

AMS subject classification: 65L05, 65L06

Жестко устойчивые линейные многшаговые методы со второй производной с двумя гибридными точками

Р.И. Окуонгае, М.Н.О. Ихиле

Department of Mathematics, University of Benin, P.M.B. 1154, Benin City, Edo state, Nigeria
E-mails: okunoghae01@yahoo.co.uk (Окуонгае Р.И.), mnoikhilo@yahoo.com (Ихиле М.Н.О.)

Окуонгае Р.И., Ихиле М.Н.О. Жестко устойчивые линейные многшаговые методы со второй производной с двумя гибридными точками // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2015. — Т. 18, № 3. — С. 305–317.

В данной статье представлено семейство гибридных линейных многшаговых методов (ЛММ) со второй производной для численного решения жестких начальных задач (НЗ) для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Эти методы являются жестко устойчивыми для числа шагов $k \leq 7$.

DOI: 10.15372/SJNM20150305

Ключевые слова: непрерывные линейные многшаговые методы, жесткая задача, жесткая устойчивость, граничный locus, гибридные ЛММ.

Okuonghae R.I., Ikhile M.N.O. Stiffly stable second derivative linear multistep methods with two hybrid points // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2015. — Vol. 18, № 3. — P. 305–317.

This paper presents a family of hybrid linear multistep methods (LMM) with a second derivative term for the numerical solution of stiff initial value problems (IVPs) for ordinary differential equations (ODEs). The methods are stiffly stable for the step number $k \leq 7$.

Keywords: continuous linear multistep methods, stiff problem, stiff stability, boundary locus, hybrid LMM.

1. Введение

Цель гибридных линейных многшаговых методов (ЛММ) [1, 3–5, 14] — избежать ограничений устойчивости и сходимости, налагаемых порядковым барьером Дальквиста [6] на ЛММ НЗ первого порядка. В данной статье рассматривается класс композитных гибридных ЛММ для численного решения

$$y' = f(x, y), \quad x \in [x_0, X], \quad y(x_0) = y_0, \quad f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m. \quad (1)$$

Рассмотрим пример гибридного ЛММ [19]:

$$y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \frac{h}{24} (7f_n + 5f_{n+1}) - \frac{h^2}{24} f'_{n+1}, \quad p = 3, \quad (2a)$$

$$y_{n+1} = \left(-2y_n + 24y_{n+\frac{1}{2}} \right) + \frac{h}{5} f_{n+1} - \frac{h^2}{10} f'_{n+1}, \quad p = 3. \quad (2b)$$

Этот метод является A -устойчивым, а составляющие методы имеют, соответственно, указанный порядок p . Для использования этой формулы в (2а), (2б) вычислим решение $y_{n+\frac{1}{2}}$ в (2а) в гибридной точке $x_{n+\frac{1}{2}}$ и подставим полученное решение $y_{n+\frac{1}{2}}$ в выходной метод в (2б). Бутчер и О'Салливан [4] рассмотрели гибридный метод

$$\widehat{y}_{n-\frac{7}{15}} = \frac{-5297}{3375}y_{n-1} + \frac{3904}{3375}y_{n-2} + h \left(\frac{4232}{3375}f_{n-1} + \frac{1472}{3375}f_{n-2} \right), \quad p = 3, \quad (3a)$$

$$\widehat{y}_n = \frac{152}{25}y_{n-1} - \frac{127}{25}y_{n-2} + h \left(\frac{189}{92}\widehat{f}_{n-\frac{7}{15}} - \frac{419}{100}f_{n-1} - \frac{1118}{575}f_{n-2} \right), \quad p = 3, \quad (3б)$$

$$y_n = y_{n-1} + h \left(\frac{3375}{5152}\widehat{f}_{n-\frac{7}{15}} + \frac{25}{168}\widehat{f}_n + \frac{19}{96}f_{n-1} - \frac{1}{552}f_{n-2} \right), \quad p = 5. \quad (3в)$$

Однако этот метод был трансформирован в общий линейный метод и реализован в форме Нордсика. В [4] этот метод имеет интервал абсолютной устойчивости $[-1.231, 0]$. Новый гибридный ЛММ, представляющий для нас интерес, имеет следующий вид:

$$y(x_n + v^*h) = y_n + h \sum_{j=0}^k \beta_j(t)f_{n-j}, \quad v^* = t + 1, \quad (4a)$$

$$y(x_n + vh) = y_{n+k-1} + h \sum_{j=0}^k \beta_{3,j}(t)f_{n+j} + h^2\beta_{4,k}(t)f'_{n+k}, \quad t = k - \frac{1}{2}, \quad v = t + 1, \quad (4б)$$

$$y(x_n + (t+1)h) = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j(t)y_{n-k+j} + \alpha_v(t)y_{n+v} + \alpha_{v^*+1}(t)y_{n+v^*+1} + h\beta_{1,k}(t)f_{n+k} + h^2\beta_{2,k}(t)f'_{n+k}, \quad v = v^* = k - \frac{1}{2}, \quad t \in [-1, k-1], \quad (4в)$$

где $f_{n+j} = f(x_{n+j}, y_{n+j})$, $y''_{n+k} = f'_{n+k} = f'(x_{n+k}, y_{n+k})$, $\alpha_{k-1}(t) = 1$, $\{\beta_j(t), j=0(1)k\}$, $\alpha_v(t)$, $\alpha_{v^*+1}(t)$, $\beta_{1,k}(t)$, $\beta_{2,k}(t)$, $\beta_{3,k}(t)$, $\beta_{4,k}(t)$ — непрерывные по t коэффициенты, которые предполагаются вещественными и удовлетворяющими условию нормировки $\alpha_k(t) = 1$, $x_{n+1} = x_n + th$, масштабная переменная t определяется как $t = (x - x_{n+1})/h$, $h = x_{n+1} - x_n$ — фиксированный размер сетки, y_n — приближение к $y(x_n)$. Параметры v , $v^* + 1$ включены для обеспечения коллокации и интерполяции за пределами сетки точек x_{n+v} и x_{n+v^*+1} в открытом интервале (x_{n+k-1}, x_{n+k}) и $v = k - 1/2$, где k — число шагов схемы. Методы в (4а)–(4в) становятся явными, если мы положим $\beta_{1,k}(t) = 0$ и $\beta_{2,k}(t) = 0$. Новый алгоритм в (4а)–(4в) получен с использованием методов, обсуждавшихся в [19–25]. Класс гибридных методов, введенный здесь, аналогичен классу методов, рассмотренных в [1–5, 9, 15–18]. Однако использование первого предиктора в (4а) имеет следующий вид:

$$y_{n+v^*+k} = y_{n+k} + h \sum_{j=0}^k \beta_j(t)f_{n-j+k}, \quad v^* = \frac{1}{2}, \quad t = -\frac{1}{2}, \quad k \leq 7. \quad (5)$$

