

А.С. Холодов, А.И. Лобанов, А.В. Евдокимов

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ
ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ
В ПРОСТРАНСТВЕ
НЕОПРЕДЕЛЕННЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Предисловие

Данная книга написана на основе конспекта односеместрового курса лекций, под несколько иным названием читаемого на факультетах управления и прикладной математики (ФУПМ) и аэрофизики и космических исследований (ФАКИ) Московского физико-технического института (на ФУПМ с 1985 года). Лекции поддерживаются лабораторным практикумом из 8 работ по соответствующим разделам курса. В общем “вычислительном” образовании студентов ФУПМ эти лекции стоят между вводным курсом вычислительной математики (в объеме книг [1,2]) и фундаментальным курсом теории разностных схем (в объеме книги [3]). Это обстоятельство, а также естественное желание возможно большего охвата идей и конкретных разностных схем из всего огромного числа разработанных к настоящему времени, определило содержание и характер изложения материала данного курса.

В качестве основного подхода к построению разностных схем для простейших (модельных) уравнений принят известный метод неопределенных коэффициентов (позволяющий рассматривать достаточно обширные семейства схем), дополненный анализом этих семейств в пространстве неопределенных коэффициентов. Анализ разностных схем в пространстве коэффициентов (предложенный в [4]) оказался достаточно универсальным и весьма конструктивным средством не только для качественного сравнения различных схем (типа: устойчива – неустойчива, монотонна – немонотонна, первого – второго порядка аппроксимации и т.п.) но, в определенном смысле, и количественного их сопоставления (например, в смысле “расстояния” между схемами в пространстве неопределенных коэффициентов, если принять достаточно естественную гипотезу о том, что близкие в таком пространстве схемы близки и по своим свойствам).

Поскольку курс в целом ориентирован на методы решения нелинейных дифференциальных уравнений, характерной чертой которых являются разрывные решения, области

больших градиентов (“пограничные слои”) и т.п., достаточно большое внимание уделено построению монотонных (мажорантных) схем. При переходе от модельных уравнений к линейным системам и нелинейным уравнениям в курсе активно используются характеристические свойства уравнений гиперболического типа и аналогичные методы расщепления для других типов уравнений, интегро-интерполяционный метод (метод интегрального тождества) и другие эффективные способы обобщения схем с сохранением заложенных в модельные схемы свойств.

1. Численное интегрирование жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

1.1. Жесткие ОДУ

1.1.1. Линейные однородные уравнения первого порядка

Рассмотрим вначале простейшее уравнение

$$u_t = \lambda \cdot u, \lambda = \text{const} \quad (1)$$

на отрезке

$$0 \leq t \leq T \quad (2)$$

и задачу Коши для (1)

$$u(0) = u_0 \quad (3)$$

Решение (1)-(3), очевидно,

$$u(t) = u_0 \cdot e^{\lambda t} \quad (4)$$

Если $\lambda > 0$, имеем неограниченное (неустойчивое) решение (рис. 1.1).

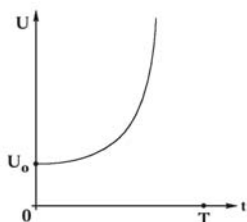


Рис. 1.1.

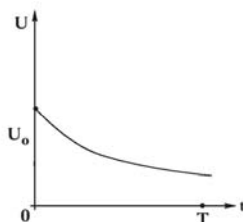


Рис. 1.2.

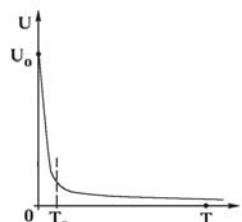


Рис. 1.3.

В этом случае нет ничего, что могло бы в аналогичных, но более сложных случаях (нелинейные системы) облегчить жизнь вычислителю. Надо интегрировать (1) с шагом по времени, обеспечивающим необходимую точность до тех пор, пока это возможно. Если $\lambda < 0$, то решение задачи (1)-(3) ограниченное ($u(\infty) = 0$). С точки зрения вычислителя важна величина отрезка интегрирования T . Если $|\lambda|T \sim 1$, то имеем обычную ситуацию (рис. 1.2), можно пользоваться стандарт-

ными методами численного интегрирования (Эйлера, Эйлера–Коши, Рунге–Кутты, Адамса и т.д.). Если $|\lambda|T \sim 10$, то имеем решение типа “пограничного слоя” (рис. 1.3) с резким изменением u на малом (в масштабе T) отрезке $[0, T_0]$. В аналогичных, но более сложных ситуациях (когда положение “пограничного слоя” заранее неизвестно и т.д.) при численном интегрировании возникают осложнения, которые и будут рассмотрены позднее. Основная идея заключается в том, чтобы численный метод обеспечивал качественно правильное поведение численного решения на участке “пограничного слоя” (при $0 \leq t \leq T_0$), т.е. быстрое затухание, и возможно точнее воспроизводил решение на основном участке интегрирования $T_0 \leq t \leq T$ (вне “пограничного слоя”).

1.1.2. Системы линейных однородных уравнений

Пусть имеется J уравнений (1)

$$u_{jt} = \lambda_j \cdot u_j, \lambda_j = \text{const}, j = 1, \dots, J \quad (5)$$

с начальными условиями $u_j(0) = u_{j0}, 0 \leq t \leq T$.

Если обозначить

$$u = \{u_1, \dots, u_j\}, \Lambda = \{\lambda_j\} = \begin{Bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_j \end{Bmatrix},$$

и перейти к векторной форме

$$u_t = \Lambda \cdot u, \quad (6)$$

то, сделав замену $u = \Omega \cdot v$, где

$$\Omega = \{\omega_j\} = \begin{Bmatrix} \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \omega_{11} & \dots & \omega_{1j} \\ \dots & \dots & \dots \\ \omega_{j1} & \dots & \omega_{jj} \end{Bmatrix}, \det \Omega \neq 0, v = \Omega^{-1}u,$$

т.е. полагая $u_j = \omega_j v$, получим вместо (6) однородную линейную систему ОДУ

$$v_t = Av, A = \{a_{jk}\} = \Omega^{-1} \Lambda \Omega, a_{jk} = \text{const}. \quad (7)$$

Так как $u_t = (\Omega \cdot v)_t = \Lambda u = \Lambda(\Omega \cdot v)$, то $\Omega v_t = (\Lambda \Omega)v$ или $v_t = (\Omega^{-1} \Lambda \Omega)v$.

Наоборот, если задана система (7), то умножая ее скалярно J раз на левые собственные векторы ω_j матрицы A , определяемые, как это следует из (7), с точностью до их длины, из J линейных однородных систем

$$\omega_j (A - \lambda_j E) = 0 \quad \text{или} \quad (A^T - \lambda_j E) \omega_j = 0 \quad (8)$$

приходим к эквивалентной (7) совокупности уравнений (5), связанных друг с другом только через начальные условия

$$v(0) = v_0 \quad \text{или} \quad u_j(0) = \omega_j v(0) = u_{j0}. \quad (9)$$

Здесь λ_j – собственные значения матрицы A , т.е. корни характеристического уравнения

$$P_j(\lambda) = \det(A - \lambda E) = 0, \quad (10)$$

$P_j(\lambda)$ – многочлен степени J .

Решение каждого из уравнений (5) имеет вид (4), т.е. $u_j(t) = u_{j0} e^{\lambda_j t}$, а значит, решение задачи Коши (7),(9) есть

$$v(t) = \Omega^{-1} u(t) = \Omega^{-1} \{u_{j0} e^{\lambda_j t}\} = \Omega^{-1} \left\{ \begin{array}{c} u_{10} e^{\lambda_1 t} \\ \dots \\ u_{j0} e^{\lambda_j t} \end{array} \right\}, \quad \text{т.е. является ли-}$$

нейной комбинацией экспонент (если все λ_j действительны) или имеет более сложный характер с присутствием гармонических составляющих (если среди λ_j будут комплексно-сопряженные корни уравнения (10)).

1.1.3. Пример: задача Коши для линейного однородного уравнения второго порядка

$$\mu \cdot u_{tt} + a \cdot u_t + b \cdot u = 0, \quad u(0) = u_0, \quad u_t(0) = u_1$$

(μ, a, b – константы). Обозначим $u_t = \omega$ и введем вектор

$$v = \{v_1, v_2\} = \{u, \omega\}, \quad \text{тогда}$$

$$u_t = \omega,$$

$$\omega_t = -\frac{b}{\mu}u - \frac{a}{\mu}\omega$$

или, в векторной форме,

$$v_t = A \cdot v, \quad A = \begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{b}{\mu} & -\frac{a}{\mu} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ -\lambda_1 \lambda_2 & \lambda_1 + \lambda_2 \end{Bmatrix},$$

где λ_1, λ_2 – собственные значения матрицы A из (10):

$$\det(A - \lambda E) = 0 \quad (\mu \lambda^2 + a \cdot \lambda + b = 0),$$

$$\lambda_{1,2} = \left(-a \pm \sqrt{a^2 - 4\mu b} \right) / 2 \cdot \mu.$$

При $|a| \sim |b| \sim 1, \quad 0 < \mu \ll 1$ приближенно имеем

$\lambda_1 \approx -b/a, \quad |\lambda_1| \sim 1; \quad \lambda_2 \approx -a/\mu, \quad |\lambda_2| \gg 1$. Далее, из (8)

$$\Omega = \begin{Bmatrix} \omega_1 \\ \dots \\ \omega_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1, -1/\lambda_2 \\ \dots \\ 1, -1/\lambda_1 \end{Bmatrix}, \quad \Omega^{-1} = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \cdot \begin{Bmatrix} -\lambda_2, \lambda_1 \\ \dots \\ -\lambda_1 \lambda_2, \lambda_1 \lambda_2 \end{Bmatrix},$$

$$\det \Omega = (\lambda_1 - \lambda_2) / \lambda_1 \lambda_2 \neq 0 \quad \text{при } \lambda_1 \neq \lambda_2.$$

Тогда, учитывая, что $u = \Omega \cdot v = \{u - \omega / \lambda_2, u - \omega / \lambda_1\}$, получаем:

$$v(t) = \begin{Bmatrix} u(t) \\ \omega(t) \end{Bmatrix} = \Omega^{-1} \cdot \begin{Bmatrix} (u_0 - u_1 / \lambda_2) e^{\lambda_1 t} \\ (u_0 - u_1 / \lambda_1) e^{\lambda_2 t} \end{Bmatrix},$$

$$u(t) = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} [(-\lambda_1 u_0 + u_1) e^{\lambda_1 t} + (\lambda_1 u_0 - u_1) e^{\lambda_2 t}].$$

Если λ_1, λ_2 оба действительны, то имеем комбинацию двух экспонент, затухающих при $\lambda_1 < 0$ и $\lambda_2 < 0$. Если $\lambda_1 = \alpha + i\beta$, $\lambda_2 = \alpha - i\beta$, то $u(t) = e^{\alpha t} \{[(u_1 - \alpha u_0) \sin(\beta t)]/\beta + u_0 \cos(\beta t)\}$, и на экспоненту $e^{\alpha t}$ накладываются гармонические колебания с периодом $T^* \sim 1/\beta$, т.е. характер поведения решения определяется собственными значениями матрицы A .

