)\beta_{65}\big]+(\alpha_{42}+\alpha_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})\Big)z^2x-\\
&-a\big[(2\beta_{42}+\beta_{43})\beta_{64}+\beta_{42}\beta_{65}\big]zx^3+\Big(-a\big[3\beta_{62}+2\beta_{63}+3\beta_{64}+(\gamma++2)\beta_{65}\big]+\\
&+(\alpha_{42}+\alpha_{43}+\beta_{42}+\beta_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})\Big)zx^2+\big[-4a+\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]zx+\\
&+(\beta_{42}+\beta_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})x^3+\big[\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]x^2+x\Big\}\,\frac{y_n}{(1-az)^4}\,.
\end{aligned}
$$

Подставляя полученные соотношения в первую формулу (4), получим $y_{n+1}=Q(x,z)y_n$, где функция устойчивости $Q(x,z)$ имеет вид

$$
\begin{aligned}
Q(x,z)=\Big\{&a^2\Big[a^2(p_1+p_6)+\big[(\alpha_{42}-a)\beta_{64}-a\beta_{62}\big]p_6\Big]z^4x+a^2\big[a(a-p_2)+(\alpha_{42}-a)p_4\big]z^4+a^2\big[-a(\beta_{62}+\beta_{64})+\\
&+(\alpha_{42}+\beta_{42})\beta_{64}\big]p_6z^3x^2-a\Big[a^2(4p_1+p_2+p_4+4p_6)-a\big[p_4(\alpha_{42}+\beta_{42})+(3\beta_{62}+\beta_{63}+3\beta_{64}+\beta_{65})p_6\big]+\\
&+a\big[(2\alpha_{42}+\alpha_{43})\beta_{64}+\alpha_{42}\beta_{65}\big]p_6\Big]z^3x-a\big(4a^2-a(3p_2+p_3+3p_4+p_5)+(2\alpha_{42}+\alpha_{43})p_4+\alpha_{42}p_5\big)z^3+\\
&+a^2\beta_{42}\beta_{64}p_6z^2x^3+a\Big[a\big[\beta_{42}p_4+(3\beta_{62}+\beta_{63}+3\beta_{64}+\beta_{65})p_6\big]-\big((2\alpha_{42}+\alpha_{43}+2\beta_{42}+\beta_{43})\beta_{64}+\\
&+(\alpha_{42}+\beta_{42})\beta_{65}\big)p_6\Big]z^2x^2+\Big[a^2(6p_1+3p_2+p_3+3p_4+p_5+6p_6)-a\big[(2\alpha_{42}+\alpha_{43}+2\beta_{42}+\beta_{43})p_4+\\
&+(\alpha_{42}+\beta_{42})p_5+(3\beta_{62}+2\beta_{63}+3\beta_{64}+(\gamma+2)\beta_{65})p_6\big]+(\alpha_{42}+\alpha_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6\Big]z^2x+\\
&+\Big(6a^2-a\big(3p_2+2p_3+3p_4+(\gamma+2)p_5\big)+(\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)\Big)z^2-a\big((2\beta_{42}+\beta_{43})\beta_{64}+\beta_{42}\beta_{65}\big)p_6zx^3+\\
&+a^2\beta_{42}\beta_{64}p_6z^2x^3+a\Big(a\big(\beta_{42}p_4+(3\beta_{62}+\beta_{63}+3\beta_{64}+\beta_{65})p_6\big)-\big((2\alpha_{42}+\alpha_{43}+2\beta_{42}+\beta_{43})\beta_{64}+\\
&+(\alpha_{42}+\beta_{42})\beta_{65}\big)p_6\Big)z^2x^2+\Big[a^2(6p_1+3p_2+p_3+3p_4+p_5+6p_6)-a\big((2\alpha_{42}+\alpha_{43}+2\beta_{42}+\beta_{43})p_4+\\
&+(\alpha_{42}+\beta_{42})p_5+(3\beta_{62}+2\beta_{63}+3\beta_{64}+(\gamma+2)\beta_{65})p_6\big)+(\alpha_{42}+\alpha_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6\Big]z^2x+\\
&+\Big[6a^2-a\big(3p_2+2p_3+3p_4+(\gamma+2)p_5\big)+(\alpha_{42}+\alpha_{43})(p_4+p_5)\Big]z^2-a\big[(2\beta_{42}+\beta_{43})\beta_{64}+\beta_{42}\beta_{65}\big]p_6zx^3+\\
&+\Big[-a\Big((2\beta_{42}+\beta_{43})p_4+\beta_{42}p_5+\big[3\beta_{62}+2\beta_{63}+3\beta_{64}+(\gamma+2)\beta_{65}\big]p_6\Big)+(\alpha_{42}+\alpha_{43}+\beta_{42}+\beta_{43})\times\\
&\times(\beta_{64}+\beta_{65})p_6\Big]zx^2-a\Big[\big[4p_1+3p_2+2p_3+3p_4+(\gamma+2)p_5+4p_6\big]+(\alpha_{42}+\alpha_{43}+\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5)+\\
&+\big[\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]p_6\Big]zx+\big[-4a+p_2+p_3+p_4+(\gamma+1)p_5\big]z+(\beta_{42}+\beta_{43})(\beta_{64}+\beta_{65})p_6x^3+\\
&+\Big[(\beta_{42}+\beta_{43})(p_4+p_5)+\big[\beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}+(\gamma+1)\beta_{65}\big]p_6\Big]x^2+\big[p_1+p_2+p_3+p_4+(\gamma+1)p_5\big]x+1\Big\}\frac{1}{(1-az)^4}.
\end{aligned}
$$