Полученная схема и гибридные части в (4а)–(4в) имеют порядок сходимости p , равный $k+1$, $k+2$, $k+3$ соответственно. Порядки получены из локальных ошибок усечения (ЛОУ):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{ЛОУ}_1 = y(x_n + v^*h) - \left(y(x_n) + h \sum_{j=0}^k \beta_j(t)y'(x_n - (k+j)h) \right), \quad t = k - \frac{1}{2}, \quad v^* = t + 1, \\ \text{ЛОУ}_2 = y(x_n + vh) - \left(\alpha_{k-1}(t)y(x_n + (k-1)h) - h \sum_{j=0}^k \varphi_j(t)y'(x_n + jh) - \right. \\ \quad \left. h^2\psi_k(t)y''(x_n + kh) \right), \quad v = t + 1, \\ \text{ЛОУ}_3 = y(x_n + (t+1)h) - \left(\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j(t)y(x_n + jh) - \alpha_v(t)y(x_n + vh) - \right. \\ \quad \left. \alpha_{v^*+1}(t)y(x_n + (v^*+1)h) - h\phi_k(t)y'(x_n + kh) - h^2\gamma_k(t)y''(x_n + jh) \right) \end{array} \right. \quad (6)$$

алгоритмов в (4а)–(4в), где непрерывные коэффициенты $\alpha_{k-1}(t)$, $\{\beta_j(t), j=0(1)k\}$, $\alpha_v(t)$, $\alpha_{v^*}(t)$, $\beta_{1,k}(t)$, $\beta_{2,k}(t)$, $\beta_{3,k}(t)$, $\beta_{4,k}(t)$ предполагаются известными. Если $y(x_n)$ по крайней мере $(p+1)$ дифференцируема по времени, то использование соответствующих разложений в ряды Тейлора $\{y(x_{n+j}), y'(x_{n+j}), y(x_{n+v}), y'(x_{n-j}), y'(x_{n+v^*+1}), y''(x_{n+j}) | j=0(1)k\}$ в подходящей точке сетки x_n приводит (6) к виду

$$\text{ЛОУ}_q = c_{p_q+1}^{(q)} h^{p_q+1} y^{(p_q+1)}(x_n), \quad q = 1, 2, 3, \quad (7)$$

где p_q — порядок, $c_{p_q+1}^{(q)}$ — постоянная ошибки этих методов. Дискретный вариант выбранного нами гибридного ЛММ порядка p_q получается, если масштабную переменную t выбрать следующим образом:

$$t = \begin{cases} -\frac{1}{2} & \text{для (4а)}, \\ k - \frac{3}{2} & \text{для (4б)}, \\ k - 1 & \text{для (4в)}, \quad k = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Реализация алгоритма (4а)–(4в) требует, чтобы y_{n+v} в (4а)–(4в) и y_{n+v^*+k} в (5), представляющем собой форму (5) со сдвинутым индексом, были оценены первыми, чтобы использовать эти предсказанные значения в выходном методе в (4а)–(4в). Формулы (4а)–(4в) имеют нулевую устойчивость для фиксированного размера шага h для $k \leq 7$. Для $k \geq 8$ не существует устойчивого процесса (4а)–(4в). В пункте 4 можно найти графики для граничного локуса (4а)–(4в). Разрешение неясности метода (4а)–(4в) при применении к жестким НЗ приводит к итерационной схеме Ньютона–Рафсона:

$$y_{n+k}^{[s+1]} = y_{n+k}^{[s]} - F^{-1}\left(y_{n+k}^{[s]}\right) F\left(y_{n+k}^{[s]}\right), \quad s = 0, 1, \dots, \quad (8)$$

где $F^{-1}\left(y_{n+k}^{[s]}\right)$ — матрица Якоби для (4а)–(4в), функция вектора систем ОДУ (3а)–(3в) (см. [9]). Начальное значение $y_{n+1}^{[0]}$ для (4а)–(4в) может быть получено из любых следующих явных одношаговых формул:

$$y_{n+1}^{[0]} = \begin{cases} y_n + hf_n, & p = 1, \\ y_n + \frac{h}{2}(f_{n-1} + f_n), & p = 2, \\ y_n + \frac{hy_n y'_n}{y_n - hy'_n}, & p = 3. \end{cases}$$

Однако в данной статье используется третья формула. Статья построена следующим образом. В п. 2 обсуждается получение гибридного ЛММ порядка $k+3$ с использованием техники коллокации (см. [21]). В п. 3 рассматривается получение первого гибридного предиктора в (4а)–(4в), а в п. 4 — получение второго гибридного предиктора в (4а)–(4в). В п. 5 определяется жесткая устойчивость методов, а также представлены результаты численных экспериментов с некоторыми жесткими системами ОДУ (3а)–(3в).

