

УДК 519.62

© Г. Г. Исламов, Ю. В. Коган

gislamov@udm.ru, kyvrak@udmnet.ru

ОБ ОДНОМ ОБОБЩЕНИИ МЕТОДА РУНГЕ–КУТТЫ

Ключевые слова: аппроксимация Паде, управление спектром, функция Вайнштейна–Ароншайна, одноранговые возмущения.

Abstract. There are offered to select the coefficients of one Runge–Kutta method generalization with regard to the value of relative error for linearized system of ordinary differential equations. Unlike the known versions of Runge–Kutta methods it is lead to Pade approximation not in zero, but in point nearest the spectrum of multiplied to mesh width the Jacobi matrix in the current mesh point.

Рассмотрим задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y(0) = y_0, \quad y'(t) = f(t, y(t)), \quad t \in [0, \Delta]. \quad (1)$$

Здесь $y : [0, \Delta] \rightarrow C^m$ есть абсолютно непрерывная вектор-функция, $f : [0, \Delta] \times C^m \rightarrow C^m$ удовлетворяет условию существования и единственности решения рассматриваемой задачи, C — поле комплексных чисел.

Равномерной сетке $t_n = n\tau, \tau = \Delta/N, n = 0, \dots, N$ отвечает последовательность значений $y_n = y(t_n)$ решения задачи (1).

В качестве приближения к этой последовательности возьмём последовательность векторов z_n , формируемую по правилу

$$\begin{aligned} z_0 &= y_0, \quad z_{n+1} = a_0 z_n + \tau \sum_{i=1}^s b_i k_i, \\ k_i &= f(t_n + c_i h, a_i z_n + \tau \sum_{j=1}^s d_{ij} k_j), \quad i = 1, \dots, s, \end{aligned} \quad (2)$$

Если $a_i = 1, i = 0, \dots, s$, то получим s -этапный одношаговый метод Рунге-Кутты, рассмотренный в монографии ([1], с. 69).

Числовые параметры $b_i, c_i, a_i, d_{ij}, i, j = 1, \dots, s$ выбираются из условия однозначной разрешимости задачи (2) относительно неизвестных векторов $k_i, i = 1, \dots, s$ и выполнения условий численной устойчивости и сходимости последовательности $\{z_n = z_n(h)\}_0^N$ к $\{y_n\}_0^N$ при $h \rightarrow 0$. В этой заметке правило выбора указанных параметров будет формулироваться для линейных однородных систем большой размерности, возникающих при дискретизации дифференциальных операторов по пространственным переменным при численном решении уравнений математической физики.

Пусть сначала

$$f(t, y) = \lambda y, \quad (3)$$

где λ есть комплексный параметр. Тогда решение задачи (1) даётся формулой $y(t) = e^{\lambda t} y_0$ и, следовательно, $y_n = e^{n\xi} y_0$, где $\xi = \lambda\tau$ — комплексный параметр. В предположении (3) итерационный процесс (2) принимает вид

$$z_{n+1} = a_0 z_n + \tau \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad k_i = \lambda(a_i z_n + \tau \sum_{j=1}^s d_{ij} k_j), \quad i = 1, \dots, s. \quad (4)$$

Если ввести столбцы $b = (b_1, \dots, b_s)^T, a = (a_1, \dots, a_s)^T$ и матрицы $k = (k_1, \dots, k_s), D = (d_{ij})_{i,j=1}^s$, то в векторно-матричных обозначениях (4) запишется в виде

$$z_{n+1} = a_0 z_n + \tau k \cdot b, \quad k = \lambda z_n \cdot a^T + k \xi D^T. \quad (5)$$

Ограничиваясь такими значениями $\xi = \lambda\tau$, для которых обратная матрица $(E - \xi D^T)^{-1}$ существует, можно из второго уравнения выразить матрицу $k = \lambda z_n a^T (E - \xi D^T)^{-1}$ и исключить её из первого уравнения

$$z_{n+1} = (a_0 + \xi a^T (E - \xi D^T)^{-1} b) z_n = R(\xi) z_n, \quad z_0 = y_0,$$