Необходимым условием L-устойчивости схемы (4) относительно функции $g(t,y)=\lambda_2 y$ является требование $\lim\limits_{z\to-\infty} Q(x,z)=0$, которое будет выполнено, если

$$a^2(p_1+p_6)+\big((\alpha_{42}-a)\beta_{64}-a\beta_{62}\big)p_6=0,\quad a(a-p_2)+(\alpha_{42}-a)p_4=0. \tag{8}$$

Заметим, что в случае задачи (2) требование L-устойчивости приводит к одному уравнению, в то время как в случае задачи (1) необходимо выполнение двух равенств.

Исследуем совместность нелинейной системы алгебраических уравнений (7) и (8). Будем предполагать выполнение соотношений $\beta_{42}=a$, $\sum\limits_{j=1}^{6}\beta_{6j}=1$, первое из которых улучшает свойства устойчивости промежуточной численной формулы $y_n+\beta_{41}k_1+\beta_{42}k_2+\beta_{43}k_3$, а второе обеспечивает вычисление функции $\varphi(t,y)$ в точке t_{n+1}. После очевидных преобразований систему (7), (8) можно записать в виде

$$\begin{aligned}
&(1)\ \left[\beta_{64}-\frac{1}{\gamma}\right]p_6=\frac{1}{4}\,,\\
&(2)\ \left[\beta_{63}-2-\frac{1}{\gamma}\right]p_6=\frac{3}{4}\,a-1,\\
&(3)\ (\alpha_{42}-a)\beta_{64}-a\beta_{62}=0,\\
&(4)\ \beta_{62}+\beta_{63}+\beta_{64}=1+\frac{1}{\gamma}\,,\\
&(5)\ a(a-p_2)+(\alpha_{42}-a)p_4=0,\\
&(6)\ \alpha_{41}=\beta_{41}=\beta_{61}=c_6=0,\quad c_4=c_5=\frac{2}{3}\,,\\
&(7)\ \alpha_{42}=\frac{1}{3}\left[-a(3\gamma+4)+\gamma+4\right],\quad \alpha_{43}=\frac{1}{3}\left[a(3\gamma+4)-\gamma-2\right],\\
&(8)\ \beta_{42}=a,\quad \beta_{43}=\frac{2}{3}-a,\quad \beta_{65}=-\frac{1}{\gamma},\quad p_1=-p_6,\quad p_2=\frac{a(-3\gamma+2)+\gamma+1}{4a}\,,\\
&(9)\ p_3=\frac{a(6\gamma-1)-2\gamma-1}{4a}\,,\quad p_4=\frac{3}{2}-\frac{1}{4a}\,,\quad p_5=-\frac{3}{4}+\frac{1}{4a}\,.
\end{aligned} \tag{9}$$