2. Получение гибридного ЛММ

Для получения гибридного ЛММ решение НЗ предполагается полиномиальным

$$y(x) = \sum_{j=0}^N a_j x^j \quad (9)$$

при $N = k + 3$, например, в выходной схеме в (4а)–(4в), где $\{x^j\}_{j=0}^N$ — полиномиальная базисная функция и $\{a_j\}_{j=0}^N$ — константы вещественных параметров, которые должны быть определены. Из (9) мы имеем

$$y'(x) = f(x, y) = \sum_{j=1}^N j a_j x^{j-1}, \quad y''(x) = f'(x, y) = \sum_{j=2}^N j(j-1) a_j x^{j-2}. \quad (10)$$

Используя коллокацию (10) при x , равном x_{n+k} , x_{n+v} , x_{n+v^*+1} , и интерполяцию (9) при $x = x_{n+j}$, $j = 0(1)k - 1$, мы получим линейную систему уравнений:

$$Aa = y, \quad (11)$$

где

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{k+3} \\ 1 & x_{n+1} & x_{n+1}^2 & \cdots & x_{n+1}^{k+3} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_{n+k-1} & x_{n+k-1}^2 & \cdots & x_{n+k-1}^{k+3} \\ 1 & x_{n+v} & x_{n+v}^2 & \cdots & x_{n+v}^{k+3} \\ 1 & x_{n+v^*+1} & x_{n+v^*+1}^2 & \cdots & x_{n+v^*+1}^{k+3} \\ 0 & 1 & 2x_{n+k} & \cdots & (k+3)x_{n+k}^{k+2} \\ 0 & 0 & 2x_{n+k} & \cdots & (k+3)(k+2)x_{n+k}^k \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ a_{k-1} \\ a_k \\ a_{k+1} \\ a_{k+2} \\ a_{k+3} \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_n \\ y_{n+1} \\ \cdots \\ y_{n+k-1} \\ y_{n+v} \\ y_{n+v^*+1} \\ f_{n+k} \\ f'_{n+k} \end{pmatrix}.$$

Решив уравнение (11) с использованием пакета программ МАТЕМАТИКА, определим значения $\{a_j\}_{j=0}^{k+3}$ и подставим полученные значения a'_j в полиномиальное представление (9); при дальнейшем упрощении получим коэффициенты $\{\alpha_j(t)\}_{j=0}^k$, $\beta_{1,k}(t)$, $\beta_{2,k}(t)$ в (10) при $t = (x - x_{n+1})/h$, $\alpha_k(t) = 1$, положив $x = x_{t+1}$ в левой части (10) для фиксированного значения k . Дискретные коэффициенты метода (4в) для фиксированного значения $k \leq 7$ даны в табл. 1.

Для $k = 7$ дискретные коэффициенты следующие:

$$\begin{aligned} \beta_{2,7} &= -\frac{88200}{1431901}, & \beta_{1,7} &= \frac{457380}{1431901}, & \alpha_{\frac{13}{2}} &= -\frac{240844800}{204761843}, \\ \alpha_{\frac{15}{2}} &= -\frac{16056320}{204761843}, & \alpha_7 &= 1, & \alpha_6 &= \frac{411600}{1431901}, \\ \alpha_5 &= -\frac{61740}{1431901}, & \alpha_4 &= \frac{19600}{1431901}, & \alpha_3 &= -\frac{6125}{1431901}, \\ \alpha_2 &= \frac{16464}{15750911}, & \alpha_1 &= -\frac{34300}{204761843}, & \alpha_0 &= \frac{240}{18614713}. \end{aligned}$$

Таблица 1. Дискретные коэффициенты гибридного метода в (4в), $t = k - 1$ и $v = k - \frac{3}{2}$

k	$\beta_{2,k}$	$\beta_{1,k}$	α_v	α_{v^*+1}	α_7	α_6	α_5	α_4	α_3	α_2	α_1	α_0
1	$-\frac{1}{10}$	$\frac{1}{5}$	$-\frac{4}{5}$	$-\frac{4}{15}$	0	0	0	0	0	0	1	$\frac{1}{15}$
2	$-\frac{2}{23}$	$\frac{6}{23}$	$-\frac{64}{69}$	$-\frac{64}{345}$	0	0	0	0	0	1	$\frac{8}{69}$	$-\frac{1}{345}$
3	$-\frac{18}{229}$	$\frac{66}{229}$	$-\frac{1152}{1146}$	$-\frac{1152}{8015}$	0	0	0	0	1	$\frac{36}{229}$	$-\frac{9}{1145}$	$-\frac{4}{8015}$
4	$-\frac{72}{991}$	$\frac{300}{991}$	$-\frac{36864}{34685}$	$-\frac{4096}{34685}$	0	0	0	1	$\frac{192}{991}$	$-\frac{72}{4955}$	$\frac{64}{34685}$	$-\frac{1}{6937}$
5	$-\frac{1800}{26419}$	$\frac{8220}{26419}$	$-\frac{204800}{184933}$	$-\frac{204800}{2034263}$	0	0	1	$\frac{6000}{26419}$	$\frac{600}{26419}$	$\frac{800}{184933}$	$-\frac{125}{184933}$	$\frac{16}{290609}$
6	$-\frac{1800}{27889}$	$\frac{8820}{27889}$	$-\frac{2457600}{2147453}$	$-\frac{2457600}{27916889}$	0	1	$\frac{7200}{27889}$	$-\frac{900}{27889}$	$\frac{1600}{195223}$	$-\frac{375}{195223}$	$\frac{96}{306779}$	$-\frac{100}{3988127}$

Решив (12) для $k = 7$, положим $x_n = 0$,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & h & h^2 & \dots & h^{10} \\ 1 & 2h & (2h)^2 & \dots & (2h)^{10} \\ 1 & 3h & (3h)^2 & \dots & (3h)^{10} \\ 1 & 4h & (4h)^2 & \dots & (4h)^{10} \\ 1 & 5h & (5h)^2 & \dots & (5h)^{10} \\ 1 & 6h & (6h)^2 & \dots & (6h)^{10} \\ 1 & vh & (vh)^2 & \dots & (vh)^{10} \\ 1 & \zeta h & (\zeta h)^2 & \dots & (\zeta h)^{10} \\ 0 & 1 & 2(7h) & \dots & 10(7h)^9 \\ 0 & 0 & 2 & \dots & 90(7h)^8 \end{pmatrix}, \quad \zeta = v^* + 1. \quad (13)$$

Фиксируя, например, $h = 0.0001$, $v = 13/2$ и $\zeta = 15/2$ в матрице A , получим $\det(A) = 1.26 \times 10^{-186}$, $\text{cond}(A) = 7.41 \times 10^{37}$. Здесь $\det(A)$ означает детерминант, а $\text{cond}(A)$ — число обусловленности матрицы A в (11). Аналогичным образом

$$\det(A) = \begin{cases} 4.68 \times 10^{-29}, & k = 1, \\ 8.08 \times 10^{-48}, & k = 2, \\ 1.40 \times 10^{-69}, & k = 3, \\ 2.30 \times 10^{-94}, & k = 4, \\ 3.64 \times 10^{-122}, & k = 5, \\ 5.95 \times 10^{-153}, & k = 6, \end{cases} \quad \text{cond}(A) = \begin{cases} 1.74 \times 10^{17}, & k = 1, \\ 9.54 \times 10^{20}, & k = 2, \\ 3.57 \times 10^{24}, & k = 3, \\ 1.01 \times 10^{28}, & k = 4, \\ 2.34 \times 10^{31}, & k = 5, \\ 4.49 \times 10^{34}, & k = 6. \end{cases}$$