В общем случае можно выделить следующие четыре характерных ситуации:

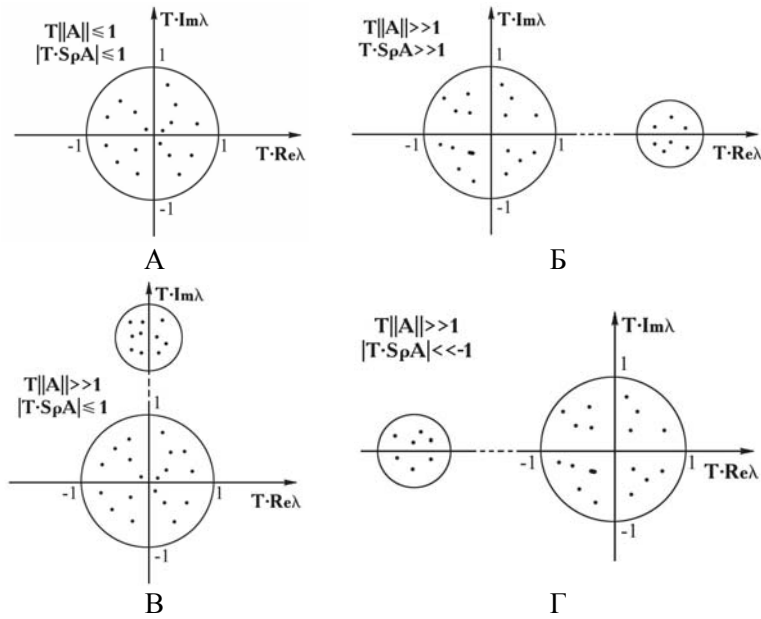


Рис. 1.4. Виды спектров матриц систем ОДУ

Случай А не доставляет вычислительно никаких хлопот, проходят стандартные методы (явные схемы Рунге–Кутты, Адамса т.п.), уже изучавшиеся в курсе вычислительной математики.

Случай Б практически безнадежен (неустойчивые по Ляпунову системы ОДУ).

Случай В довольно часто встречается на практике и для него, в принципе, есть специальные методы, основанные на осреднении быстроосциллирующих гармоник (методы осреднения и т.п.).

Случай Г мы и будем рассматривать (жесткие системы ОДУ). Для матрицы A большой размерности найти все собственные числа λ_j (полная спектральная задача) не очень просто из-за ее плохой обусловленности. Действительно, для жесткой системы число обусловленности матрицы A

$$k(A) = \max_j |\lambda_j| / \min_j |\lambda_j| \ll 1 \quad (11)$$

или, приближенно, $\|A\|T \gg 1$, и отсюда идут все неприятности. Здесь и в дальнейшем $\|\cdot\|$ – норма матрицы.

1.1.4. Нелинейные жесткие уравнения

Рассмотрим одно сингулярно возмущенное уравнение

$$\mu u_t = f(t, u), \quad 0 < \mu \ll 1,$$

$$\partial f / \partial u = u_0, \quad u(t_0) = u_0, \quad t_0 \leq t \leq T \quad (12)$$

В случае если предельное (вырожденное) уравнение (12) при $\mu = 0$

$$f(t, \tilde{u}) = 0$$

при каждом значении t имеет единственное решение

$$\tilde{u}(t) = \varphi(t), \quad (13)$$

и в окрестности этого предельного решения $\partial f / \partial u < 0, |f_u| \sim 1$ (условие устойчивости решений (12)), имеем ситуацию, изображенную на рис. 1.5. Аналогичная ситуация была и в примере 1.1.3 при малых μ (в том случае предельное уравнение было $au_t + bu = 0$). Как и в линейном случае, поведение решения разделяется на два характерных участка: пограничный слой для малых $t_0 \leq t \leq T_0$ (его длина

$T_0 - t_0 \sim 1/\max_j |\lambda_j|$), и близкое к предельному решению (13) поведение при $T_0 \leq t \leq T$. Обычно определяемый “физикой задачи” участок интегрирования $T \sim 1/\min_j |\lambda_j| \gg T_0 - t_0$.

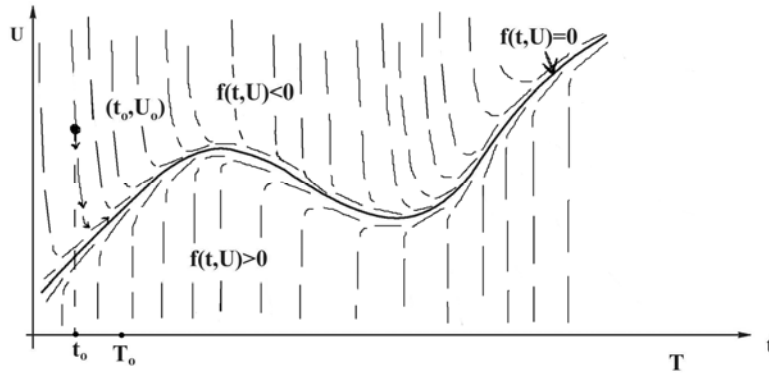


Рис. 1.5. Поле решений уравнения (12)

1.1.5. Пример: сингулярно возмущенная нелинейная система второго порядка

Рассмотрим следующую автономную (правая часть не зависит от времени) систему двух нелинейных уравнений:

$$\begin{aligned} x_t &= \varphi(x, y) / \mu, \quad x(0) = x_0, \quad y(0) = y_0, \quad 0 < \mu \ll 1, \quad 0 \leq t \leq T, \\ y_t &= \phi(x, y), \quad |\varphi_x| \sim |\varphi_y| \sim |\phi_x| \sim |\phi_y| \sim O(1) \ll 1/\mu. \end{aligned} \quad (14)$$

Убедимся, что система жесткая. Записав (14) в векторной форме $u = \{x, y\}$, $f = \{\varphi / \mu, \phi\}$, $A = \begin{Bmatrix} \varphi_x / \mu & \varphi_y / \mu \\ \varphi_x & \varphi_y \end{Bmatrix}$, имеем:

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda E) &= \begin{vmatrix} \varphi_x / \mu & \varphi_y / \mu \\ \varphi_x & \varphi_y - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \text{или} \\ \mu \lambda^2 - (\varphi_x + \mu \cdot \phi_y) \lambda + \varphi_x \phi_y - \phi_x \varphi_y &= 0. \end{aligned}$$

Если μ мало, то $\lambda_1 \approx \varphi_x / \mu$, $\lambda_2 \approx \varphi_x \phi_y - \phi_x \varphi_y$. Видно, что $|\lambda_2| \sim O(1)$, $\lambda_1 \ll -1$ при $\varphi_x < 0$, поэтому λ_2 называют нормальной частью спектра, а λ_1 – жесткой частью спектра.

Предельное уравнение:

$$\begin{aligned} \varphi(\tilde{x}, \tilde{y}) &= 0 \text{ или } \tilde{x} = g(\tilde{y}), \\ \tilde{y}_t &= \phi(g(\tilde{y}), \tilde{y}) = r(\tilde{y}), \quad \tilde{y}(0) = y_0. \end{aligned} \quad (15)$$

В случае уравнения Ван дер Поля

$$\varphi(x, y) = y - x^3 / 3 + x; \quad \phi(x, y) = -x \quad (16)$$

(которое важно во многих приложениях, например, в радиотехнике), получаем предельное уравнение $\tilde{y} = \tilde{x}^3 / 3 - \tilde{x}$ и поле решений в фазовой плоскости, изображённое на рис. 1.6.

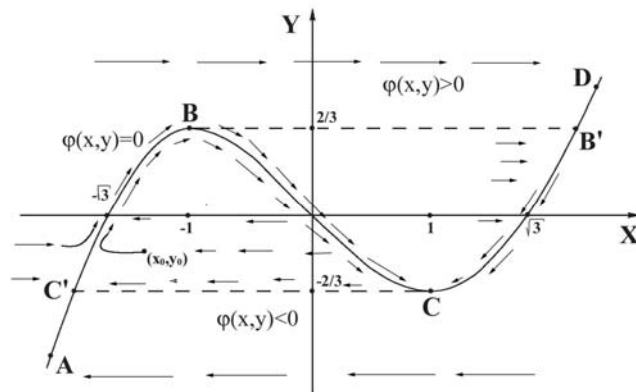


Рис. 1.6. Поле решений уравнения Ван дер Поля

Вдали от линии $\tilde{y} = \tilde{x}^3 / 3 - \tilde{x}$ имеем почти горизонтальное поле направлений $\{dx, dy\} = \{\varphi / \mu, \phi\}$, на самой линии выделяются две устойчивые ветви AB и CD и одна неустойчивая ветвь BC . При любых начальных значениях $\{x_0, y_0\}$ траектория этой системы – замкнутая кривая $BB'CC'$.

1) На участке $0 \leq t \leq T_0 \sim \mu$ траектория почти горизонтальна и приближенно определяется уравнениями:

$$x_t = \varphi(x_0, y_0) / \mu, \quad x(0) = x_0, \quad y(t) \approx y_0 \quad (17)$$

(пограничный слой).

2) При $T_0 \leq t \leq T_B$, $\varphi \approx 0$ и система описывается предельными уравнениями (16) (квазистационарный режим вплоть до точки B). Если и после т. B пользоваться предельными уравнениями (16), то мы бы двигались по BC . Но реальная система на этом участке неустойчива и система сходит с этой ветви на ветвь $DB'C$. На этом участке $\lambda_1 = 0$ и решение определяется поведением λ_2 .

3) Опять пограничный слой (17) при $T_B \leq t \leq T_{B'}$, за ним квазистационарное движение на участке $B'C$ при $T_{B'} \leq t \leq T_{C'}$, пограничный слой и т.д. (все повторяется).

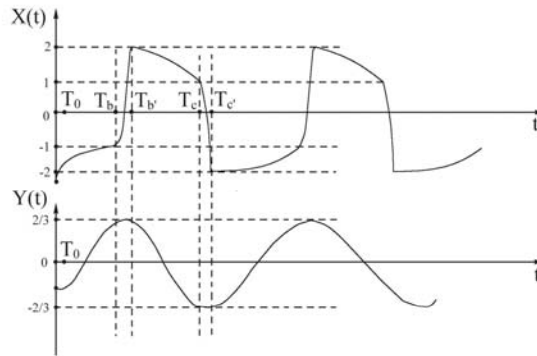


Рис. 1.7. Компоненты решения уравнения Ван дер Поля в зависимости от времени.

1.1.6. Произвольная система нелинейных уравнений

В случае задачи Коши для общей системы нелинейных уравнений

$$v_t = f(t, v), \quad 0 \leq t \leq T, \quad v(0) = v_0,$$

$$A = \partial f / \partial v = \begin{Bmatrix} \partial f_1 / \partial v_1 & \cdots & \partial f_1 / \partial v_j \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \partial f_j / \partial v_1 & \cdots & \partial f_j / \partial v_j \end{Bmatrix}, \quad (18)$$

поведение ее решения вблизи некоторой точки $\{t_0, v_0\}$ определяется матрицей Якоби A .

Определение 1.1. Система называется жесткой, если для всех t, v (т.е. на решениях (18)), собственные значения матрицы A удовлетворяют условиям:

$$\max_j |\operatorname{Re} \lambda_j| / \min_k |\operatorname{Re} \lambda_k| \gg 1, \quad \operatorname{Re} \lambda_j < 0,$$

$$\max_j |\operatorname{Im} \lambda_j| \ll \max_k |\operatorname{Re} \lambda_k|, \quad j, k = 1, \dots, J.$$

(т.е. расположены как на рис. 1.4Г). Для оценки $\max_j |\lambda_j|$ можно взять легко вычисляемую величину нормы матрицы A , для оценки $\max_j |\operatorname{Re} \lambda_j|$ – величину следа матрицы

$$Sp(A) = \sum_{j=1}^J a_{jj} = \sum_{j=1}^J \lambda_j; \quad \min_j |\operatorname{Re} \lambda_j|$$
 можно заменить на величину $1/T$, определяемую обычно из физики задачи. То есть

простейшим критерием жесткости системы могут служить неравенства $T\|A\| \gg 1$, $Sp(A) \ll -1$ (иногда ограничиваются даже одним условием (11)), однако надежных простых способов нет, и поэтому нужны численные методы, работающие без проверок на жесткость.

1.2. Примеры простейших разностных схем для жестких ОДУ

1.2.1. Способы построения схем

При численном решении задачи (18) с помощью разностных схем в некоторой последовательности точек $t_1, t_2, \dots, t_n, \dots$ вычисляются значения $v^1, v^2, \dots, v^n, \dots$. Способов вычисления (разностных схем) изобретено множество, однако, не очень сильно отличаясь по качеству получаемого численного решения в стандартном случае (рис. 1.4А), далеко не все из них пригодны для расчета жестких систем ОДУ (рис. 1.4Г). В идейном плане можно выделить три основных подхода к их построению.