Выразим γ через a; для этого подставим в пятое уравнение системы (9) соответствующие выражения из седьмого, восьмого и девятого уравнений и получим $\gamma=\dfrac{12a^3-48a^2+28a-4}{(3a-1)^2}$. Умножим четвертое равенство системы (9) на p_6 и вычтем из него сумму первого и второго уравнений, получим

$$\left(\beta_{62}+1+\frac{1}{\gamma}\right)p_6=-\frac{3}{4}\,(a-1). \tag{10}$$

Выразим β_{64} и β_{62} соответственно из первого уравнения системы (9) и равенства (10). Подставляя их в третье уравнение системы (9), получим $p_6=\dfrac{-\gamma\big(3a^2-4a+\alpha_{42}\big)}{4(a\gamma+\alpha_{42})}$. Из уравнения (10), а также второго и первого равенств имеем

$$\beta_{62}=-1-\frac{1}{\gamma}-\frac{3(a-1)}{4p_6}\,,\quad \beta_{63}=2+\frac{1}{\gamma}+\frac{3a-4}{4p_6}\,,\quad \beta_{64}=\frac{1}{\gamma}+\frac{1}{4p_6}\,.$$

Коэффициент a пока остался неопределенным. Его значение получим из следующих соображений. Рассмотрим вместо (1) систему вида $y'=g(y)$. В этом случае локальная ошибка δ_{n+1} схемы (4) в точке t_{n+1} представима в виде

$$\delta_{n+1}=h^4\Big[b_1{g'}^3g+b_2g''g'g^2+b_3g'g''g^2+b_4g'''g^3\Big]+O\big(h^5\big),$$

где b_i, $1\leqslant i\leqslant 4$, — некоторые соотношения относительно коэффициентов схемы (4), которые здесь не приводятся в силу их громоздкости. Так как система $y'=g(y)$ жесткая, т.е. функция $g(y)$ удовлетворят условию Липшица с большой постоянной, то наибольший вклад в ошибку дает слагаемое $b_1h^4{g'}^3g$. С целью минимизации локальной ошибки положим $b_1=0$, что после некоторых преобразований соответствующего соотношения на коэффициенты приводит к уравнению

$$a^4-4a^3+3a^2-\frac{2}{3}\,a+\frac{1}{24}=0. \tag{11}$$

Коэффициенты L-устойчивого метода (4) третьего порядка точности вычислим по формулам

$$
\begin{array}{lll}
\alpha_{41}=\beta_{41}=\beta_{61}=c_6=0, & c_4 \ =c_5=\dfrac{2}{3}\,, & \beta_{42}=a, \quad \beta_{43}=\dfrac{2}{3}-a,\\
\gamma \ =\dfrac{12a^3-48a^2+28a-4}{(3a-1)^2}\,, & \alpha_{42}=\dfrac{1}{3}\big(-a(3\gamma+4)+\gamma+4\big), & \alpha_{43}=\dfrac{1}{3}\big(a(3\gamma+4)-\gamma-2\big),\\
p_1 \ =\dfrac{\gamma(3a^2-4a+\alpha_{42})}{4(a\gamma+\alpha_{42})}\,, & p_2 \ =\dfrac{a(-3\gamma+2)+\gamma+1}{4a}\,, & p_3 \ =\dfrac{a(6\gamma-1)-2\gamma-1}{4a}\,,\\
p_4 \ =\dfrac{3}{2}-\dfrac{1}{4a}\,, & p_5 \ =-\dfrac{3}{4}+\dfrac{1}{4a}\,, & p_6 \ =-p_1,\\
\beta_{62}=-1-\dfrac{1}{\gamma}-\dfrac{3(a-1)}{4p_6}\,, & \beta_{63}=2+\dfrac{1}{\gamma}+\dfrac{3a-4}{4p_6}\,, & \beta_{64}=\dfrac{1}{\gamma}+\dfrac{1}{4p_6}\,, \quad \beta_{65}=-\dfrac{1}{\gamma}\,,
\end{array}
$$

где коэффициент a определяется из уравнения (11). Это уравнение имеет четыре вещественных корня $a_1 = 0.10643879214266$, $a_2 = 0.22042841025921$, $a_3 = 0.57281606248213$ и $a_4 = 3.10031673511599$. Из результатов расчетов следует, что наиболее удачным является корень a_1, который ниже применяется в конкретных расчетах. Соответствующие коэффициенты L-устойчивой схемы (4) третьего порядка точности имеют вид

$$
\begin{array}{lll}
a \ =0.10643879214266, & \gamma \ =-3.34328694454608, & c_4 \ =2/3, \quad c_5=2/3,\\
\alpha_{41}=0, & \alpha_{42}=0.43284138645824, & \alpha_{43}=0.23382528020842,\\
\beta_{41}=0, & \beta_{42}=0.10643879214266, & \beta_{43}=0.56022787452400,\\
c_6 \ =0, & \beta_{61}=0, & \beta_{62}=0.80196452446275,\\
\beta_{63}=-0.36258931032435, & \beta_{64}=0.26151794382661, & \beta_{65}=0.29910684203499,\\
p_1 \ =-0.44593105104296, & p_2 \ =-2.49637154456040, & p_3 \ =8.09151081719609,\\
p_4 \ =-0.84876772807528, & p_5 \ =1.59876772807528, & p_6 \ =0.44593105104296.
\end{array}
\tag{12}
$$

