



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Галанин М.П., Конев С.А.

О методе Лоусона и
условиях жёсткого порядка
для экспоненциальных
методов

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Галанин М.П., Конев С.А. О методе Лоусона и условиях жёсткого порядка для экспоненциальных методов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 261. 26 с. doi:[10.20948/prepr-2018-261](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-261)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-261>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
Российской академии наук

М.П. Галанин, С.А. Конев

О методе Лоусона
и условиях жёсткого порядка
для экспоненциальных методов

Москва — 2018

Галанин М.П., Конев С.А.

О методе Лоусона и условиях жёсткого порядка для экспоненциальных методов

В работе представлен краткий обзор основных публикаций по теме экспоненциальных методов. Представлено определение экспоненциальных методов с выделением методов Лоусона, с помощью теории деревьев Бутчера выведены классические условия порядка. Условия жёсткого порядка представлены без вывода. Каждый результат, описанный в тексте, сопровождается историческими комментариями.

Ключевые слова: жёсткие системы; численные методы; деревья Бутчера; экспоненциальные методы; метод Лоусона; условия жёсткого порядка.

Mikhail Pavlovich Galanin, Stanislav Andreevich Konev

On Lawson method and stiff order conditions for exponential integrators

The paper deals with the main publications on exponential integrators. The general definitions of exponential integrators with emphasize on Lawson method are presented, classical order conditions derived with the help of Butcher trees theory. Stiff order conditions formulated without a proof. Every result in the text is followed by historical remarks.

Key words: stiff systems; numerical methods; Butcher trees; exponential integrators; Lawson method; stiff order conditions.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 18-01-00252 и № 18-31-20020).

Введение

Рассмотрим следующую задачу Коши для неавтономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) вида:

$$u' = f(t, u), \quad 0 < t \leq T, \quad (0.1a)$$

$$u(0) = u_0, \quad (0.1b)$$

где $u = u(t) = (u^1(t), \dots, u^d(t))^T$ — точное решение задачи, $u_0 = (u_0^1, \dots, u_0^d)^T$ — вектор начальных условий, $f = (f^1(t, u), \dots, f^d(t, u))$ — вектор-функция правой части, d — размерность задачи (так же, как и авторы [1], мы используем верхние индексы для нумерации компонент векторов).

Будем считать, что задача является жёсткой ([2, §IV.1], [3, §5.4]), т.е. величина S , задаваемая формулой

$$S = \sup_{t \in (0, T]} \left(\max_{1 \leq i \leq d} |\operatorname{Re} \lambda_i(t)| / \min_{1 \leq i \leq d} |\operatorname{Re} \lambda_i(t)| \right), \quad (0.2)$$

велика. Здесь $\{\lambda_i(t)\}_{i=1}^d$ — собственные значения матрицы Якоби $J(t)$ правой части $f(t, u)$ по переменной u на точном решении $u(t)$ задачи (0.1): $J(t) = f_u(t, u(t))$.

Определение (0.2) означает, что в системе (0.1) есть как медленно меняющиеся («медленные»), так и быстро меняющиеся («быстрые») компоненты. Известно [2], что подобные системы достаточно трудно интегрировать с помощью классических явных методов из-за возникающих сильных ограничений на шаг интегрирования, связанных с устойчивостью численного решения.

Одним из возможных подходов к решению данной задачи являются явные методы Рунге—Кутты (или, короче, РК-методы) с расширенными областями устойчивости ([4], [5, §3.11]).

Другой подход — это применение неявных методов РК и их эффективная адаптация к решению жёстких задач. Наилучшими с точки зрения теории вычислительными качествами (аппроксимация и устойчивость) являются неявные методы (например, полностью неявные методы РК [6]) — для них разработана аккуратная теория порядка, известны результаты об их устойчивости ([1], [2]).

Но при этом их реализация на ЭВМ достаточно сложна. Например, для получения решения y_{n+1} системы размерности d на новом временном слое с помощью s -стадийного полностью неявного метода РК необходимо решить систему нелинейных уравнений размерности $s \cdot d$ — это очень трудоёмкая задача в случае больших d . Поэтому достаточно популярными стали диагонально-неявные (diagonally-implicit RK methods, DIRK) методы РК, а затем — и их упрощения: методы Розенброка [7], а также методы Розенброка—Ваннера [2, §IV.7].