1. *Одношаговые (двухточечные) методы типа Рунге–Кутты* (схемы с пересчетом или схемы предиктор–корректор), пожалуй, наиболее популярны. Многие неявные варианты этих схем пригодны и для жестких систем. Здесь для вычисления v^n требуется знание только v^{n+1} . Для неявных вариантов методов типа Рунге–Кутты косвенно используется матрица Якоби $A = \partial f / \partial v$ (несущая информацию о свойствах системы). В этих методах легко меняется шаг интегрирования $\tau = t^{n+1} - t^n$ в необходимых случаях. Могут быть построены методы достаточно высокого порядка точности. Вместе с тем требуется многократное вычисление правой части f в промежуточных точках $t^n \leq t \leq t^{n+1}$, которые при переходе к новой точке не используются.

2. *Многошаговые линейные методы* (тоже могут быть и явными и неявными). При использовании этих методов не пропадает впустую информация в предыдущих точках $t^n, t^{n+1}, \dots, t^{n+K+1}$, т.е. эти методы требуют меньшего числа вычислений f . Как и в одношаговых методах, в случае неявных схем косвенно используется информация о матрице Якоби A . Однако эти методы требуют “разгона” (вычисления дополнительных “начальных” значений в точках t^1, \dots, t^{n+K+1} ,

получаемых другими методами). Для явных схем плохо с устойчивостью, возникают трудности с изменением шага интегрирования в процессе счета.

3. Не очень распространенный, но перспективный (в том числе для жестких систем) подход, связанный с переходом к *продолженным системам*:

$$v_t = f(t, v) \rightarrow \begin{cases} v_t = w \\ w_t = \partial f / \partial t + A(t, v)w \quad (A = \partial f / \partial v) \end{cases} \quad (19)$$

Вводя расширенный искомый вектор $u = \{v, w\}$, получаем для него уравнение

$$u_t = B(t, v)u + r(t, v), \text{ где}$$

$$B = \begin{Bmatrix} 0 & E \\ 0 & A(t, v) \end{Bmatrix}, r = \begin{Bmatrix} 0 \\ \partial f / \partial t \end{Bmatrix},$$

($r = 0$, если f явно не зависит от t , т.е. в случае автономной системы). Увеличивая размерность u (т.е. вычисляя в точках $t = t^n$ не только v , $v_t = f$, но и $v_{tt} = \partial f / \partial t + \partial f / \partial v \cdot f$ и т.д.), этот процесс можно продолжить (конечно, если f задается аналитически и соответствующие производные от f не очень громоздки).

4. Всевозможные гибриды из 1, 2, 3 и ряд других подходов.

1.2.2. Требования к численным методам решения жестких систем ОДУ

Каким же условиям должны удовлетворять разностные схемы для решения жестких систем? Разберем на примере системы (14) два простейших метода – явный и неявный методы ломаных, называемые также схемами Эйлера.

На участке пограничного слоя (его протяженность $O(\mu)$) для воспроизведения решения пригоден практически любой обеспечивающий необходимую точность численный метод с шагом $\tau \sim 0.1\mu \div 0.01\mu$, $\tau \ll \mu$. Например, даже для явной схемы Эйлера в линейном случае (7)

$$v^{n+1} = v^n + \tau \cdot A \cdot v^n = (E + \tau \cdot A)v^n = \Omega^{-1}(E + \tau \cdot \Lambda)\Omega v^n$$

имеем из условия устойчивости $|1 + \tau \cdot \lambda_j| \leq 1, j = 1, 2, \dots$. Для примера (14), (16) (уравнение Ван дер Поля) $|1 + \tau \lambda_1| \leq 1 \rightarrow -1 \leq 1 + \tau \varphi_x \mu \leq 1 \rightarrow \tau \leq 2\mu |\varphi_x|$, что не является здесь обременительным. Общее число шагов по времени $N_1 = \mu / \tau \sim 10 \div 100$ тоже вполне приемлемо. Однако это ограничение на шаг интегрирования τ действует и на участках квазистационарного решения (С'В, В'С) и для прохождения таких участков потребуется уже $N_2 = O(1/\mu)$ шагов! А это уже неприемлемо при очень малых μ . Возможный выход – переход к решению предельной системы (15), в которой уже $\lambda_1 = \varphi_x / \mu$ не фигурирует, а условие устойчивости (конечно, линеаризованное, т.е. действующее в небольшой окрестности кривой С'ВВ'СС') $|1 + \tau \lambda_2| = |1 + \tau \phi_x / \phi_x| \leq 1$ или $\tau \leq 2|\phi_x / \phi_x|$ вполне приемлемо.

При численном решении на участках С'В и ВС' полной системы (14), (16) хорошо работает неявный метод Эйлера

$$v^{n+1} = v^n + \tau f(t^{n+1}, v^n)$$

Для решения получающейся на каждом шаге по t нелинейной относительно v^{n+1} системы

$$R(v^{n+1}) = v^{n+1} - v^n - \tau f(t^{n+1}, v^{n+1}) = 0$$

используется какой-либо итерационный метод (например, метод Ньютона).

В случае линейной системы (7) в неявном методе Эйлера

$$v^{n+1} = (E - \tau A)^{-1} v^n \quad (20)$$

условие устойчивости $|1/(1 - \tau \lambda_j)| \leq 1$ выполняется для любых τ при $\text{Re} \lambda_j \leq 0, j = 1, 2, \dots, J$. Поэтому при использовании метода (20) для задачи (14), (16) на участках С'В, ВС' нет проблем, исключая, конечно, тот факт, что матрица A плохо обусловлена для жестких систем и при обращении матрицы

$(E - \tau A)$ могут возникнуть трудности при больших τ . Проведённый анализ показывает, (да и просто по графику $x(t)$ на рис. 1.7 видно), что шаг интегрирования τ на разных участках следует выбирать разным, и численный метод должен позволять это делать достаточно просто. Это первая характерная особенность жестких систем. То есть надо уметь предсказывать момент появления пограничных слоев, а это определяется собственными значениями матрицы Якоби. Отметим также, что в неявном методе Эйлера для системы (14)

$$\mu \frac{x^{n+1} - x^n}{\tau} = \phi(x^{n+1}, y^{n+1}) \sim O(\mu),$$

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = \phi(x^{n+1}, y^{n+1}) \sim O(1),$$

т.е. приближенно мы как бы решаем предельную систему (15), так как $\phi(x^{n+1}, y^{n+1}) \approx 0$, $y^{n+1} - y^n - \tau \phi(x^{n+1}, y^{n+1}) = 0$.

Менять шаг интегрирования τ в процессе счета можно, но далеко не всегда нас интересует детальное поведение решения в пределах пограничного слоя. В таких случаях можно брать $\tau \sim \mu$ и по неявной схеме проходить пограничный слой за один шаг по времени.

Посмотрим еще, что будет происходить в неявной схеме вблизи точки В (или С) на примере уравнения Ван дер Поля (14), (16). Имеем:

$$x^{n+1} - x^n - \frac{\tau}{\mu} \phi(x^{n+1}, y^{n+1}) =$$

$$x^{n+1} - x^n - \frac{\tau}{\mu} \left[y^{n+1} - \frac{(x^{n+1})^3}{3} + x^{n+1} \right] = 0,$$

$$y^{n+1} - y^n + \tau x^{n+1} = 0.$$

Вблизи точки В с координатами $\{x^n, y^n\}$ имеем

$$g(x^{n+1}) = x^{n+1} \left(1 + \frac{\tau^2}{\mu} - \frac{\tau}{\mu} \right) + \frac{\tau}{3\mu} (x^{n+1})^3 - x^n - \frac{\tau}{\mu} y^n = 0,$$

т.е. кубическое относительно искомого x^{n+1} уравнение, решения которого изображены на рис. 1.8.

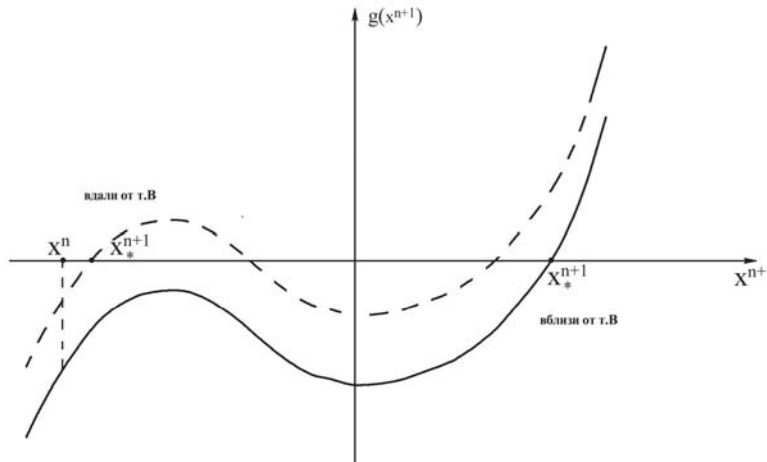


Рис. 1.8. К алгоритму расчёта уравнения Ван дер Поля по неявной схеме Эйлера

Выбор в итерационном методе в качестве начального приближения $\{x^n, y^n\}$ при решении этого кубического уравнения может не дать сходимости. Это следствие вырождения исходной системы (14), и за этим надо следить (варьируя τ и т.п.). Например, задается некоторая точность сходимости итерационного процесса и минимально (m) и максимально (M) допустимые числа итераций. Если за M итераций процесс не сходится, τ уменьшают, если сходится за меньшее, чем m число итераций, то τ увеличивают и т.д.

1.3. Одношаговые методы типа Рунге–Кутты

1.3.1. Алгоритм

Перейдем к общему случаю системы (18). Одношаговые методы типа Рунге–Кутты имеют вид

$$v^{n+1} = v^n + \tau \cdot \sum_{k=1}^K c_k r_k, \quad (21)$$

$$r_k = f\left(t^n + \tau a_k, v^n + \tau \sum_{l=1}^L b_{kl} r_l\right), a_k = \sum_{l=1}^L b_{kl}.$$

В дальнейшем для описания конкретных вариантов метода будем пользоваться таблицей Бутчера

a_1		b_{11}	b_{12}	\dots	b_{1k}
a_2		b_{21}	b_{22}	\dots	b_{2k}
\dots		\dots	\dots	\dots	\dots
a_k		b_{k1}	b_{k2}	\dots	b_{kk}
		c_1	c_2	\dots	c_k

Для явных схем Рунге–Кутты $L < k$, и таблица Бутчера выглядит следующим образом:

a_1		0	0	0	..	0	0
a_2		b_{21}	0	0	..	0	0
a_3		b_{31}	b_{32}	0	..	0	0
..	
a_k		b_{k1}	b_{k2}	b_{k3}	..	b_{k-1}	0
		c_1	c_2	c_3	..	c_{k-1}	c_k

В этом случае для расчёта v^{n+1} по v^n в соответствии с (21) имеем простые рекуррентные соотношения:

$$r_1 = f(t^n, v^n) = f^n$$

– предиктор,

$$r_2 = f(t^n + a_2 \tau, v^n + \tau b_{21} r_1) \quad (22)$$

– первый корректор и т.д.