5. Контроль точности вычислений. Контроль точности численной схемы (4) будем осуществлять с помощью метода второго порядка точности, который построим так, чтобы он не требовал дополнительных вычислений правой части и матрицы Якоби. Для этого рассмотрим схему вида

$$
\begin{aligned}
&y_{n+1,2}=y_n+\sum_{i=1}^{3}r_ik_i+\sum_{i=4}^{5}r_i\widetilde{k}_i\,,\\
&k_1=h\varphi(t_n,y_n), \quad Dk_2=h\big(\varphi(t_n,y_n)+g(t_n,y_n)\big), \quad Dk_3=k_2,\\
&D\widetilde{k}_4=hg\left(t_n+c_5h,\, y_n+\sum_{j=1}^{3}\alpha_{4j}k_j\right), \quad D\widetilde{k}_5=\widetilde{k}_4+\gamma k_3,
\end{aligned}
\tag{13}
$$

где коэффициенты r_i, $1\leqslant i\leqslant 5$, требуется определить, а параметры a, c_5, α_{4j} и γ заданы в (12). Отметим, что в (13), в отличие от (4), отсутствует шестая стадия, а в четвертой стадии отсутствует слагаемое

$$
h\varphi\left(t_n+c_4h,\, y_n+\sum_{j=1}^{3}\beta_{4j}k_j\right).
$$

Для отыскания коэффициентов (13) разложим стадии по степеням h до членов с h^2 включительно. В результате получим

$$
\begin{aligned}
&k_1=h\varphi,\\
&k_2=h\varphi+hg+ah^2[g_y\varphi+g_yg]+O\big(h^3\big),\\
&k_3=h\varphi+hg+2ah^2[g_y\varphi+g_yg]+O\big(h^3\big),\\
&k_4=hg+(\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})h^2g_y\varphi+(a+\alpha_{42}+\alpha_{43})h^2g_yg+c_5h^2g_t+O\big(h^3\big),\\
&k_5=\gamma h\varphi+(\gamma+1)hg+(3a\gamma+\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43})h^2g_y\varphi+\big[a(3\gamma+2)+\alpha_{42}+\alpha_{43}\big]h^2g_yg+c_5h^2g_t+O\big(h^3\big).
\end{aligned}
$$

Подставляя эти разложения в первую формулу (13), имеем

$$y_{n+1,2} = y_n + [r_1 + r_2 + r_3 + \gamma r_5]h\varphi + \big[r_2 + r_3 + r_4 + (\gamma+1)r_5\big]hg + \big[a(r_2 + 2r_3 + 3\gamma r_5) + \\ + (\alpha_{41} + \alpha_{42} + \alpha_{43})(r_4 + r_5)\big]h^2 g_y \varphi + \Big[a\big[r_2 + 2r_3 + r_4 + (3\gamma+2)r_5\big] + \\ + (\alpha_{42} + \alpha_{43})(r_4 + r_5)\Big]h^2 g_y g + c_5(r_4 + r_5)h^2 g_t + O\big(h^3\big).$$

Сравнивая при условии $y_n = y(t_n)$ полученное представление приближенного решения $y_{n+1,2}$ с разложением точного решения $y(t_{n+1})$ до членов с h^2 включительно, получим следующие условия второго порядка точности схемы (13):

$$r_1 + r_2 + r_3 + \gamma r_5 = 1,$$
$$r_2 + r_3 + r_4 + (\gamma+1)r_5 = 1,$$
$$a(r_2 + 2r_3 + 3\gamma r_5) + (\alpha_{41} + \alpha_{42} + \alpha_{43})(r_4 + r_5) = \frac{1}{2}\,,$$
$$a\big(r_2 + 2r_3 + r_4 + (3\gamma+2)r_5\big) + (\alpha_{42} + \alpha_{43})(r_4 + r_5) = \frac{1}{2}\,,$$
$$c_5(r_4 + r_5) = \frac{1}{2}\,.$$