Тогда система уравнений (11) является сингулярной при $h = 0$ и плохо обусловленной при $h \rightarrow 0$. Отметим, что $\det(A)$ уменьшается при увеличении k . Поэтому будет трудно получить решение для (11) для фиксированного h в $[0, 1]$ с помощью программного обеспечения символьных преобразований. В действительности при получении этих методов все труднее использовать пакет МАТНЕМАТИСА для увеличивающегося k .

3. Гибридный ЛММ в (4а)

Используя идеи, представленные в пунктах 2 и 3 соответственно, мы получили следующие дискретные варианты гибридного предиктора в (4а) порядка $k + 1$ для $k \leq 7$. Дискретные коэффициенты приведены в табл. 2.

Таблица 2. Дискретные коэффициенты гибридного метода в (4а)

k	t	v	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	β_7	α_v	α_0
1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{8}$	$\frac{5}{8}$	0	0	0	0	0	0	1	1
2	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{7}{24}$	$\frac{7}{24}$	0	0	0	0	0	1	1
3	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{25}{384}$	$\frac{107}{384}$	$-\frac{187}{384}$	$\frac{99}{128}$	0	0	0	0	1	1
4	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{157}{2880}$	$-\frac{1631}{5760}$	$\frac{1163}{1920}$	$-\frac{4061}{5760}$	$\frac{4769}{5760}$	0	0	0	1	1
5	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{243}{5120}$	$\frac{13447}{46080}$	$-\frac{17459}{23040}$	$\frac{8297}{7680}$	$-\frac{43423}{46080}$	$\frac{40339}{46080}$	0	0	1	1
6	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{40997}{967680}$	$-\frac{97303}{322560}$	$\frac{149557}{161280}$	$-\frac{776609}{483840}$	$\frac{553459}{322560}$	$-\frac{77191}{64512}$	$\frac{222029}{241920}$	0	1	1
7	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1191619}{30965760}$	$\frac{9653237}{30965760}$	$-\frac{1272781}{1146880}$	$\frac{70421609}{30965760}$	$-\frac{91409641}{30965760}$	$\frac{2894669}{1146880}$	$-\frac{45393013}{30965760}$	$\frac{29611331}{30965760}$	1	1

4. Гибридный ЛММ в (4б)

Аналогичным образом гибридный ЛММ в (4б) в гибридной точке x_{n+v} в выходной схеме в (4б) получается с использованием полиномиального интерполянта из (9). Положим $N = k + 2$ в (9), где $\{a_j\}_{j=0}^{k+2}$ — константы вещественных параметров, которые должны быть определены. Следуя процедуре, приведенной в п. 2, мы получим дискретные гибридные методы (4б) для $k \leq 7$ (см. табл. 3, где приведены дискретные коэффициенты β) дискретные коэффициенты α имеют постоянные значения: $\alpha_v = 1$ и $\alpha_{k-1} = 1$.

Таблица 3. Дискретные коэффициенты гибридного метода в (4б)

k	t	v	$\beta_{4,k}$	$\beta_{3,7}$	$\beta_{3,6}$	$\beta_{3,5}$	$\beta_{3,4}$	$\beta_{3,3}$	$\beta_{3,2}$	$\beta_{3,1}$	$\beta_{3,0}$
1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{12}$	0	0	0	0	0	0	$\frac{5}{24}$	$\frac{7}{24}$
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{7}{128}$	0	0	0	0	0	$\frac{127}{768}$	$\frac{67}{192}$	$-\frac{11}{768}$
3	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{61}{1440}$	0	0	0	0	$\frac{2467}{17280}$	$\frac{247}{640}$	$-\frac{21}{640}$	$\frac{71}{17280}$
4	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$	$-\frac{325}{9216}$	0	0	0	$\frac{70769}{552960}$	$\frac{1591}{3840}$	$-\frac{277}{5120}$	$\frac{469}{34560}$	$-\frac{109}{61440}$
5	$\frac{7}{2}$	$\frac{9}{2}$	$-\frac{493}{16128}$	0	0	$\frac{28367}{241920}$	$\frac{15691}{35840}$	$-\frac{4171}{53760}$	$\frac{14141}{483840}$	$-\frac{137}{17920}$	$\frac{101}{107520}$
6	$\frac{9}{2}$	$\frac{11}{2}$	$-\frac{891}{32768}$	0	$\frac{13499167}{123863040}$	$\frac{788023}{1720320}$	$-\frac{708163}{6881280}$	$\frac{400531}{7741440}$	$-\frac{279491}{13762560}$	$\frac{8587}{1720320}$	$-\frac{6971}{12386304}$
7	$\frac{11}{2}$	$\frac{13}{2}$	$\frac{1429817}{58060800}$	$\frac{554549039}{5419008000}$	$\frac{221105933}{464486400}$	$\frac{20103529}{1548288000}$	$\frac{22758839}{278691840}$	$-\frac{794299}{18579456}$	$\frac{12203873}{774144000}$	$\frac{4954099}{1393459200}$	$\frac{1191389}{3251404800}$

5. Устойчивость методов

Для методов типа (4а)–(4в) подставим гибридные решения y_{n+v} и y_{n+v^*+1} в точках x_{n+v} и x_{n+v^*+1} соответственно в метод (4в) для соответствующего k . Применив полученный метод к скалярной тестовой задаче $y' = \lambda y$, $\text{Re}(\lambda) < 0$ с произвольным начальным значением, мы получим многочлен устойчивости

$$\pi(r, z) = r^k - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j r^j - \alpha_v \left(r^{k-1} + z \sum_{j=0}^k \beta_{3,j} r^j + z^2 \beta_{4,k} r^k \right) - \alpha_{v^*+1} \left(1 + z \sum_{j=0}^k \beta_j r^j \right) - z \beta_{1,k} r^k - z^2 \beta_{2,k} r^k, \tag{14}$$

где $z = \lambda h$ и $r = e^{i\theta}$. Решив уравнение для многочлена устойчивости $\pi(r, z) = 0$ для значений z , мы получим z_1 и z_2 — корни (14).