“Полуявные” или “диагонально неявные” схемы Рунге–Кутты отличаются от явных наличием ненулевых элементов на главной диагонали таблицы Бутчера ($L \leq k$):

$$\begin{array}{c|cccc}
 a_1 & b_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 a_2 & b_{21} & b_{22} & 0 & \dots & 0 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 a_k & b_{k1} & b_{k2} & b_{k3} & \dots & b_{kk} \\
 \hline
 & c_1 & c_2 & c_3 & \dots & c_k
 \end{array}$$

В этом случае на каждом шаге по времени последовательно решаются нелинейные системы

$$R_1(r_1) = r_1 - f(t^n + a_1\tau, v^n + \tau b_{11}r_1) = 0,$$

$$R_2(r_2) = r_2 - f(t^n + a_2\tau, v^n + \tau b_{21}r_1 + \tau b_{22}r_2) = 0 \text{ и т.д.,}$$

например, методом Ньютона

$$r_1^{s+1} = r_1^s - (B_1^s)^{-1} R_1(r_1^s), s = 0, 1, \dots, B_1 = (E - \tau b_{22}r_2)$$

с неким начальным значением r_1^0 , например, $r_1^0 = f(t^n, v^n)$.

В общем случае ($L=K$), обозначая $r = \{r_1, \dots, r_k\} = \{r_{11}, \dots, r_{1j}, r_{21}, \dots, r_{2j}, r_{k1}, \dots, r_{kj}\}$, имеем еще более громоздкую нелинейную систему

$$R(r) = 0, \text{ где } R = \{R_1, R_2, \dots, R_k\}$$

и итерационный процесс для ее решения

$$r^{s+1} = r^s - (B^s)^{-1} R(r^s), B = \begin{Bmatrix} E - \tau b_{11}f_v & \dots & E - \tau b_{1k}f_v \\ \dots & \dots & \dots \\ E - \tau b_{k1}f_v & \dots & E - \tau b_{kk}f_v \end{Bmatrix}$$

1.3.2. Аппроксимация

Параметры схемы (неопределенные пока коэффициенты $a_1, \dots, a_k, c_1, \dots, c_k, b_{11}, \dots, b_{1k}, \dots, b_{k1}, \dots, b_{kk}$), конечно, не произвольны. Прежде всего, их (все или только часть) находят из условий аппроксимации, получаемых из разложения (21) в точке $t=t^n$ или $t=t^{n+1}$ в ряд Тейлора с учетом (18) и его следствий

$$v_t = f(t, v), v_{tt} = \partial f / \partial t + (\partial f / \partial v)v_t = \partial f / \partial t + f_v f, v_{ttt} = \dots$$

(т.е. рассматривая аппроксимацию на решениях (18)).

Поскольку в (21) при k стоит множитель τ , то в разложении правой части (21) нужно удерживать на один член ряда Тейлора меньше, чем в левой. Индекс n будем опускать. Итак, левая часть (21):

$$v^{n+1} = v + \tau v_t + \frac{\tau^2}{2} v_{tt} + \dots = v + \tau v_t + \frac{\tau^2}{2} (\partial f / \partial t + f_v f) + \dots$$

Далее:

$$r_k = f + \tau a_k \partial f / \partial t + f_v \left[\left(v^n + \tau \sum_{j=1}^L b_{kj} f \right) - v^n \right] + \dots \quad \text{Ес-}$$

ли коэффициенты a_k выбирать таким образом, чтобы

$$a_k = \sum_{l=1}^L b_{kl}, \quad (23)$$

то $r_k = f + \tau a_k (\partial f / \partial t + f_v f) + \dots$. Подставляя эти разложения в (21) и группируя члены при одинаковых степенях τ , получим (после деления на τ)

$$v_t = \left(\sum_{k=1}^K c_k \right) f + \tau \left[\left(\sum_{k=1}^K a_k c_k \right) - 1/2 \right] (\partial f / \partial t + f_v f) + \dots$$

Очевидно, что при выполнении условия $\sum_{k=1}^K c_k = 1$ будем

иметь первый порядок аппроксимации, при $\sum_{k=1}^K a_k c_k = 1/2$ –

второй порядок аппроксимации и т.д. До четвертого порядка аппроксимации включительно эти условия имеют вид:

$$\sum_{k=1}^K c_k = 1 \quad (24)$$

(вместе с (23) обеспечивает первый порядок аппроксимации),

$$\sum_{k=1}^K a_k c_k = 1/2 \quad (25)$$

(вместе с (23),(24) обеспечивает 2-й порядок аппроксимации),

$$\sum_{k=1}^K c_k a_k^2 = 1/3, \sum_{k=1}^K c_k \left(\sum_{l=1}^L a_k b_{kl} \right) = 1/6 \quad (26)$$

(условия третьего порядка аппроксимации вместе с (23)-(25)),

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^K c_k a_k^3 &= 1/4, \sum_{k=1}^K c_k a_k \left(\sum_{l=1}^L a_k b_{kl} \right) = 1/4 \\ \sum_{k=1}^K c_k \left(\sum_{l=1}^L a_l^2 b_{kl} \right) &= 1/12, \\ \sum_{k=1}^K c_k \left(\sum_{l=1}^L b_{kl} \left(\sum_{s=1}^L a_s b_{ls} \right) \right) &= 1/24. \end{aligned} \quad (27)$$

(условия четвертого порядка аппроксимации вместе с (23)-(26)). Уравнения (23)-(27) составляют относительно неопределенных коэффициентов некоторую нелинейную систему. Очевидно, что привлекаемое число условий аппроксимации (т.е. порядок точности схемы p при выполнении соответствующих условий гладкости) должно быть меньше числа отличных от нуля коэффициентов в (21), и соответствующая система должна быть разрешима. В частности, для явных схем $p \leq K$, а для общих неявных схем $p \leq 2K$.

1.3.3. Устойчивость

Конечно из того, что (21) при $\tau \rightarrow 0$ стремится к (18) еще не следует, что их решения будут сближаться. Как известно, для сходимости, по крайней мере, в линейном случае ($f = Av$, $A = \Omega^{-1} \Lambda \Omega = \{a_{ij}\}$, $a_{ij} = const$), необходима еще устойчивость разностной схемы. А поскольку в линейном случае система (18) переходит в совокупность простейших уравнений типа (1) (только λ может быть и комплексным, т.е. $\lambda = \alpha + i\beta$), при анализе устойчивости можно ограничиться изучением (1). Чтобы не погрязнуть в громоздких выкладках и иметь возможность графического представления некоторых результатов ограничимся также случаем $K=2$ в

(21). Существова дела это не меняет, а для учебных целей вполне достаточно.

Итак, в случае модельного уравнения $v_i = \lambda v$ для обеспечения 2-го порядка аппроксимации из (23)-(25) имеем:

$$c_1 + c_2 = 1, a_1 = b_{11} + b_{12}; \quad (28)$$

$$a_2 = b_{21} + b_{22}; a_1 c_1 + a_2 c_2 = 1/2$$

Откуда

$$c_1 = \frac{(b_{21} + b_{22} - 1/2)}{(b_{21} + b_{22} - b_{11} - b_{12})}, c_2 = \frac{(-b_{11} - b_{12} + 1/2)}{(b_{21} + b_{22} - b_{11} - b_{12})}, \quad (29)$$

т.е. четыре коэффициента b_{ij} произвольны, а остальные четыре коэффициента определяются соотношениями (28),(29) (при условии не равенства нулю знаменателя в (29)).

Из (26) с учетом (23),(29) имеем для схем 3-го порядка

$$3(b_{11} + b_{22}) - 1 - 6(b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}) = 0,$$

$$3[(b_{11} + b_{12}) + (b_{21} + b_{22})] - 6(b_{22} + b_{21})(b_{11} + b_{12}) - 2 = 0. \quad (30)$$

Для полуявных схем ($b_{12}=0$) (30) определяет однопараметрическое семейство схем третьего порядка аппроксимации с коэффициентами

$$b_{21} = 1/[3(1 - 2b_{11})], b_{22} = (1 - 3b_{11})/[1 - 2b_{11}], b_{11} \neq 1/2, \quad (31)$$

а на четвертый порядок не хватает свободных коэффициентов.

Полагая далее $f = \lambda v$, $\sigma = \lambda \tau$, получим из (22):

$$v^{n+1} = q v^n, \quad (32)$$

$$q(\sigma, b_{11}, b_{12}, b_{21}, b_{22}) = 1 + \frac{\sigma[1 + \sigma/2 - \sigma(b_{11} + b_{22})]}{1 - \sigma(b_{11} + b_{22}) + \sigma^2(b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21})}.$$

Действительно, для модельного уравнения в (21) $r = \lambda v$,

$$v_1 = v^n + \sigma(b_{11} v_1 + b_{12} v_2 + \dots + b_{1k} v_k),$$

$$v_2 = v^n + \sigma(b_{21} v_1 + b_{22} v_2 + \dots + b_{2k} v_k),$$

.....

$$v_k = v^n + \sigma(b_{k1} v_1 + b_{k2} v_2 + \dots + b_{kk} v_k),$$

Или, обозначая $v = \{v_1, \dots, v_k\}$, $v^n = \{v_1^n, \dots, v_k^n\}$, $B = \begin{Bmatrix} b_{11} \dots b_{1k} \\ \dots \dots \dots \\ b_{k1} \dots b_{kk} \end{Bmatrix}$,

имеем: $(E - \sigma B)v = v^n$, откуда $v = (E - \sigma B)^{-1}v^n = Dv^n$, $D = \{d_{kj}\}$ (т.е. $v_k = \alpha_k v^n = \sum_{j=1}^k d_{kj} v_j^n$). Подставляя это выражение в (21), и получим (32).

Геометрическая прогрессия (32) будет совпадать с точным решением $v^{n+1} = v^n e^{\sigma}$, если $q(\sigma) = e^{\sigma}$. Этот способ выбора коэффициентов в (21) называют *методом экспоненциальной подгонки*, его обобщение на случай линейной системы (7) ограничен лишь возможностями отыскания спектра матрицы A , а в случае нелинейной системы (18) может быть использована линеаризация (18) на малом отрезке $[t^n, t^{n+1}]$.

Так как мы рассматриваем здесь только случай $\text{Re}(\lambda) < 0$ (затухающие или устойчивые по Ляпунову решения), то при $|q(\sigma)| > 1$ приближенное решение (32) не будет иметь ничего общего с точным решением. При разных действительных значениях σ численное решение ведет себя как показано штриховыми линиями на рис. 1.9 (точное решение – сплошная кривая).

То есть для *устойчивости разностной схемы* следует потребовать выполнения условия

$$|q(\sigma)| \leq 1 \tag{33}$$

Для действительных λ это эквивалентно условию $-1 < q(\sigma) < 1$.

Определение 1.2. Схема называется абсолютно устойчивой, если (33) выполняется при всех значениях σ .

Определение 1.3. Схема называется монотонной, если $0 < q(\sigma) < 1$.

Если в комплексной плоскости ($\text{Re } \sigma$, $\text{Im } \sigma$) нарисовать кривую $|q(\sigma)| = 1$, то она будет ограничивать *область устойчивости*. Примеры областей устойчивости для явного и не-

явного методов Эйлера показаны (заштрихованы) на рис. 1.10А и рис. 1.10Б, соответственно.