После несложных выкладок получим коэффициенты вложенного метода (13) второго порядка точности:

$$r_1 = \frac{3}{4}, \quad r_2 = \frac{1}{4}\,(-3\gamma + 2), \quad r_3 = \frac{1}{4}\,(6\gamma - 1), \quad r_4 = \frac{3}{2}, \quad r_5 = -\frac{3}{4}\,.$$

В случае применения коэффициентов (12) имеем

$$r_1 = \frac{3}{4}, \quad r_2 = 3.00746520840956, \quad r_3 = -5.26493041681912, \quad r_4 = \frac{3}{2}\,, \quad r_5 = -\frac{3}{4}\,.$$

Итак, на каждом шаге интегрирования вложенный метод требует дополнительно два обратных хода метода Гаусса. Поскольку в основном методе третьего порядка точности производится одна декомпозиция матрицы Якоби (порядка $O\big(N^3\big)$ арифметических операций) и четыре обратных хода в методе Гаусса (порядка $O\big(N^2\big)$ арифметических операций), то для задач большой размерности увеличение вычислительных затрат, связанных с использованием вложенного метода, будет незначительным.

Введем обозначение

$$\varepsilon_n = \max_{1 \leqslant i \leqslant N} \left\{ \frac{\big|y_n^i - y_{n,2}^i\big|}{\big|y_n^i\big| + r} \right\}.$$

Тогда с использованием (13) точность вычислений метода (4) можно контролировать с помощью неравенства $\varepsilon_n \leqslant \varepsilon$, где r — положительный параметр, а ε — требуемая точность интегрирования. Если $\big|y_n^i\big| > r$, то контролируется относительная ошибка ε, в противном случае контролируется абсолютная ошибка $\varepsilon\, r$.

6. Контроль устойчивости численной схемы. Теперь перейдем к построению неравенства для контроля устойчивости явной части схемы (4). Заметим, что переход от системы (2) к (3) в общем случае не гарантирует, что функция $\varphi(t, y) = f(t, y) - By$ является нежесткой частью системы обыкновенных дифференциальных уравнений. В некоторых случаях это не оказывает сильного влияния на эффективность алгоритма интегрирования, поскольку численная формула (4) обладает достаточно хорошими свойствами устойчивости. Однако для многих задач неравенство для контроля устойчивости явной части численной схемы (4) может существенно повысить эффективность расчетов.

Отметим также, что в отличие от явных численных схем, где на жестких задачах контроль устойчивости всегда дает положительный эффект [5], в случае схемы (4) столь обременительное ограничение на выбор шага может приводить и к существенному понижению быстродействия алгоритма интегрирования вплоть до катастрофически низкого. Поэтому право на включение или выключение данного неравенства следует передать пользователю посредством формального параметра подпрограммы, реализующей алгоритм интегрирования.

Неравенство для контроля устойчивости построим по аналогии [5]. Здесь, в отличие от [5], нельзя воспользоваться вычисленными стадиями k_i, $1 \leqslant i \leqslant 6$, метода (4) в силу специфики задачи (1). Поступим следующим образом. Введем в рассмотрение стадии d_1 и d_2 вида [2]

$$d_1 = h\varphi(t_n + \alpha_{21}h,\, y_n + \alpha_{21}k_1), \quad d_2 = h\varphi\big(t_n + [\alpha_{31} + \alpha_{32}]h,\, y_n + \alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}d_1\big).$$

Пусть $\varphi(t,y)=Ay+b$, где A и b — матрица и вектор с постоянными коэффициентами. Имеют место соотношения

$$k_1=h(Ay_n+b),\quad d_1=k_1+\alpha_{21}hAk_1,\quad d_2=k_1+(\alpha_{31}+\alpha_{32})hAk_1+\alpha_{21}\alpha_{32}h^2A^2k_1.$$

Полагая $\alpha_{21}=\alpha_{31}+\alpha_{32}$, получим $d_2-d_1=\alpha_{21}\alpha_{32}h^2A^2k_1$, $d_1-k_1=\alpha_{21}hAk_1$. С использованием степенного метода максимальное собственное значение $v_n=h|\lambda_{n\,\max}|$ матрицы hA можно оценить по следующей приближенной формуле [2]:

$$v_n=\frac{1}{|\alpha_{32}|}\max_{1\leqslant i\leqslant N}\left|\frac{(d_2-d_1)_i}{(d_1-k_1)_i}\right|.$$

Оценка максимального собственного значения матрицы Якоби приводит к двум дополнительным вычислениям функции $\varphi(t,y)$. Если есть уверенность, что вся жесткость сосредоточена в функции $g(t,y)$ или $\varphi(t,y)\equiv 0$, то с целью экономии вычислительных затрат данная оценка может быть отключена. В общем случае полученная оценка является грубой, потому что в степенном методе используется мало итераций и плюс дополнительные искажения вносит нелинейность функции $\varphi(t,y)$. Поэтому неравенство для контроля устойчивости будем применять как некоторый ограничитель на рост величины шага интегрирования.