Определение 1 [10]. Численный интегратор называется A -устойчивым, если абсолютное значение корня(корней) многочлена устойчивости численного интегратора лежит в открытой левой половине z -плоскости области устойчивости.

Определение 2 [16–18]. Численный интегратор называется жестко устойчивым:

- (i) если он абсолютно устойчив в области $R_1 = \{z : |\text{Re}(z)| \leq D_L\}$,
- (ii) если он точен в области $R_2 = \{z : D_L < |\text{Re}(z)| < D_R; |\text{Im}(z)| < D_L\}$ такой, что область устойчивости содержит область вида $R_1 \cup R_2$.

Определение 3 [26]. Численная схема интегрирования называется $A(\alpha)$ -устойчивой для некоторого $\alpha \in [0, \pi/2]$, если клин $S_\alpha = \{z \mid z \neq 0, |\text{Arg}(-z)| < \alpha\}$ находится в ее области абсолютной устойчивости. Самое большое α_{\max} называется углом абсолютной устойчивости или аргументом устойчивости.

В [9] показано, что жесткая устойчивость влечет $A(\alpha)$ -устойчивость, $\alpha = \tan^{-1}(\theta/D)$. Граничный locus корней многочлена устойчивости $\pi(r, z)$ в (14) метода (4а)–(4в) показывает, что новые алгоритмы в (4а)–(4в) являются A -устойчивыми для $k = 1, 2, 3$ и жестко устойчивыми для $k = 4, 5, 6, 7$. Для $k \geq 8$ не было обнаружено жестко устойчивого процесса. Внешняя часть кривых на рис. 1 показывает области устойчивости методов в (4а)–(4в).

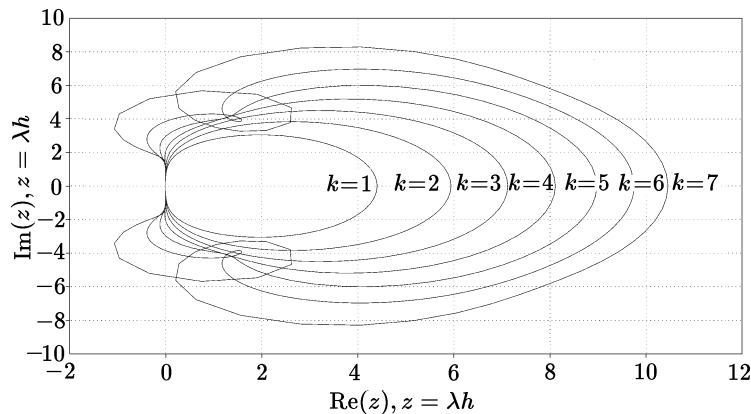


Рис. 1. Области устойчивости (внешняя часть замкнутых кривых) для k -шагового жестко устойчивого гибридного ЛММ со второй производной с двумя гибридными точками; $k \leq 7$

Соответствующие значения (для $A(\alpha)$ -устойчивости) D , постоянных ошибки и порядки дискретного варианта методов в (4а)–(4в) приведены в табл. 4.

Таблица 4. Характеристики устойчивости и постоянные ошибки гибридного метода (4а)–(4в)

k	Порядок (4а)	Порядок (4б)	Порядок (4в)	C_{p+1} (4а)	C_{p+1} (4б)	C_{p+1} (4в)	D	α
1	2	3	4	$\frac{1}{12}$	$\frac{11}{1152}$	$-\frac{1}{2400}$	0	90°
2	3	4	5	$\frac{25}{384}$	$\frac{71}{23040}$	$-\frac{1}{8280}$	0	90°
3	4	5	6	$\frac{157}{2880}$	$\frac{109}{76800}$	$-\frac{3}{64120}$	0	90°
4	5	6	7	$\frac{243}{5120}$	$\frac{101}{129024}$	$-\frac{3}{138740}$	0.01	89°
5	6	7	8	$\frac{40997}{967680}$	$\frac{6971}{14450688}$	$-\frac{25}{2219196}$	0.3	84°
6	7	8	9	$\frac{1191619}{30965760}$	$\frac{1191389}{3715891200}$	$-\frac{5}{780892}$	0.5	72°
7	8	9	10	$\frac{4111117}{116121600}$	$\frac{1505863}{6688604160}$	$-\frac{245}{63003644}$	0.9	59°

Область t , для которой алгоритмы в (4а)–(4в) являются устойчивыми, моделируется при помощи 3D-графики МАТНЕМАТИСА для $|r_j|$, $j = 1(1)k$, в зависимости от значений t и z соответственно (r_j – корень(корни) многочлена устойчивости в (14)). Метод (4а)–(4в) является устойчивым при любых значениях t , для которых выполняется условие $0 \leq |r_j| \leq 1$, $j = 1(1)k$, и неустойчивым при любых значениях t , для которых $|r_j| > 1$. Ось t используется для определения области t , для которой метод имеет нулевую устойчивость, тогда как ось z используется для определения интервала абсолютной устойчивости (4а)–(4в) в смысле корневого локуса. Результат, полученный для оси z , согласуется с результатами для граничного локуса на рис. 1. Рисунки 2–8 показывают область t , для которой метод (4а)–(4в) имеет нулевую устойчивость (см. также табл. 5).