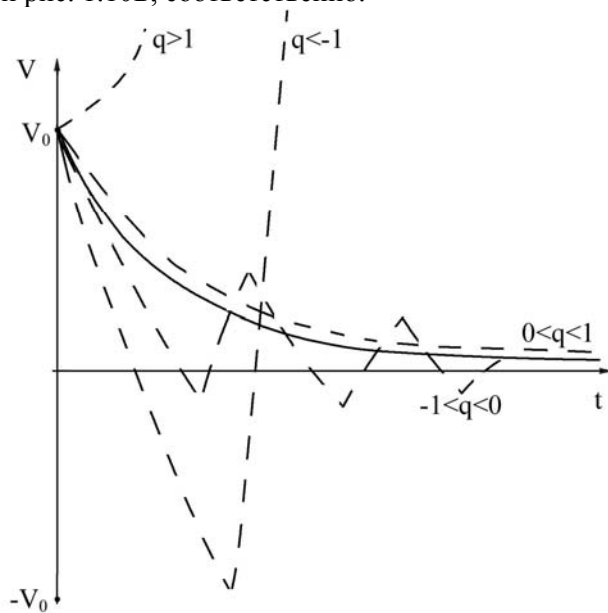


Рис. 1.9 Вид численного решения при различных q

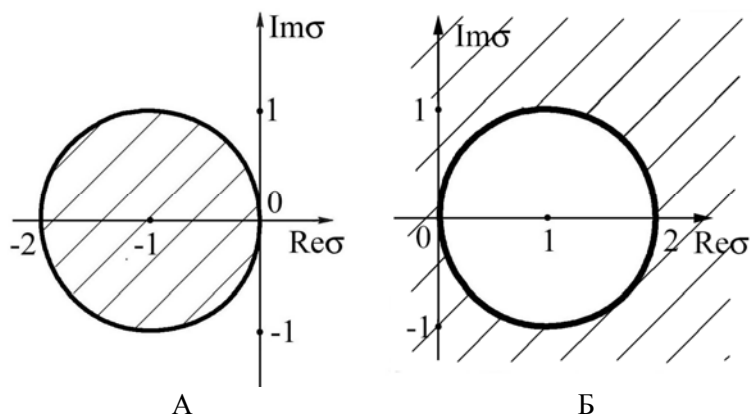


Рис. 1.10. Области устойчивости схем Эйлера

Для абсолютно устойчивых схем область устойчивости – вся комплексная плоскость σ . Таких схем на практике не существует, но для жестких уравнений этого и не нужно, достаточно, чтобы схема была A -устойчивой (Дальквист, 1963 г.), как, например, неявная схема Эйлера, рис. 1.10Б.

Определение 1.4. Схема называется A -устойчивой, если кривая $|q(\sigma)|=1$ лежит в правой полуплоскости σ .

Это требование довольно тяжелое, поэтому его еще более ослабляют, требуя, чтобы кривая $|q(\sigma)|=1$ лежала *вне заштрихованных* на рис. 1.11А, Б областей (Гир, 1969г.). Это есть разные определения *жестко устойчивых* схем. Действительно, для жесткой системы ОДУ (рис. 1.4Г), если все $\text{Re}(\lambda_j) < 0$, то при изменении τ от 0 до ∞ все точки $\sigma_j = \tau\lambda_j$ на плоскости $\{\text{Re } \sigma, \text{Im } \sigma\}$ будут двигаться по радиальным направлениям внутри некоторого угла 2β (рис. 1.11Б), оставаясь внутри области устойчивости.

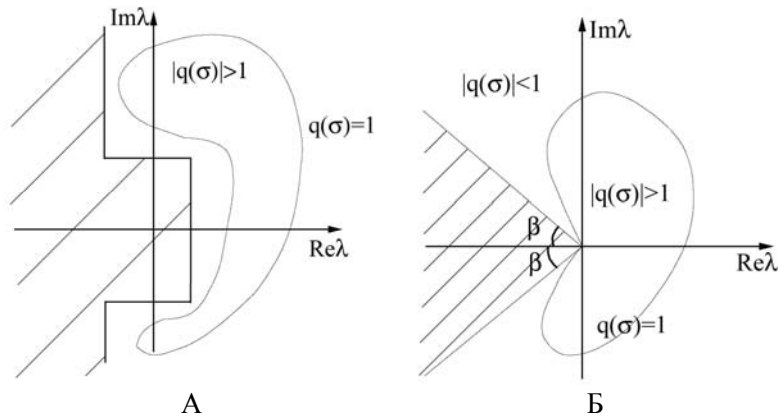


Рис. 1.11. Области устойчивости жёстко устойчивых схем

Величина $\text{Re } q(\sigma)$ определяет скорость затухания решения. При $\text{Re } \lambda \ll -1$ точное решение затухает очень быстро, значит и численный метод при $|\sigma| \rightarrow \infty$ (точнее при $\text{Re } \sigma \rightarrow -\infty$) должен обладать этим свойством.

Определение 1.5. Схема называется *L*-устойчивой (Ламберт, 1973 г.), если
 $|q(\sigma)| \rightarrow 0$ при $|\sigma| \rightarrow \infty$ (или $\operatorname{Re} q(\sigma) \rightarrow 0$ при $\operatorname{Re} \sigma \rightarrow -\infty$) (34)

Обобщение всех этих определений на случай линейной системы (7) очевидно, надо, чтобы соответствующие условия выполнялись для всех $\sigma_j = \tau \lambda_j$ (λ – собственные значения матрицы A). Для общей нелинейной системы (18) все это должно выполняться локально, при всех t^n (принцип линеаризации и замораживания коэффициентов).

1.3.4. Примеры схем Рунге–Кутты

Вернемся теперь к конкретному выражению для q из (32) и для простоты ограничимся случаем действительных $\lambda < 0$. Это особенно не меняет существа дела, но упрощает вы-

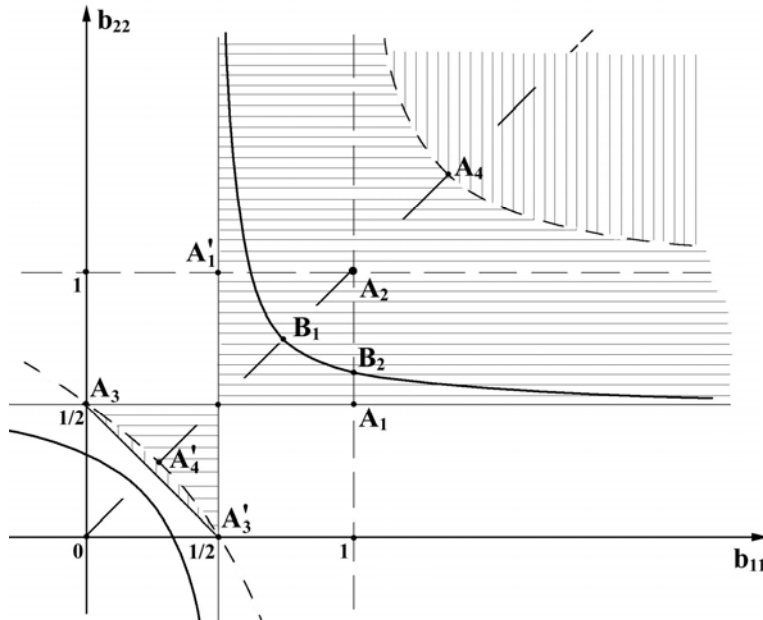


Рис. 1.12. Полуявные схемы Рунге–Кутты в плоскости неопределённых коэффициентов ($K=2$)

кладки. Будем также полагать $b_{12}=0$ (полуявные схемы), тогда q не зависит также и от b_{21} , а оставшиеся два свободных коэффициента примем за оси координатной плоскости, в которой будем вести рассмотрение (рис. 1.12).

Область устойчивых при всех $-\infty \leq \sigma \leq 0$ схем, т.е. область A -устойчивых схем $-1 \leq q(\sigma) \leq 1$ на рис. 1.12 заштрихована (горизонтальная штриховка: $-1 \leq q(-\infty) \leq 0$, вертикальная штриховка $0 \leq q(-\infty) \leq 1$).

Множество схем третьего порядка аппроксимации (31) на рис. 1.12 показано сплошной кривой (гипербола с асимптотами $b_{11}=1/2, b_{22}=1/2$).

Для L -устойчивых схем из (32), (34) имеем

$$b_{11}b_{12} - (b_{11}+b_{12})+1/2=0, (b_{11}+b_{12}) \neq 1/2 \quad (35)$$

На рис.1.12 L -устойчивым схемам (35) соответствует штриховая кривая (гипербола с асимптотами $b_{11}=1, b_{22}=1$). Видно, что в данном случае (среди полуявных схем Рунге–Кутты с $K=2$) *ни L -устойчивых, ни монотонных схем третьего порядка нет, а L -устойчивые схемы второго порядка расположены на кривых $A_3A_4A_3'$ и A_4 .*

Несколько конкретных примеров. На прямой $b_{11}=b_{22}$, проходящей через точки O, A_4, B_1, A_2, A_4 , расположены схемы Бутчера. Точка A_3 (и точка A_3' , так как точкам, симметричным относительно прямой $b_{11}=b_{22}$ соответствует формальная замена в (21), (22) индекса 1 на 2 и наоборот) соответствует схеме Лобатто, для которой таблица Бутчера имеет вид:

$$\begin{array}{c|ccc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \text{или } b_{21} + \frac{1}{2} & b_{21} & \frac{1}{2} \\ - & + & - & - & - & - \\ & & & & \frac{2b_{21}}{(2b_{21}+1)} & \frac{1}{(2b_{21}+1)} \end{array} \quad (b_{21} \neq -1/2) \quad (36)$$

Это полуявная (с явным предиктором, т.е. достаточно экономная по объему вычислений) схема второго порядка аппроксимации. Она расположена на границе области A -

устойчивых схем, не L -устойчива ($q(-\infty)=-1$) и монотонна лишь при $-2 \leq \sigma \leq 0$.

Точка A_I (и симметричная ей точка A_I') также расположена на границе области A -устойчивых схем, не L -устойчива ($\sigma(-\infty)=-1$), монотонна лишь при $-1-\sqrt{3} \leq \sigma \leq 0$ и по своим свойствам мало отличается от схемы Лобатто. Соответствующая ей таблица Бутчера имеет вид:

$$\begin{array}{c|ccc|ccc}
 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \text{или } b_{21} + \frac{1}{2} & b_{21} & \frac{1}{2} \\
 - & + & - & - & + & - \\
 & & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \frac{2(b_{21}-1)}{(2b_{21}-1)} \quad \frac{1}{(2b_{21}-1)}
 \end{array} \quad (b_{21} \neq 1/2) \quad (37)$$

Точка A_2 является A -устойчивой, но не L -устойчивой схемой ($\sigma(-\infty)=-1/2$), монотонна при $-1-\sqrt{3} \leq \sigma \leq 0$, как и схема A_I , имеет второй порядок аппроксимации, по своим свойствам несколько лучше предыдущих схем. Соответствующая ей таблица Бутчера имеет вид:

$$\begin{array}{c|ccc|ccc}
 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 & \text{или } b_{21} + \frac{1}{2} & b_{21} - \frac{1}{2} & 1 \\
 - & + & - & - & + & - \\
 & & 0 & 1 & & \frac{2(b_{21}+1)}{(1-2b_{21})} \quad \frac{1}{(1-2b_{21})}
 \end{array} \quad (b_{21} \neq 1/2) \quad (38)$$

Точки A_4 и A_4' являются примерами A - и L -устойчивых схем (точка A_4 также монотонна при всех отрицательных значениях σ) второго порядка аппроксимации. В соответствующей им таблице Бутчера знак '+' относится к схеме A_4 , а знак '-' - к A_4' :

$$\begin{array}{ccc|ccc}
\frac{2 \pm \sqrt{2}}{2} & & & \frac{2 \pm \sqrt{2}}{2} & & 0 \\
b_{21} + \frac{2 \pm \sqrt{2}}{2} & & & b_{21} & & \frac{2 \pm \sqrt{2}}{2} \\
- & & & + & & - \\
& & & & & \frac{1 \pm \sqrt{2} + 2b_{21}}{2b_{21}} \\
& & & & & \frac{-(1 \pm \sqrt{2})}{2b_{21}}
\end{array}, b_{21} \neq 0 \quad (39)$$

Схема Хаммера–Холлингсвудта – второго порядка аппроксимации, полностью неявная, не L -устойчивая ($q(-\infty)=1$, пример неудачной схемы):

$$\begin{array}{ccc|ccc}
\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & & & \frac{1}{4} & & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\
\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & & & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & & \frac{1}{4} \\
- & & & + & & - \\
& & & & & \frac{1}{2} \\
& & & & & \frac{1}{2}
\end{array}$$

Явная схема Эйлера – Коши (точка 0):

$$\begin{array}{ccc|ccc}
0 & & & 0 & & 0 \\
1 & & & 1 & & 0 \\
- & & & + & & - \\
& & & & & \frac{1}{2}
\end{array} \quad (40)$$

Две полужавные (с неявными предикторами и корректорами) схемы третьего порядка, не L -устойчивые, немонотонные, A -устойчивые:

1) точка B_1 (схема Розенброка)

$$\begin{array}{ccc|ccc}
\frac{3 + \sqrt{3}}{6} & & & \frac{3 + \sqrt{3}}{6} & & 0 \\
\frac{3 - \sqrt{3}}{6} & & & \frac{-\sqrt{3}}{6} & & \frac{3 + \sqrt{3}}{6} \\
- & & & + & & - \\
& & & & & \frac{1}{2} \\
& & & & & \frac{1}{2}
\end{array} \quad (41)$$

2) точка B_2 , для которой

$$\begin{array}{r|rr}
1 & 1 & 0 \\
\frac{1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{2}{3} \\
- & + & - \\
| & \frac{1}{4} & \frac{3}{4}
\end{array} \quad (42)$$

Основная гипотеза, принимаемая здесь и в дальнейшем при анализе разностных схем: *точкам в пространстве неопределенных коэффициентов $\{b_{kl}\}$, которые близки между собой (в смысле расстояния, например, в евклидовой метрике), соответствуют схемы, близкие по своим свойствам (точности, устойчивости и т.п.).*

1.4. Линейные многошаговые схемы (методы типа Адамса).