Приведем формулу для выбора шага по точности и устойчивости. Пусть приближение к решению y_n в точке t_n вычислено с шагом h_n. Для оценки ошибки ε_n имеет место соотношение $\varepsilon_n=O\big(h_n^3\big)$. Прогнозируемый шаг $h_{\rm ac}$ по точности вычислим по формуле $h_{\rm ac}=q_1h_n$, где q_1 — корень уравнения $q_1^3\varepsilon_n=\varepsilon$. Учитывая, что $v_n=O(h_n)$, шаг $h_{\rm st}$ по устойчивости определим по формуле $h_{\rm st}=q_2h_n$, где q_2 — корень уравнения $q_2v_n=2$, а числу два приблизительно равен интервал устойчивости явного трехстадийного метода типа Рунге–Кутта третьего порядка точности. Тогда прогнозируемый шаг h_{n+1} по точности с ограничением по устойчивости можно вычислить по формуле $h_{n+1}=\max\big[h_n,\min(h_{\rm ac},h_{\rm st})\big]$.

Заметим, что эта формула применяется для прогноза величины шага интегрирования h_{n+1} после успешного вычисления решения с предыдущим шагом h_n и поэтому фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат. Если шаг по устойчивости меньше последнего успешного, то он уменьшен не будет, потому что причиной этого может быть грубость оценки максимального собственного значения. Однако шаг не будет и увеличен, потому что не исключена возможность неустойчивости численной схемы. Если шаг по устойчивости должен быть уменьшен, то в качестве следующего шага будет применяться последний успешный шаг h_n. В результате для выбора шага и предлагается данная формула. Она позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Наличие такого участка существенно ограничивает применение явных методов для решения жестких задач.

7. Анализ результатов расчетов. Ниже через if и ij обозначены, соответственно, суммарное число вычислений правой части и количество декомпозиций матрицы Якоби задачи (1), которые позволяют объективно оценить эффективность алгоритма интегрирования. В качестве тестового примера выбрана модель кольцевого модулятора [13, 14]. Задача возникла из анализа электрических схем. Получая на входе низкочастотный сигнал $U_{\rm in\,1}$ и высокочастотный сигнал $U_{\rm in\,2}$, кольцевой модулятор генерирует на выходе смешанный сигнал U_2. Отождествляя напряжения с y_i, $1\leqslant i\leqslant 7$, и силы токов с y_i, $8\leqslant i\leqslant 15$, получим систему пятнадцати дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}
&y_1' = C^{-1}\Big(y_8-\frac12\,y_{10}+\frac12\,y_{11}+y_{14}-R^{-1}y_1\Big), && y_2' = C^{-1}\Big(y_9-\frac12\,y_{12}+\frac12\,y_{13}+y_{15}-R^{-1}y_2\Big),\\
&y_3' = C_s^{-1}\big(y_{10}-q(U_{D1})+q(U_{D4})\big), && y_4' = C_s^{-1}\big(-y_{11}+q(U_{D2})-q(U_{D3})\big),\\
&y_5' = C_s^{-1}\big(y_{12}+q(U_{D1})-q(U_{D3})\big), && y_6' = C_s^{-1}\big(-y_{13}-q(U_{D2})+q(U_{D4})\big),\\
&y_7' = C_p^{-1}\big(-R_p^{-1}y_7+q(U_{D1})+q(U_{D2})-q(U_{D3})-q(U_{D4})\big), && y_8' = -L_h^{-1}y_1,\\
&y_9' = -L_h^{-1}y_2, && y_{10}' = L_{s2}^{-1}\Big(\frac12 y_1-y_3-R_{g2}y_{10}\Big),\\
&y_{11}' = L_{s3}^{-1}\Big(-\frac12 y_1+y_4-R_{g3}y_{11}\Big), && y_{12}' = L_{s2}^{-1}\Big(\frac12 y_2-y_5-R_{g2}y_{12}\Big),\\
&y_{13}' = L_{s3}^{-1}\Big(-\frac12 y_2+y_6-R_{g3}y_{13}\Big), && y_{14}' = L_{s1}^{-1}\big(-y_1+U_{\rm in\,1}(t)-(R_i+R_{g1})y_{14}\big),\\
&y_{15}' = L_{s1}^{-1}\big(-y_2-(R_c+R_{g1})y_{15}\big), && y \in\mathbb{R}^{15},\quad y(0)=0,\quad 0\leqslant t\leqslant 10^{-3}.
\end{aligned}\tag{14}$$