Таблица 5. Область t , для которой гибридный метод (4а)–(4в) имеет нулевую устойчивость

k	Область t
1	$\{t : t \in (-\infty, 0) \cup (0, \infty)\}$
2	$\{t : t \in (-\infty, -1) \cup (-0.394, \infty)\}$
3	$\{t : t \in (-\infty, -1.0843) \cup (0, 1) \cup (0.346, \infty)\}$
4	$\{t : t \in (-\infty, -1) \cup (-0.9, 0.38) \cup (0, \infty)\}$
5	$\{t : t \in (-\infty, -1.245) \cup (1, 1.86) \cup (2, \infty)\}$
6	$\{t : t \in (-\infty, -12.5) \cup (2, \infty)\}$
7	$\{t : t \in (3, 3.8) \cup (4, 13.7)\}$

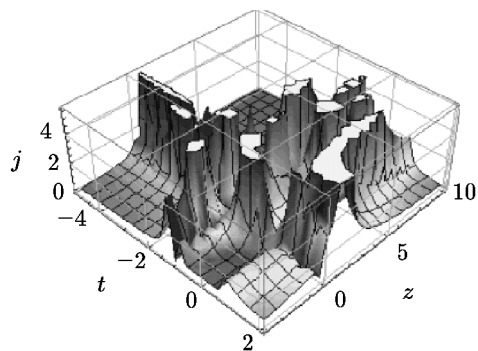


Рис. 2. 3D-область для $k = 1$

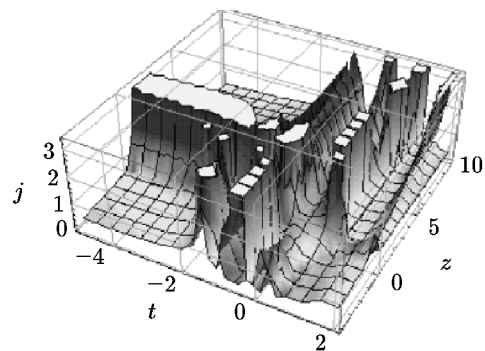


Рис. 3. 3D-область для $k = 2$

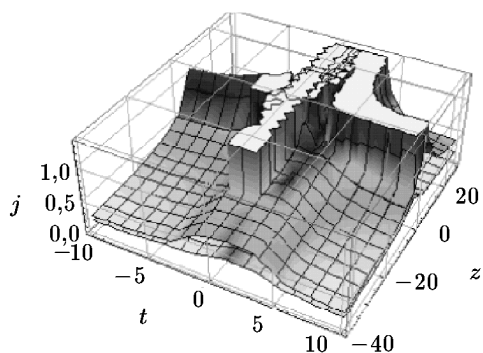


Рис. 4. 3D-область для $k = 3$

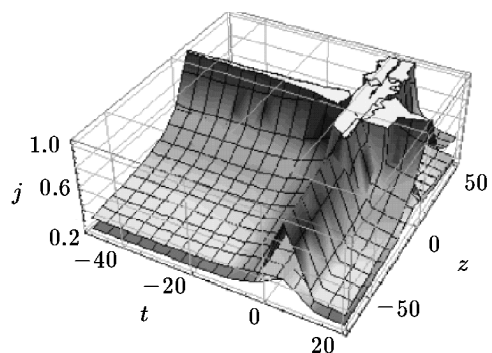


Рис. 5. 3D-область для $k = 4$

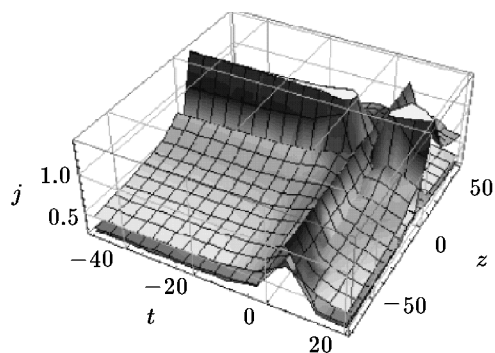


Рис. 6. 3D-область для $k = 5$

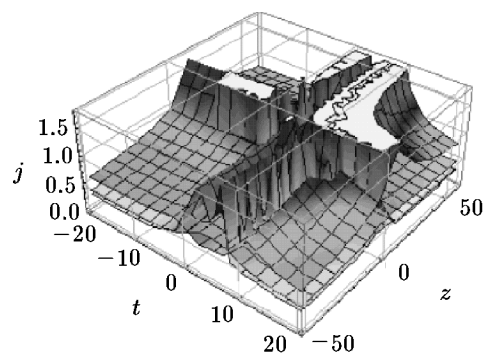


Рис. 7. 3D-область для $k = 6$

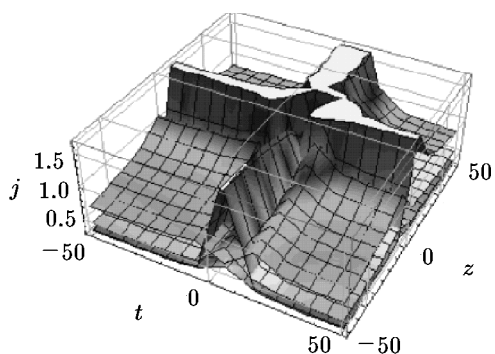


Рис. 8. 3D-область для $k = 7$

6. Численные эксперименты: реализация с переменным размером шага

В данном пункте приводятся результаты экспериментов с некоторыми начальными задачами (НЗ) для первого метода (4а)–(4в), полученного в пунктах 2, 3 и 4.

Задача 1. Жесткая система уравнений:

$$\begin{cases} y_1' = -8y_1 + 7y_2, \\ y_2' = 42y_1 - 43y_2, \end{cases} \quad y(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 8 \end{pmatrix}, \quad x \in [0, 10], \quad \begin{cases} y_1(x) = 2e^{-x} - e^{-50x}, \\ y_2(x) = 2e^{-x} + 6e^{-50x}. \end{cases}$$

Задача 2. Жесткая система уравнений:

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = 1000(1 - y_1^2)y_2 - y_1, \end{cases} \quad y(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x \in [0, 10].$$

Задача 3. Нелинейная химическая задача, решенная в [7] и [12]:

$$\begin{cases} y_1' = -0.04y_1 + 10^4 y_2 y_3, \\ y_2' = -400y_1 + 10^4 y_2 y_3 - 3 \times 10^7 y_2^2, \\ y_3' = 3 \times 10^7 y_2^2, \end{cases} \quad y(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x \in [0, 10].$$