1.4.1. Алгоритм и аппроксимация

Используя, как и в разделе 1.3, метод неопределенных коэффициентов и записывая линейную комбинацию вектор-функций v и правых частей f в некоторой последовательности равноотстоящих точек $t^n, t^{n+1}, \dots, t^{n+k}$ ($\tau = t^{n+k} - t^n = \text{const}$), для линейных многошаговых методов получим следующее разностное выражение:

$$\sum_{k=0}^K a_k v^{n+k} - \tau b_k f(t^n + k\tau, v^{n+k}) = 0, a_K \neq 0 \quad (43)$$

Из-за однородности (43), коэффициент при искомом значении v^{n+k} можно выбрать единичным:

$$a_K = 1 \quad (44)$$

Неопределенные коэффициенты a_k, b_k ($k=0, \dots, K$) из разложения (43) в ряд Тейлора в точке t^{n+k} (или t^n) связаны условиями аппроксимации (на решениях (18)):

$$\sum_{k=0}^K a_k = 0, \sum_{k=0}^K k a_k - b_k = 0 \quad (45)$$

(обеспечивают первый порядок аппроксимации),

$$\sum_{k=0}^K (k^2 a_k / 2 - k b_k) = 0 \quad (46)$$

(обеспечивает второй порядок аппроксимации вместе с (45)),

$$\dots$$

$$\sum_{k=0}^K (k^\nu a_k / \nu! - k^{\nu-1} b_k / (\nu-1)!) = 0 \quad (47)$$

(обеспечивает ν -ый порядок аппроксимации на решениях (18) вместе с предшествующими условиями).

Схемы первого порядка аппроксимации малоинтересны, поэтому в дальнейшем будем рассматривать схемы второго или более высокого порядка точности. Если с учетом нормировки (44) и условий аппроксимации второго порядка точности (45), (46) исключить, например,

$$a_K = 1, a_{K-1} = -1 - \sum_{k=0}^{K-2} a_k,$$

$$b_K = \frac{1}{2} + \sum_{k=0}^{K-2} \left[(k+1-K) + \frac{(K-k)^2 - 1}{2} a_k + (K-k-1)b_k \right],$$

$$b_{K-1} = \frac{1}{2} - \sum_{k=0}^{K-2} \left[\frac{(K-k)^2 - 1}{2} a_k + (K-k)b_k \right].$$

то оставшиеся свободными коэффициенты (если позволяет выбранное $K > 2$), можно принять за линейное пространство размерности $2(K-1)$, например, с евклидовой метрикой, и каждой точке в этом пространстве будет соответствовать некоторая разностная схема второго порядка точности, а условия более высокого порядка аппроксимации ((47) при $\nu=3$ и т.д.) после исключения в них $a_k, a_{k-1}, b_k, b_{k-1}$, являясь относительно оставшихся свободными коэффициентов a_k, b_k ($k=0, \dots, K-2$) линейными уравнениями

$$\sum_{k=0}^{K-2} \left\{ \left[\left(\frac{(K-k-1)K^{\nu-1}}{(\nu-1)!} - \frac{(K-1)^\nu}{\nu!} + \frac{k^\nu}{\nu!} \right) - \frac{K^{\nu-1} - (K-1)^{\nu-1}}{(\nu-1)!} \right] \right.$$

$$\cdot \left[\frac{(K-k)^2 - 1}{2} \right] a_k - \left[\frac{K^{v-1} - k^{v-1}}{(v-1)!} + (K-k) \frac{K^{v-1} - (K-1)^{v-1}}{(v-1)!} \right] b_k +$$

$$+ \left[\frac{K^v - (K-1)^v}{v!} - \frac{K^{v-1}}{(v-1)!} \right] = 0,$$

образуют в этом пространстве соответствующую гиперплоскость схем третьего порядка аппроксимации. На пересечении двух таких гиперплоскостей ((47) при $v=3$ и $v=4$) будут расположены схемы с четвертым порядком аппроксимации и т.д., пока мы не исчерпаем все возможности для выбранного K , т.е. пока не найдем единственную схему с наиболее высоким (для данного K) порядком аппроксимации (одну из точек в этом пространстве).

В частности, при $K=2$ имеем:

$$a_2=1, a_1=-1-a_0,$$

$$b_2=(1+a_0+2b_0)/2, b_1=(1-3a_0-4b_0)/2, \quad (48)$$

где a_0 и b_0 произвольны для схем второго порядка аппроксимации.

Условие третьего порядка аппроксимации дает прямую в плоскости $\{a_0, b_0\}$ с уравнением

$$5a_0 + 12b_0 + 1 = 0,$$

а единственной схемой четвертого порядка аппроксимации будет точка на этой прямой с координатами:

$$a_0=-1, b_0=1/3. \quad (49)$$

1.4.2. Устойчивость

Как уже отмечалось, одной аппроксимации недостаточно для сходимости решений (43) к решениям исходной дифференциальной задачи даже в линейном случае (7). Необходимо еще обеспечить устойчивость разностных схем (43). Для одного линейного уравнения, полагая $f=\lambda v$ из (43) получим

$$\sum_{k=0}^K (a_k - \sigma b_k) v^{n+k} = \sum_{k=0}^K \alpha_k v^{n+k} = 0, \sigma = \tau \lambda. \quad (50)$$

Устойчивость разностных схем (50) будем исследовать на специальных решениях вида $v^n = q^n$. Тогда для определения q имеем *многочлен устойчивости* степени K и уравнение

$$\sum_{k=0}^K (a_k - \sigma b_k) q^k = 0,$$

корни которого $q_j, j=1,2,\dots,K$ (действительные или комплексные, в зависимости от σ, a_k, b_k) должны удовлетворять условиям устойчивости

$$|q(\sigma)| \leq 1, j=1,\dots,K. \quad (51)$$

Если в плоскости $\{\text{Re } \sigma, \text{Im } \sigma\}$ область устойчивости, определяемая неравенствами (51), включает всю левую полуплоскость (т.е. (51) выполняется для всех σ с $\text{Re } \sigma < 0$), имеем *A-устойчивую* схему. Если эта область включает в себя заштрихованную на рис. 1.11А или 1.11Б часть плоскости $\{\text{Re } \sigma, \text{Im } \sigma\}$, имеем *жестко устойчивую* схему. Если

$$\lim_{|\sigma| \rightarrow \infty} |q(\sigma)| = 0, j=1,2,\dots,K, \quad (52)$$

то схема будет *L-устойчивой*.

Для действительных σ и $q_j(\sigma)$ условия устойчивости схемы будут иметь вид

$$-1 \leq q_j(\sigma) \leq 1.$$

Если это условие выполняется для всех $\sigma: -\infty < \sigma \leq 0$, то схема *A-устойчива*, если выполняется (52), то она *L-устойчива*.

1.4.3. Примеры линейных многошаговых схем

Для случая $K=2$ с учетом (48),(50) имеем

$$v^{n+2} = \alpha_1 v^{n+1} + \alpha_0 v^n, \quad q^2 - \alpha_1 q - \alpha_0 = 0.$$

Отсюда

$$q_1 = \frac{\alpha_1 + \sqrt{\alpha_1^2 + 4\alpha_0}}{2}, \quad q_2 = \frac{\alpha_1 - \sqrt{\alpha_1^2 + 4\alpha_0}}{2},$$

где

$$\alpha_1 = \frac{(2 + \sigma) + (2 - 3\sigma)\alpha_0 - 4\sigma b_0}{(2 - \sigma) - \sigma\alpha_0 - 2\sigma b_0},$$

$$\alpha_0 = \frac{-2\alpha_0 + 4\sigma\alpha_0}{(2 - \sigma) - \sigma\alpha_0 - 2\sigma b_0}.$$

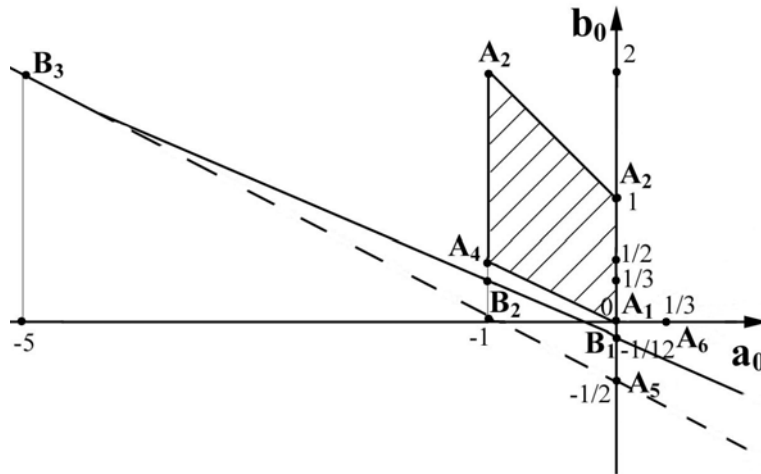


Рис. 1.13. Линейные многошаговые схемы в плоскости неопределённых коэффициентов ($K=2$)

Условия $|q_1(\sigma, a_0, b_0)| \leq 1$, $|q_2(\sigma, a_0, b_0)| \leq 1$ ограничивают область A -устойчивых схем. На рис. 1.13 эта область в плоскости свободных коэффициентов $\{a_0, b_0\}$ заштрихована (четырёхугольник A_1, A_2, A_3, A_4). Сплошная прямая B_1B_2 – множество схем с третьим порядком аппроксимации. Как видно, среди них нет A -устойчивых. Точка B_2 на этой прямой – единственная в этом случае схема четвертого порядка аппроксимации (49). И в самом общем случае доказано (теорема Дальквиста), что *линейных многошаговых A -устойчивых схем с порядком аппроксимации выше второго не существует.*

$$\text{Точка } A_6 \text{ с координатами } a_0=1/3, b_0=0 \quad (53)$$

– единственная в этом случае L -устойчивая схема (схема Куртиса–Хиршфельдера). Область жестко устойчивых схем, очевидно, содержит внутри себя множество A -устойчивых

схем. В частности, схема, соответствующая точке A , является жестко устойчивой.

Точка A_1 с коэффициентами

$$a_0=b_0=0, \quad (54)$$

т.е. одношаговая линейная схема (метод трапеций), из числа A -устойчивых схем является оптимальной в том смысле, что она среди других A -устойчивых схем при $K=2$ ближе всего расположена и к L -устойчивой схеме (точке A_6), и к схемам 3-го порядка точности (наиболее точная из A -устойчивых схем).