Вспомогательные функции U_{D1}, U_{D2}, U_{D3}, U_{D4}, q, $U_{\text{in}\,1}$ и $U_{\text{in}\,2}$ задаются формулами

$$\begin{aligned} U_{D1} &= y_3 - y_5 - y_7 - U_{\text{in}\,2}(t), & U_{D2} &= -y_4 + y_6 - y_7 - U_{\text{in}\,2}(t), \\ U_{D3} &= y_4 + y_5 + y_7 + U_{\text{in}\,2}(t), & U_{D4} &= -y_3 - y_6 + y_7 + U_{\text{in}\,2}(t), \quad q(U) = \gamma\bigl(e^{\delta U} - 1\bigr), \\ U_{\text{in}\,1}(t) &= 0.5\sin(2000\pi t), & U_{\text{in}\,2}(t) &= 2\sin(20000\pi t). \end{aligned}$$

Тип задачи зависит от параметра C_s. Если $C_s \neq 0$, то имеем задачу Коши для жесткой системы пятнадцати нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Если $C_s = 0$, то имеем дифференциально-алгебраическую систему индекса 2, состоящую из 11 дифференциальных и 4 алгебраических уравнений. Здесь расчеты проводились со следующими параметрами: $C = 1.6 \times 10^{-8}$, $C_s = 2 \times 10^{-9}$, $C_p = 10^{-8}$, $L_h = 4.45$, $L_{s1} = 0.002$, $L_{s2} = 5 \times 10^{-4}$, $L_{s3} = 5 \times 10^{-4}$, $\gamma = 40.67286402 \times 10^{-9}$, $R = 25000$, $R_p = 50$, $R_{g1} = 36.3$, $R_{g2} = 17.3$, $R_{g3} = 17.3$, $R_i = 50$, $R_c = 600$, $\delta = 17.7493332$.

Решение задачи (14) осуществлялось построенным алгоритмом ADDNA3 с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби, т.е. в численной формуле (4) использовалась диагональная матрица D со следующими элементами $d_{i,i}$ на диагонали:

$$\begin{aligned} &Q_{\text{pud1}} = \gamma\delta\exp(\delta U_{D1}), && Q_{\text{pud2}} = \gamma\delta\exp(\delta U_{D2}), \\ &Q_{\text{pud3}} = \gamma\delta\exp(\delta U_{D3}), && Q_{\text{pud4}} = \gamma\delta\exp(\delta U_{D4}), \\ &d_{1,1} = d_{2,2} = -\frac{1}{CR}, && d_{8,8} = d_{9,9} = 0, \\ &d_{3,3} = \frac{1}{C_s}(-Q_{\text{pud1}} - Q_{\text{pud4}}), && d_{4,4} = \frac{1}{C_s}(-Q_{\text{pud2}} - Q_{\text{pud3}}), \\ &d_{5,5} = \frac{1}{C_s}(-Q_{\text{pud1}} - Q_{\text{pud3}}), && d_{6,6} = \frac{1}{C_s}(-Q_{\text{pud2}} - Q_{\text{pud4}}), \\ &d_{7,7} = \frac{1}{C_p}(-Q_{\text{pud1}} - Q_{\text{pud2}} - Q_{\text{pud3}} - Q_{\text{pud4}} - 0.02), && d_{10,10} = d_{12,12} = -\frac{R_{g2}}{L_{s2}}, \\ &d_{11,11} = d_{13,13} = -\frac{R_{g3}}{L_{s3}}, && d_{14,14} = -\frac{1}{L_{s1}}(R_i + R_{g1}),\ d_{15,15} = -\frac{1}{L_{s1}}(R_c + R_{g1}). \end{aligned}$$

Сравнение эффективности построенного алгоритма ADDNA3 при задаваемой точности расчетов $\varepsilon = 10^{-2}$ проводилось с методом Гира DLSODE в реализации Хиндмарша из коллекции ODEPACK [10]. Так как при диагональной аппроксимации матрицы Якоби вычислительные затраты алгоритма ADDNA3 практически такие же, как и в явных методах, то сравнение эффективности также проводилось с известным явным методом Мерсона [15] четвертого порядка точности.