Начальным размером шага для задач 1 и 2 является $h = 0.01$, а для задачи 3 — $h = 0.001$. Для решения этих НЗ рассмотрим гибридные формулы в (4а)–(4в) для $k = 1$:

$$\begin{cases} y_{n+\frac{3}{2}} = y_{n+1} + \frac{h}{8}(-f_n + 5f_{n+1}), & p = 2, \\ y_{n+\frac{1}{2}} = y_{n+1} + \frac{h}{24}(7f_n + 5f_{n+1}) - \frac{h^2}{12}f'_{n+1}, & p = 3, \\ y_{n+1} = \left(\frac{-1}{15}y_n + \frac{4}{5}y_{n+\frac{1}{2}} + \frac{4}{15}y_{n+\frac{3}{2}} \right) + \frac{h}{5}f_{n+1} - \frac{h^2}{10}f'_{n+1}, & p = 4, \end{cases} \quad (15)$$

а также многошаговый метод со второй производной (ММВП [7]) для $k = 2$:

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{48}(-f_n + 20f_{n+1} + 29f_{n+2}) - \frac{h^2}{8}f'_{n+2}, \quad p = 4. \quad (16)$$

Для реализации гибридного метода (4а)–(4в) для $k = 1$ с помощью техники с переменным размером шага оценим локальную ошибку $\|y_{n+1}^e - y_{n+1}\|$ на каждом шаге иотрегулируем ее, взяв новый размер шага

$$h_{\text{new}} = \left(\frac{\text{TOL}}{\|y_{n+1}^e - y_{n+1}\|} \right)^{\frac{1}{p+1}} h_{\text{old}}, \quad (17)$$

где

$$y_{n+1}^e = y_n + \frac{h}{40} \left(13f_n + 27f_{n+\frac{3}{2}} \right) - \frac{h^2}{60} (2f'_n + f'_{n+1}), \quad p = 5,$$

с гибридным предиктором

$$y_{n+\frac{3}{2}} = \frac{1}{27} (y_n + 26y_{n+1}) - \frac{8h}{27}f_{n+1} + \frac{h^2}{27}f'_{n+1}, \quad p = 3,$$

y_{n+1} — выходная точка метода в (15). В (17) h_{old} и h_{new} — предыдущий и текущий шаги соответственно, тогда как 0.9 и TOL — коэффициент надежности и допуск соответственно. В формуле регулирования размера шага (17) p — это порядок выходного метода в (15). Локальная оценка ошибки имеет следующий вид:

$$\|y_{n+1}^e - y_{n+1}\| = \left\| \frac{1}{120} \left(h \left(39f_n - 24f_{n+1} + 81f_{n+\frac{3}{2}} + 4hf'_n + 14hf'_{n+1} \right) + 32 \left(y_n - 3y_{n+\frac{1}{2}} - y_{n+\frac{3}{2}} \right) \right) \right\|.$$

Если оцененная локальная ошибка меньше допуска, т. е. $\|y_{n+1}^e - y_{n+1}\| \leq \text{TOL}$, мы принимаем текущий шаг, а затем используем (17) для предсказания размера следующего шага. Однако, если $\|y_{n+1}^e - y_{n+1}\| > \text{TOL}$, мы не принимаем этот шаг и уменьшаем размер шага на $h/2$. Аналогичным образом оценка локальной ошибки для ММВП (16) имеет следующий вид:

$$\|y_{n+1}^e - y_{n+2}\| = \left\| \frac{h}{240} \left(83f_n - 100f_{n+1} + 162f_{n+\frac{3}{2}} - 145hf_{n+2} + 8hf'_n + 4hf'_{n+1} + 30hf'_{n+2} \right) + y_n - y_{n+1} \right\|.$$

В таблицах 6–8 представлены численные решения для нашего эксперимента для иллюстрации работы метода с переменным размером шага (15). В таблицах используются следующие обозначения: ЖУММСДГТ — жестко устойчивый многошаговый метод с двумя гибридными точками, ММВП — многошаговый метод со второй производной, TOL — допуск, FC — общее число вызовов функции, FS — общее число неудавшихся шагов и TS — общее число выполненных шагов.

Таблица 6. Сравнительные результаты для задачи 1

МЕТОД	TOL	$\ y_{n+1}^e - y_{n+k}\ $	FC	FS	TS
ЖУММСДГТ	10^{-2}	$4.0292e - 03$	70	2	35
ММВП [7]	10^{-2}	$5.2341e - 03$	96	12	73
ЖУММСДГТ	10^{-4}	$3.8211e - 05$	112	3	56
ММВП [7]	10^{-4}	$5.8960e - 05$	284	14	132
ЖУММСДГТ	10^{-6}	$2.3765e - 07$	256	2	128
ММВП [7]	10^{-6}	$5.9048e - 07$	357	16	233

Таблица 7. Сравнительные результаты для задачи 2

МЕТОД	TOL	$\ y_{n+1}^e - y_{n+k}\ $	FC	FS	TS
ЖУММСДГТ	10^{-2}	$5.9048e - 03$	11636	13	5805
ММВП [7]	10^{-2}	$1.9894e + 01$	471224	2685	117806
ЖУММСДГТ	10^{-4}	$5.9048e - 05$	23322	3	56
ММВП [7]	10^{-4}	$5.9076e - 05$	987280	11	246820

Таблица 8. Сравнительные результаты для задачи 3

МЕТОД	TOL	$\ y_{n+1}^e - y_{n+k}\ $	FC	FS	TS
ЖУММСДГТ	10^{-2}	$1.1753e - 03$	6	1951	3
ММВП [7]	10^{-2}	$8.6564e + 01$	240	32332	60
ЖУММСДГТ	10^{-4}	$1.6766e - 05$	16	2248	8
ММВП [7]	10^{-4}	$1.5781e - 04$	136	45780	34

Результаты, представленные в таблицах 6–8, были получены с использованием ноутбука фирмы Toshiba с процессором Intel(R)Core(TM)i3-2310M со скоростью 2.10 ГГц, памятью (ОЗУ) 4.00 ГБ и 64-разрядной операционной системой Windows. Численные результаты табл. 6 показывают, что гибридный метод ЖУММСДГТ (15) и ММВП имеют одинаковый порядок точности для данных допусков, но ЖУММСДГТ (15) имеет меньше неудавшихся шагов.

Аналогично результаты, представленные в таблицах 7 и 8, показывают, что ЖУММСДГТ (15) сравним с ММВП (16) в задачах 2 и 3 для данного допуска. Согласно статистике таблиц 6–8, ЖУММСДГТ (15) требует меньших вычислительных затрат, поскольку общее число функциональных вызовов и шагов, выполненных для ЖУММСДГТ (15), меньше чем для ММВП (16).