где $R(\xi) = a_0 + \xi a^T (E - \xi D^T)^{-1} b = a_0 + \xi b^T (E - \xi D)^{-1} a$. Так как для $\tilde{b} = b/a_0$

$$R\left(\frac{1}{t}\right) = a_0(1 + \tilde{b}^T (tE - D)^{-1} a) = a_0 \det(E + (tE - D)^{-1} a \tilde{b}^T)$$

и

$$tE - (D - a \tilde{b}^T) = (tE - D)(E + (tE - D)^{-1} a \tilde{b}^T),$$

то $R\left(\frac{1}{t}\right) = a_0 W(t)$, где

$$W(t) = \frac{\det(tE - (D - a \tilde{b}^T))}{\det(tE - D)}$$

есть функция Вайнштейна-Ароншайна (см. [2]) аргумента t , отвечающая одноранговому возмущению $D - a \tilde{b}^T$ матрицы D . Как известно (см. [3]), все собственные значения матрицы D , геометрическая кратность которых больше единицы, обязательно будут собственными значениями однорангового возмущения $D - a \tilde{b}^T$. Это следует учитывать при выборе матрицы D итерационного процесса (2). Далее, из того, что

$$z_n = [R(\xi)]^n y_0 = \left(\frac{R(\xi)}{e^\xi}\right)^n y_n,$$

получаем величину относительной погрешности результата

$$\frac{\|y_n - z_n\|}{\|y_n\|} = \left|1 - \left(\frac{R(\xi)}{e^\xi}\right)^n\right| < \delta, n = 1, \dots, N, \quad (6)$$

где δ есть верхняя граница относительной погрешности.

Пусть теперь $f(x, y) = \Lambda \cdot y$, где Λ — постоянная матрица $m \times m$. Обобщим полученный результат на этот случай. Второе из соотношений (5) примет тогда вид

$$k = \Lambda z_n a^T + \tau \Lambda k D^T. \quad (7)$$

Если подставить во второе слагаемое в (7) вместо k его выражение из этого же соотношения и повторять эту операцию, то получим

$$k = \Lambda z_n a^T + \tau \Lambda^2 z_n a^T D^T + \tau^2 \Lambda^2 k (D^T)^2 = \dots = \sum_{j=0}^p \tau^j \Lambda^{j+1} z_n a^T (D^T)^j + \tau^{p+1} \Lambda^{p+1} k a^T (D^T)^{p+1}.$$

Если

$$|\tau| \|\Lambda\| \|D^T\| < 1, \quad (8)$$

то приведенные выше рассуждения показывают, что единственным решением относительно k уравнения (7) является

$$k = \sum_{j=0}^{\infty} \tau^j \Lambda^{j+1} z_n a^T (D^T)^j \quad (9)$$

(то что k является решением (7) проверяется непосредственно). Подставляя (9) в первое из соотношений (5), получим

$$z_{n+1} = a_0 z_n + \sum_{j=0}^{\infty} \tau^{j+1} \Lambda^{j+1} z_n a^T (D^T)^j b.$$

Обозначим скалярную величину $a^T (D^T)^j b$ через p_{j+1} , $j = 0, 1, \dots$

и заметим, что $R(\zeta) = a_0 + \sum_{j=1}^{\infty} p_j \zeta^j$, $\zeta \in C$. Тогда, при условии (8),

$z_n = [R(\tau \Lambda)]^n y_0$. Так как решение задачи (1) даётся формулой $y(t) = e^{\Lambda t}$, то $y_n = e^{\tau \Lambda n} y_0$ и

$$\frac{\|y_n - z_n\|}{\|y_n\|} = \frac{\|(e^{\tau \Lambda n} - [R(\tau \Lambda)]^n) y_0\|}{\|y_n\|} \leq \|E - [R(\tau \Lambda) e^{-\tau \Lambda}]^n\|.$$

(мы воспользовались тем, что $R(\tau \Lambda)$ и $e^{\tau \Lambda}$ коммутируют). По теореме об отображении спектра функции от оператора (см. [4]),