Решение задачи (14) алгоритмом ADDNA3 вычислено с затратами if $= 60\,915$, при вычислениях по схеме (5) — if $= 97\,464$. Применение матрицы D при вычислении четвертой стадии в схеме (4) приводит к повышению эффективности по сравнению с методом (5) примерно в полтора раза. При расчетах программой DLSODE требуемая точность 10^{-2} достигается при задаваемой точности 10^{-4} с затратами if $= 8\,796$ и ij $= 1\,002$. По времени счета ADDNA3 эффективнее DLSODE примерно в 1.6 раза. Такая незначительная разница во времени связана с относительно небольшой размерностью задачи. Для метода Мерсона вычислительные затраты if $= 149\,951$.

8. Заключение. Цель расчетов заключалась в исследовании эффективности аддитивных методов с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби. Тестовая задача является слишком жесткой для явных методов, особенно для алгоритмов без контроля устойчивости численной схемы. В то же время построенный алгоритм с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби по сути является явным, что позволяет расширить границы применимости явных численных формул. Кроме задач механики сплошной среды схему (4) можно применять для решения локально-неустойчивых задач, причем $\varphi(t, y)$ в этом случае отвечает за собственные значения матрицы Якоби с положительными вещественными частями. В отличие от L-устойчивых методов, у которых область неустойчивости обычно небольшая и которые являются L-устойчивыми не только в левой, но и в правой полуплоскости комплексной плоскости, явные методы типа Рунге–Кутта являются неустойчивыми практически во всей правой полуплоскости, и поэтому они более предпочтительны при определении неустойчивого решения. В схеме (4) часть стадий по сути вычисляется по явным методам типа Рунге–Кутта, что обеспечивает неустойчивость в правой полуплоскости комплексной плоскости. Для локально-неустойчивых задач в ряде случаев разделение правой части системы обыкновенных дифференциальных уравнений на функции $\varphi(t, y)$ и $g(t, y)$ из физических соображений тоже не вызывает особых трудностей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Cooper G.J., Sayfy A.* Additive Runge–Kutta methods for stiff ordinary differential equations // Mathematics of Computation. 1983. **40**, N 161. 207–218.
2. *Новиков Е.А.* Неоднородный метод второго порядка для жестких систем // Вычислительные технологии. 2005. **10**, № 2. 74–86.
3. *Новиков Е.А., Тузов А.О.* Неоднородный метод третьего порядка для аддитивных жестких систем // Математическое моделирование. 2007. **19**, № 6. 61–70.
4. *Новиков Е.А.* Аддитивный метод третьего порядка для решения жестких неавтономных задач // Сиб. журн. индустриальной матем. 2010. **XIII**, № 1 (41). 84–94.
5. *Новиков Е.А.* Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997.
6. *Новиков Е.А.* Конструирование областей устойчивости явных методов типа Рунге–Кутта // Вычислительные методы и программирование. 2009. **10**. 248–257.
7. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.
8. *Новиков Е.А., Двинский А.Л.* Замораживание матрицы Якоби в методах типа Розенброка // Вычислительные технологии. 2005. **10**. 108–114.
9. *Gear C.W.* The automatic integration of stiff ordinary differential equations // Proc. IFIP Congress, 1968. Amsterdam: North Holland, 1969. 81–85.
10. *Byrne G.D., Hindmarsh A.C.* Stiff ODE solvers: a review of current and coming attractions // J. of Comput. Physics. 1986. N 70. 1–62.
11. *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. 1963. N 5. 329–330.
12. *Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И.* Одношаговые безытерационные методы решения жестких систем // Докл. АН СССР. 1988. **301**, № 6. 1310–1314.
13. *Kampowski W., Rentrop P., Schmidt W.* Classification and numerical simulation of electric circuits // Surveys on Mathematics for Industry. 1992. № 2 (1). 23–65.
14. *Новиков Е.А.* Численное моделирование кольцевого модулятора (3,2)-методом решения жестких задач // Информатика и системы управления. 2011. № 1 (27). 50–61.
15. *Merson R.H.* An operational methods for integration processes // Proc. Symp. on Data Proc. Weapons Research Establishment. Salisbury, Australia, 1957.

Поступила в редакцию
03.09.2012