Эксперимент показывает, что максимальные шаги по x компьютер может вычислить при $x = 10$. Другое ограничение — неспособность ноутбука вычислять ошибку при фиксированном допуске (10^{-6}) и ниже при решении задач 2 и 3.

В заключение следует отметить, что в данной статье представлено семейство жестко устойчивых ЛММ со второй производной с двумя гибридными точками для прямого решения жестких НЗ в ОДУ (3). Основная идея основана на коллокации для получения методов в (4а)–(4в). Преимущество этих методов в том, что с их помощью можно преодолеть порядковый барьер Дальквиста для ЛММ. Первый член новых гибридных схем реализуется при помощи стратегии переменного размера шага и численных экспериментов, результаты которых приведены в таблицах 6–8. Они показывают, что метод (4а)–(4в) при низком допуске оказывается лучше, чем ММВП [7] на решенных тестовых задачах.

Литература

1. **Butcher J.C.** A modified multistep method for the numerical integration of ODEs // J. Assoc. Comput. Mach. — 1965. — Vol. 12. — P. 124–135.
2. **Butcher J.C.** The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equation: Runge Kutta and General Linear Methods. — Chichester: Wiley, 1987.
3. **Butcher J.C.** Some new hybrid methods for IVPs // Computational Ordinary Differential Equations. / J.R. Cash and I. GladWell. — Oxford: Clarendon Press, 1992. — P. 29–46.
4. **Butcher J.C., O’Sullivan A.E.** Nordsieck methods with an off-step point // Numerical Algorithms. — 2002. — Vol. 31. — P. 87–101.
5. **Gragg W.B., Stetter H.J.** Generalized multistep predictor-corrector methods // J. Assoc. Comput. Mach. — 1964. — Vol. 11. — P. 188–209.
6. **Dahlquist G.** On Stability and Error Analysis for Stiff Nonlinear Problems. Part 1. — Stockholm: Dept. of Information Processing, Computer Science, Royal Inst. of Technology, 1975. — (Report TRITA-NA-7508).
7. **Enright W.H.** Second derivative multistep methods for stiff ODEs // SIAM. J. Numer. Anal. — 1974. — Vol. 11, iss. 2. — P. 321–331.
8. **Enright W.H., Hull T.E., and Lindberg B.** Comparing numerical methods for stiff systems of ODEs // BIT Numerical Mathematics. — 1975. — Vol. 15, № 1. — P. 10–48.
9. **Fatunla S.O.** Numerical Methods for Initial Value Problems in ODEs. — New York: Academic Press, 1978.
10. **Gear C.W.** The automatic integration of stiff ODEs // Information Processing 68: Proc. IFIP Congress, Edinburgh, 1968 / A.J.H. Morrell. — Amsterdam, North-Holland, 1969. — P. 187–193.

11. **Gear C.W.** Algorithm 407: DIFSUB for solution of ODEs // Comm. ACM. — 1971. — Vol. 14, iss. 3. — P. 185–190.
12. **Gear C.W.** Numerical Initial Value Problems in ODEs. — Englewood Cliffs, N.J., USA: Prentice-Hall, 1971.
13. **Higham D.J., Higham N.J.** Matlab Guide. — Philadelphia: SIAM, 2000.
14. **Ikhile M.N.O., Okuonghae R.I.** Stiffly stable continuous extension of second derivative LMM with an off-step point for IVPs in ODEs // J. Nig. Assoc. Math. Physics. — 2007. — Vol. 11. — P. 175–190.
15. **Kohfeld J.J., Thompson G.T.** Multistep methods with modified predictors and correctors // J. Assoc. Comput. Mach. — 1967. — Vol. 14. — P. 155–166.
16. **Lambert J.D.** Numerical Methods for Ordinary Differential Systems. The Initial Value Problems. — Chichester: Wiley, 1991.
17. **Lambert J.D.** Computational Methods for Ordinary Differential Systems. The Initial Value Problems. — Chichester: Wiley, 1973.
18. **Nevanlinna O.** On the numerical integration of nonlinear IVPs by linear multistep methods // BIT Numerical Mathematics. — 1977. — Vol. 17. — P. 58–71.
19. **Owren B., Zennaro M.** Order barriers for continuous explicit Runge–Kutta methods // Mathematics and Computation. — 1991. — Vol. 56. — P. 645–661.
20. **Okuonghae R.I.** Stiffly Stable Second Derivative Continuous LMM for IVPs in ODEs: PhD Thesis. — Nigeria, Benin City: Dept. of Math. University of Benin, 2008.
21. **Okuonghae R.I., Ogunleye S.O., and Ikhile M.N.O.** Some explicit general linear methods for IVPs in ODEs // J. of Algorithms and Comp. Technology. — 2013. — Vol. 7, № 1. — P. 41–63.
22. **Okuonghae R.I.** Variable order explicit second derivative general linear methods // Comp. Applied Math. — 2014. — Vol. 33. — P. 243–255.
23. **Okuonghae R.I., Ikhile M.N.O.** On the construction of high order $A(\alpha)$ -stable hybrid linear multistep methods for stiff IVPs and ODEs // Numerical Analysis and Appl. — 2012. — Vol. 5, № 3. — P. 231–241.
24. **Okuonghae R.I., Ikhile M.N.O.** Second derivative general linear methods // Numerical Algorithms. — 2014. — Vol. 67, iss. 3. — P. 637–654.
25. **Okuonghae R.I., Ikhile M.N.O.** A class of hybrid linear multistep methods with $A(\alpha)$ -stability properties for stiff IVPs in ODEs // J. Numer. Math. — 2013. — Vol. 21, № 2. — P. 157–172.
26. **Okuonghae R.I., Ikhile M.N.O.** A -stable high order hybrid linear multistep methods for stiff problems // J. of Algorithms Comp. Technology. — 2014. — Vol. 8, № 4. — P. 441–469.
27. **Widlund O.** A note on unconditionally stable linear multistep methods // BIT Numerical Mathematics. — 1967. — Vol. 7. — P. 65–70.

*Поступила в редакцию 7 августа 2014 г.,
в окончательном варианте 21 октября 2014 г.*