спектр матрицы $E - [R(\tau\Lambda)e^{-\tau\Lambda}]^n$ представляет собой множество значений функции $1 - \left(\frac{R(\xi)}{e^\xi}\right)^n$, когда $\xi \in \tau\sigma(\Lambda)$, где $\sigma(\Lambda)$ — множество собственных значений матрицы Λ . Таким образом, выполнение неравенства (6) для всех собственных значений λ матрицы Λ обеспечивает заданную относительную погрешность δ метода Рунге-Кутты, если норма в C^m выбрана так, что норма матрицы $E - [R(\tau\Lambda)e^{-\tau\Lambda}]^n$ сколь угодно близка к спектральному радиусу этой матрицы (см.[5]).

Неравенство (6) указывает на целесообразность выбора в качестве $R(\xi)$ аппроксимации Паде (см.[6]) экспоненциальной функции e^ξ в некоторой точке ξ^* , в которой достигается минимум относительно ξ величины $\max_{\lambda \in \sigma(\Lambda)} |\xi - \tau\lambda|$. Нетрудно видеть, что

ξ^* не может отклониться от центра масс системы точек $\tau\sigma(\Lambda)$ на расстояние большее чем величина упомянутого минимума. Поэтому, при вычислениях можно брать $\xi^* = \text{trace}(\tau\Lambda)/m$. Следует отметить, что многочлены числителя и знаменателя аппроксимации Паде $R(\xi) = P(\xi)/Q(\xi)$ функции e^ξ имеют простые корни. Так как функция Вайнштейна-Ароншайна $W(t)$ имеет вид отношения $P(1/t)/(a_0Q(1/t))$, то матрицы D и $D - a\tilde{b}^T$ должны быть матрицами простой структуры с различными собственными значениями. В качестве матрицы D можно взять, например, матрицу Фробениуса многочлена $t^sQ(1/t)$. Далее, $t^sP(1/t)/a_0$ есть характеристический многочлен возмущенной матрицы $D - a\tilde{b}^T$.

Укажем одно из правил выбора столбцов a и $b = a_0\tilde{b}$ метода (2). Запишем спектральное разложение матрицы $D = \sum_{i=1}^s \mu_i u_i v_i^T$,

где u_i и v_i^T соответственно правый и левый собственные векторы, отвечающие собственному значению μ_i матрицы D , причём $v_i^T u_i = 1$. Заметим, что $\mu_1, \dots, \mu_s$ есть система различных корней многочлена $t^sQ(1/t)$. Пусть $\nu_1, \dots, \nu_s$ есть система различных

корней многочлена $t^s P(1/t)/a_0$. Тогда

$$W(t) = \prod_{j=1}^s \frac{(t - \nu_j)}{(t - \mu_j)} = 1 + \tilde{b}^T (tE - D)^{-1} a =$$

$$1 + \sum_{i=1}^s \frac{1}{t - \mu_j} \tilde{b}^T u_i v_i^T a = 1 + \sum_{i=1}^s \frac{1}{t - \mu_j} v_i^T a \tilde{b}^T u_i.$$

Отсюда получаем систему для определения столбцов a и $\tilde{b}$:

$$v_i^T a \tilde{b}^T u_i = \frac{\prod_{j=1}^s (\mu_i - \nu_j)}{\prod_{j=1, j \neq i}^s (\mu_i - \mu_j)}, \quad i = 1, \dots, s.$$

Список литературы

1. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жёстких нелинейных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1988. 334 с.
2. Гулд С. Вариационные методы в задачах о собственных значениях. Введение в метод промежуточных задач Вайнштейна. М.: Мир, 1970. 328 с.
3. Исламов Г.Г. Экстремальные возмущения замкнутых операторов // Изв. вузов. Математика. 1989. № 1. С. 35–41.
4. Като Т. Теория возмущений линейных операторов. М.: Мир, 1972. 740 с.
5. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989. 430 с.
6. Бейкер Дж., мл., Грейвс–Моррис П. Аппроксимации Паде. М.: Мир, 1986. 502 с.