Отметим еще схему третьего порядка точности, соответствующую точке B_1 . Она является жестко устойчивой и наиболее близка к множеству A -устойчивых схем. Для этой схемы

$$a_0=0, b_0=-1/12. \quad (55)$$

Явным схемам на рис. 1.13 соответствует штриховая прямая. В частности, точка A_5 с коэффициентами

$$a_0=0, a_1=-1/2 \quad (56)$$

– явная схема Адамса. Все явные схемы, как видно, не являются A -устойчивыми. А в целом, семейство линейных многошаговых схем существенно беднее схем типа Рунге – Кутты.

1.5. Схемы для продолженных систем (схемы Обрешкова).

1.5.1. Алгоритм и аппроксимация

Лучшие черты методов Рунге–Кутты и линейных многошаговых методов сочетают схемы для продолженной системы (19) или линейные многошаговые схемы, использованием 2-й (схемы Обрешкова) и более высоких производных

$$v_{ii}(t, v) = f_i = \partial f / \partial t + f_v f, \quad (57)$$

Добавляя в (43) линейную комбинацию вторых производных v_{ii} с дополнительными неопределенными коэффициентами c_k , получим для этих схем ($a_k=1$)

$$\sum_{k=0}^K a_k v^{n+k} - \tau b_k v_t(t^n + k\tau, v^{n+k}) - \tau^2 c_k v_{tt}(t^n + k\tau, v^{n+k}) = 0$$

или, что то же

$$\sum_{k=0}^K \left\{ a_k v^{n+k} - \tau b_k f(t^{n+k}, v^{n+k}) - \tau^2 c_k \left[\partial f(t^{n+k}, v^{n+k}) / \partial t + \right. \right. \\ \left. \left. + f_v(t^{n+k}, v^{n+k}) f(t^{n+k}, v^{n+k}) \right] \right\} = 0 \quad (58)$$

Из начальных условий в (18) и из (57) видно, что $v_{tt}(0, v^0)$ фактически можно считать известным.

Условия аппроксимации, как и в случае линейных многошаговых методов, являются линейными (относительно неопределенных коэффициентов a_k, b_k, c_k) уравнениями

$$\sum_{k=0}^K a_k = 0, \quad \sum_{k=0}^K k a_k - b_k = 0, \quad (59)$$

(обеспечивают первый порядок аппроксимации),

$$\sum_{k=0}^K (k^2 a_k / 2 - k b_k - c_k) = 0 \quad (60)$$

(обеспечивает второй порядок аппроксимации вместе с (59))

$$\dots \\ \sum_{k=0}^K (k^v a_k / v! - k^{v-1} b_k / (v-1)! - k^{v-2} c_k / (v-2)!) = 0 \quad (61)$$

(обеспечивает v -ый порядок аппроксимации на решениях (18) вместе с предшествующими условиями).

В случае неявных схем ($b_K \neq 0, c_K \neq 0$) для решения нелинейной относительно v^{n+k} системы (58) с ограничениями (59)-(61)

$$\begin{aligned}
R(v^{n+K}) &= r + v^{n+K} - \tau b_K f(t^{n+K}, v^{n+K}) - \\
&- \tau^2 c_K [\partial f(t^{n+K}, v^{n+K}) / \partial t + f_v(t^{n+K}, v^{n+K}) f(t^{n+K}, v^{n+K})] = 0, \\
r &= \sum_{k=0}^{K-1} \{ a_k v^{n+k} - \tau b_k f(t^{n+k}, v^{n+k}) - \tau^2 c_k [\partial f(t^{n+k}, v^{n+k}) / \partial t + \\
&+ f_v(t^{n+k}, v^{n+k}) f(t^{n+k}, v^{n+k})] \},
\end{aligned}$$

следует воспользоваться каким-либо итерационным методом, например,

$$v_{s+1}^{n+k} = v_s^{n+k} - B^{-1}(t^{n+k}, v_s^{n+k}) R(v_s^{n+k}), s=0, 1, \dots,$$

$$v_0^{n+k} = v^{n+k-1},$$

$$B = \partial R / \partial v^{n+k} = E - \tau b_k f_v - \tau^2 c_k [\partial(\partial f / \partial v) / \partial v + f_v f_v + C]. \quad (62)$$

В (62) C – матрица, столбцами которой являются векторы

$$(\partial f_v) / \partial v_1) f, (\partial f_v) / \partial v_2) f, \dots, (\partial f_v) / \partial v_k) f. \quad (63)$$

1.5.2. Устойчивость

Так как свободных параметров у этого класса разностных схем больше, появляется возможность при меньшем числе точек сеточного шаблона (т.е. при меньших K) строить схемы более высокого порядка аппроксимации, чем в случае линейных многошаговых схем. В частности, при $K=1$ (одношаговые, как методы Рунге–Кутты, схемы) имеем для схем второго порядка аппроксимации

$$a_1=1, a_0=-1, b_0=1/2+c_0+c_1, b_1=1/2-c_0-c_1, \quad (64)$$

c_0, c_1 – произвольны. Если в дополнение к (64)

$$c_1=c_0-1/6, \quad (65)$$

то имеем однопараметрическое семейство схем третьего порядка аппроксимации, а при

$$c_0=1/12, c_1=-1/12 \quad (66)$$

– единственную на данном сеточном шаблоне схему четвертого порядка аппроксимации.

Для тестового уравнения с $f = \lambda v$ имеем

$$v_t = f = \lambda v, v_{tt} = f_t = \lambda v = \lambda^2 v, \dots,$$

$$\sum_{k=0}^K (a_k - \sigma b_k - \sigma^2 c_k) v^{n+k} = \sum_{k=0}^K \alpha_k v^{n+k} = 0, \sigma = \tau \lambda$$

т.е. то же, что и в случае линейных многошаговых схем. В частности, при $K=1$, как и в методах Рунге–Кутты, получаем геометрическую прогрессию

$$v^{n+1} = q v^n, \text{ где } q = -a_0/a_1 = [1 + \sigma(1/2 + c_0 + c_1) + \sigma^2 c_0] / [1 - \sigma(1/2 - c_0 - c_1) - \sigma^2 c_1]. \quad (67)$$

Из условия устойчивости $|q(\sigma, c_0, c_1)| \leq 1$, требуя его выполнения для всех значений σ : $-\infty \leq \text{Re}(\sigma) \leq 0$, в плоскости свободных параметров $\{c_0, c_1\}$ можно получить все множество A -устойчивых схем (заштриховано на рис. 1.14, вертикальная штриховка – монотонные схемы, для которых, в случае действительных значений σ $0 < q \leq 1$, горизонтальная штриховка – устойчивые, но не монотонные схемы, для которых $1 \leq q < 0$).

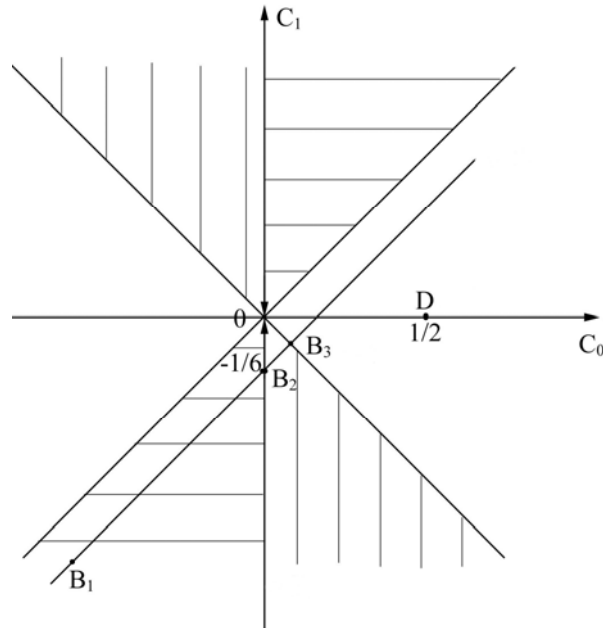


Рис. 1.14. Схемы Обрешкова в плоскости неопределённых коэффициентов ($K=1$)

Определяя из (67) $\lim_{|\sigma| \rightarrow \infty} |q(\sigma, c_0, c_1)| = -c_0/c_1$, и приравняв его нулю, получим, что множество L -устойчивых схем расположено на прямой $c_0=0$ (исключая точку $c_1=0$).

Схемам третьего порядка аппроксимации (65) на рис. 1.14 соответствует прямая $B_1B_2B_3$, единственной схеме четвертого порядка (66) – точка B_3 , расположенная на границе A -устойчивых схем.

Точка O с координатами

$$c_0=0, c_1=0 \quad (68)$$

соответствует известной схеме “трапеций”.

В целом данный класс разностных схем заметно богаче линейных многошаговых схем, в частности, он содержит целую полупрямую B_1B_2 A -устойчивых схем третьего порядка аппроксимации, в том числе L -устойчивую схему – точку B_2 с координатами

$$c_0=0, c_1=-1/6, \quad (69)$$

чего нет даже в методах Рунге–Кутты при $K=2$. Заканчивая данный раздел, отметим, что в нем затронуты лишь самые основные понятия и методы, используемые при численном решении жестких систем ОДУ. С более детальным их изложением читатель может ознакомиться в многочисленной оригинальной литературе (обзор которой можно найти, например, в [5]) и в книгах [6–9]. Основные усилия исследователей в данной области направлены на построение эффективных безытерационных методов, исследованию сходимости численных методов для нелинейных уравнений и смежным вопросам.

2. Примеры жёстких систем ОДУ

2.1. Модель Филда–Нойса «орегонатор»

Простейшая математическая модель периодической химической реакции Белоусова–Жаботинского состоит из трех уравнений:

$$\dot{y}_1 = 77,27(y_2 + y_1(1 - 8,375 \cdot 10^{-6} y_1 - y_2)),$$

$$\dot{y}_2 = \frac{1}{77,27}(y_3 - (1 + y_1)y_2),$$

$$y_3 = 0,161(y_1 - y_3).$$

На то, что система жесткая, указывают большие различия в константах скоростей реакций — есть процессы «быстрые» и есть «медленные».

Так как переменные системы — концентрации (HBrO_2 , Br^- и Ce(IV) соответственно) то начальные условия для системы следует выбирать положительными. Как правило, их выбирают достаточно близкими к 0. Конечное время интегрирования системы $T_k = 800$.

О системе см., например, [1–3].

2.2. Уравнение Ван-дер-Поля

Типичным примером жесткой задачи малой размерности является уравнение Ван-дер-Поля [1, 2, 4, 5]. Его можно записать в виде системы

$$y_1' = y_2,$$

$$y_2' = -a(y_2(y_1^2 - 1) + y_1), \quad (1)$$

или в виде:

$$y_1' = -a\left(\frac{y_1^3}{3} - y_1\right) + ay_2,$$

$$y_2' = -y_1, \quad (2)$$

(представление Льенара). Считаем, что параметр a — большой. В расчетах рассмотрим два случая: $a = 10^3$ и $a = 10^6$. Для тестов обычно полагают $y_1 = 2, y_2 = 0$. Конечное время интегрирования системы, записанной в виде (1), $T_k = 20$.

Периодические решения жестких систем ОДУ иногда называют релаксационными автоколебаниями [4, 5].

Дополнительный вопрос: укажите преобразование, переводящее представление (1) в представление Льенара (2).

2.3. Система Ван-дер-Поля и траектории-утки

Рассмотрим неавтономную систему уравнений Ван-дер-Поля:

$$y_1' = a\left(-\left(\frac{y_1^3}{3} - y_1\right) + y_2\right),$$

$$y_2' = -y_1 + A \cos \omega t.$$

Как и в предыдущей задаче считаем, что $a = 10^3$ и $a = 10^6$, $y_1 = 2, y_2 = 0$. Рассмотрим численно случаи

$$0 < A < 1 \text{ и } 1 < A < \sqrt{1 + \frac{1}{64\omega^2}}. \quad T_k = 200.$$

О траекториях-утках в системе Ван-дер-Поля см. [5] (строгое математическое исследование) и [6] (популярное изложение).

2.4. Суточные колебания концентрации озона в атмосфере

Рассмотрим простейшую математическую модель колебаний концентрации озона в атмосфере [7]. Она описывается следующей неавтономной системой ОДУ:

$$\dot{y}_1 = -k_1 y_1 y_2 - k_2 y_1 y_3 + 2k_3(t) y_2 + k_4(t) y_3,$$

$$\dot{y}_2 = 0,$$

$$\dot{y}_3 = k_1 y_1 y_2 - k_2 y_1 y_3 - k_4(t) y_3.$$

В данной модели уравнения описывают изменение концентрации атомарного кислорода, молекулярного кислорода и озона соответственно. Считается, что изменения концентрации молекулярного кислорода невелики. Начальные значения для задачи таковы:

$$y_1(0) = 10^6 \text{ (см}^{-3}\text{)}, \quad y_2(0) = 3,7 \cdot 10^{16} \text{ (см}^{-3}\text{)}, \\ y_3(0) = 10^{12} \text{ (см}^{-3}\text{)},$$

значения констант скоростей химических реакций:

$$k_1 = 1,63 \cdot 10^{-16}, \quad k_2 = 4,66 \cdot 10^{-16}.$$

Две другие химические реакции зависят от локальной освещенности участка земной поверхности и приближаются следующим выражением:

$$k_i(t) = \begin{cases} \exp(-c_i / \sin \omega t), & \sin \omega t > 0, \\ 0, & \sin \omega t < 0, \end{cases}$$

где $\omega = \pi / 43\,200 \text{ с}^{-1}$, $c_3 = 22,62$, $c_4 = 7,601$. Значения констант скоростей обращаются в ноль «ночью», резко возрастают «на рассвете», достигают максимума «в полдень» и падают до нуля «на закате». Конечное время интегрирования $T_k = 172\,800 \text{ с}$ (двое суток).

Данная система является жесткой «ночью» и умеренно жесткой «в светлое время суток».

2.5. Уравнение Бонгоффера — Ван-дер-Поля

Рассмотрим еще один пример жесткой задачи малой размерности, имеющей периодическое решение [5, 8].

$$y_1' = a\left(-\frac{y_1^3}{3} - y_1\right) + y_2,$$

$$y_2' = -y_1 - by_2 + c.$$

Здесь $a = 10^3$ и $a = 10^6$, $y_1 = 2$, $y_2 = 0$. Уравнение описывает протекание тока через клеточную мембрану. Постоянная компонента тока c в безразмерной записи системы такова, что $0 < c < 1$, $b > 0$. $T_k = 20$.

2.6. Сингулярно - возмущенная система — модель двухлампового генератора Фрюгауфа

Система более высокой размерности, имеющая решение в виде релаксационного цикла, приведена в [4] (см. также [8]). Она имеет вид:

$$\varepsilon \dot{x}_1 = -\alpha(y_1 - y_2) + \varphi(x_1) - x_2,$$

$$\varepsilon \dot{x}_2 = \alpha(y_1 - y_2) + \varphi(x_2) - x_1,$$

$$\dot{y}_1 = x_1,$$

$$\dot{y}_2 = x_2.$$

Здесь $\alpha > 0$ — константа порядка единицы, функция $\varphi(u) = -\operatorname{tg}(\pi u / 2)$, $x_1(0) = x_2(0) = 0$, $y_1 = 2$, $y_2 = 0$, $T_k = 20$, $\varepsilon = 10^{-3}, 10^{-6}$.

2.7. Простейшая модель гликолиза

Простейшая модель гликолиза описывается уравнениями следующего вида [8]:

$$\dot{y}_1 = 1 - y_1 y_2,$$

$$\dot{y}_2 = \alpha y_2 \left(y_1 - \frac{1 + \beta}{y_2 + \beta} \right),$$

предложенными Дж. Хиггинсом. В системе $\beta = 10$, $\alpha = 100, 200, 400, 1000$. Начальные условия для системы: $y_1(0) = 1, y_2(0) = 0,001, T_k = 50$. Решение этой системы — релаксационные автоколебания (жесткий предельный цикл).

2.8. Модель химических реакций Робертсона

Один из первых и самых популярных примеров «жесткой» системы ОДУ принадлежит Робертсону (1966) и имеет вид, типичный для моделей химической кинетики — в правой части системы стоят полиномы второй степени от концентраций (сравните с орегонатором).

Система Робертсона имеет вид [1]:

$$\dot{y}_1 = -0.04y_1 + 10^4 y_2 y_3,$$

$$\dot{y}_2 = 0.04y_1 - 10^4 y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2,$$

$$\dot{y}_3 = 3 \cdot 10^7 y_2^2.$$

Начальные условия для системы таковы: $y_1(0) = 1, y_2(0) = 0, y_3(0) = 0$. Рассматриваются следующие величины отрезка интегрирования: $T_k = 40$ (в работе Робертсона рассматривался именно такой отрезок интегрирования), $T_k = 100, 1000, \dots, 10^{11}$. О свойствах задачи см. в [1].

2.9. Модель дифференциации растительной ткани

Данный пример из [1] — типичный случай биохимической модели «умеренной» размерности (современные модели, например, фотосинтеза включают сотни уравнений подобного типа). Хотя данная модель является *умеренно жесткой*, тем не менее, ее лучше решать с помощью методов, предназначенных для решения ЖС ОДУ.

$$\dot{y}_1 = -1.71y_1 + 0.43y_2 + 8.23y_3 + 0.0007,$$

$$\dot{y}_2 = 1.71y_1 - 8.75y_2,$$

$$\dot{y}_3 = -10.03y_3 + 0.43y_4 + 0.035y_5,$$

$$\dot{y}_4 = 8.32y_2 + 1.71y_3 - 1.12y_4,$$

$$\dot{y}_5 = -1.745y_5 + 0.43y_6 + 0.43y_7,$$

$$\dot{y}_6 = -280y_6y_8 + 0.69y_4 + 1.71y_5 - 0.43y_6 + 0.69y_7,$$

$$\dot{y}_7 = 280y_6y_8 - 1.87y_7,$$

$$\dot{y}_8 = -\dot{y}_7.$$

Начальные значения всех переменных системы равны 0, кроме $y_1(0) = 1$ и $y_8(0) = 0.0057$. Длина отрезка интегрирования $T_k = 421,8122$.

2.10. Задача E5

Еще одна модель химической реакции из [1], получившая свое название E5 в более ранних публикациях.

$$\dot{y}_1 = -Ay_1 - By_1y_3,$$

$$\dot{y}_2 = Ay_1 - My_2y_3,$$

$$\dot{y}_3 = Ay_1 - By_1y_3 - My_2y_3 + Cy_4,$$

$$\dot{y}_4 = By_1y_3 - Cy_4.$$

Начальные условия: $y_1(0) = 1,76 \cdot 10^{-3}$, а все остальные переменные равны 0. Значения коэффициентов модели следующие: $A = 7,89 \cdot 10^{-10}$, $B = 1,1 \cdot 10^7$, $C = 1,13 \cdot 10^3$, $M = 10^6$.

Первоначально задача ставилась на отрезке $T_k = 1000$, но впоследствии было обнаружено, что она обладает нетривиальными свойствами вплоть до времени $T_k = 10^{13}$ (подробнее см. [1]).

Обратите особое внимание, что в процессе расчетов приходится иметь дело с очень малыми концентрациями реагентов (малы значения y_2 , y_3 и y_4). Как «подправить» постановку задачи E5?

2.11. Уравнение Релея

Уравнение Релея во многом похоже на уравнение Ван-дер-Поля [8]. Рассматривается задача вида

$$\ddot{x} - \mu(1 - \dot{x}^2)\dot{x} + x = 0.$$

Решить задачу, записав уравнение Релея в виде системы ОДУ. Начальные условия: $x(0) = 0$, $\dot{x}(0) = 0,001$, $\mu = 1000$, $T_k = 1000$.

2.12. Экогенетическая модель

Рассмотрим пример системы уравнений, которая описывает изменения численности популяций двух видов и эволюцию некого генетического признака α . Система ОДУ имеет вид:

$$\dot{x} = x(1 - 0,5x - \frac{2}{7\alpha^2}y),$$

$$\dot{y} = y(2\alpha - 3,5\alpha^2x - 0,5y),$$

$$\dot{\alpha} = \varepsilon(2 - 7\alpha x).$$

Параметры задачи таковы: $\varepsilon \leq 0,01$, $0 \leq x_0 \leq 3$, $0 \leq y_0 \leq 15$, $\alpha_0 = 0$, $T_k = 1500$. Наличие малого параметра в третьем уравнении системы показывает, что генетический

признак меняется медленнее, чем численность популяций. Решение системы — релаксационные колебания.

Задача описана в статье [9].

2.13. Экогенетическая модель

Еще один пример жесткой системы описан в статье [9]. Более интересный случай — численность двух популяций зависит от взаимодействия между ними и двух медленно меняющихся генетических признаков.

$$\dot{x} = x(2\alpha_1 - 0,5x - 3,5\alpha_1^2 y),$$

$$\dot{y} = y(2\alpha_2 - 3,5\alpha_2^2 x - 0,5y),$$

$$\dot{\alpha}_1 = \varepsilon(2 - 7\alpha_1 x),$$

$$\dot{\alpha}_2 = \varepsilon(2 - 7\alpha_2 x).$$

Параметры задачи таковы: $\varepsilon \leq 0,01$, $0 \leq x_0 \leq 40$, $0 \leq y_0 \leq 40$, $\alpha_{10} = 0$, $\alpha_{20} = 10$, $T_k = 2000$.

Рассмотреть также модификацию предыдущей системы [9]:

$$\dot{x} = x(2\alpha_1 - 0,5x - 3,5\alpha_1^3 y),$$

$$\dot{y} = y(2\alpha_2 - 3,5\alpha_2^3 x - 0,5y),$$

$$\dot{\alpha}_1 = \varepsilon(2 - 10,5\alpha_1^2 x),$$

$$\dot{\alpha}_2 = \varepsilon(2 - 10,5\alpha_2^2 x).$$

Параметры задачи: $\varepsilon \leq 0,01$, $0 \leq x_0 \leq 40$, $0 \leq y_0 \leq 40$, $\alpha_{10} = 0$, $\alpha_{20} = 10$, $T_k = 2000$.

Литература

1. Э. Хайрер, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально – алгебраические задачи. — М.: Мир, 1999. — 685 с.
2. Э. Хайрер, С. Нерсетт, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. — М.: Мир, 1990. — 512 с.
3. *Колебания и бегущие волны в химических системах*: Пер. с англ. / Под ред. Р. Филда, М. Бургер. — М.: Мир, 1988. — 720 с.
4. Е. Ф. Мищенко, Н. Х. Розов. Дифференциальные уравнения с малым параметром и релаксационные колебания. — М.: Наука, 1975. — 248 с.
5. Е. Ф. Мищенко, Ю. С. Колесов, А. Ю. Колесов, Н. Х. Розов. Периодические движения и бифуркационные процессы в сингулярно-возмущенных системах — М.: Наука. Физматлит, 1995. — 336 с.
6. Г. Г. Малинецкий Хаос. Структуры. Вычислительный эксперимент. — М.: Наука, 1998. (или Эдиториал УРСС, 2000.)
7. Д. Каханер, К. Моулер, С. Нэш. Численные методы и программное обеспечение. — М.: Мир, 1998. — 575 с.
8. П. С. Ланда. Нелинейные колебания и волны. — М.: Наука. Физматлит, 1997. — 496 с.
9. А. С Кондрашов, А. И. Хибник. Экогенетические модели как быстро-медленные системы. / В кн.: Исследования по математической биологии. – Пущино, 1996. — с. 88–123.
10. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноруцкий И.Г. Численные методы решения жестких систем. – М.: Наука, 1979 (п.п. 1-4).
11. Холл Дж., Уатт Дж. (ред.). Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.: Мир, 1979 (п.п. 1-4).
12. Калиткин Н.Н. Численные методы. – М.: Наука, 19?? (п.12).