При всех достоинствах неявных (или диагонально-неявных) методов РК и методов Розенброка, хорошо показавших себя при решении жёстких задач,

все они обладают общим недостатком: они не дают точных решений в случае линейных задач. Это означает, что применение упомянутых методов к решению линейной задачи (также эта задача известна как тестовая задача Далквиста) вида:

$$u' = \lambda u, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad (0.3a)$$

$$u(0) = u_0, \quad (0.3b)$$

точным решением которой является $u(t) = \exp(\lambda t)u_0$, даёт за один шаг численное решение вида $y(h) = R(\lambda h)u_0$, где $R(z)$ — функция устойчивости метода, отличная от экспоненциальной (чаще всего это дробно-рациональная функция). В многомерном случае множитель λ заменяется на произвольную $(d \times d)$ матрицу A , и тогда решение имеет вид $u(t) = \exp(At)u_0$ (определение матричной экспоненты и способы её вычисления см. в [8], [9]). В итоге даже полностью неявные методы при всей своей вычислительной сложности не дают математически точного решения линейных задач.

Поэтому актуальным становится вопрос получения таких методов, которые при решении задач некоторого класса давали бы точные решения (в отсутствие ошибок округления), такими методами являются экспоненциальные методы интегрирования жёстких систем. Данная работа является кратким обзором публикаций по тематике экспоненциальных методов и условий порядка для них.

В работах [11], [12] построен экспоненциальный метод интегрирования жёстких систем на основе классического метода РК. По существу, построенный метод является вариантом метода Лоусона [10], поэтому в работе уделено особое внимание этому методу.

Работа состоит из следующих частей: в разделе 1 представлены определения методов Лоусона и общих экспоненциальных методов, даны исторические комментарии, в разделе 2 обсуждается вывод классических условий порядка на основе теории корневых деревьев Бутчера, в разделе 3 представлен мотивирующий пример и условия жёсткого порядка сходимости экспоненциальных методов, в заключении подведены итоги работы.

1. Определение экспоненциальных методов

В данном разделе вводится конструкция общих экспоненциальных методов и обсуждаются некоторые детали их реализации. Представлены ссылки на первые публикации по данной тематике.

1.1. Методы Лоусона

Одна из первых конструкций численного метода интегрирования жёстких систем, который давал бы точные решения линейных задач, представлена

в работе Лоусона (J. Lawson) [10] — в ней рассматривается класс жёстко-устойчивых задач вида (0.1), для которых матрица $J(t)$ имеет собственные значения с отрицательной вещественной частью.

Расчётные формулы метода строятся следующим образом: к исходной задаче (0.1) применяется формальная замена вида

$$z(t) = \exp(-tA)u(t), \quad (1.1)$$

где A — некоторая матрица (соображения по поводу её выбора будут представлены далее). Тогда задача (0.1) переходит в задачу (1.2) для функции $z(t)$:

$$z'(t) = e^{-tA}[f(t, e^{tA}z) - Ae^{tA}z], \quad (1.2a)$$

$$z(0) = u_0. \quad (1.2b)$$

Далее для решения полученной задачи (1.2) используется классический метод РК (в работе [10] — явный четырёхстадийный метод), а затем в полученных формулах осуществляется замена, обратная (1.1); это приводит к следующим расчётным формулам (подробный вывод представлен в оригинальной работе и в [11], [12]):

$$y_{n+1} = e^{hA}y_n + \sum_{i=1}^s b_i e^{(1-c_i)hA} k_i^*, \quad (1.3a)$$

$$k_i^* = f(t_n + c_i h, p_i^*) - A p_i^*, \quad (1.3b)$$

$$p_i^* = e^{c_i h A} y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} e^{(c_i - c_j)hA} k_j^*, \quad (1.3c)$$

где $\{c_i\}_{i=1}^s$, $\{b_i\}_{i=1}^s$, $\{a_{ij}\}_{i,j=1}^s$ — коэффициенты исходного s -стадийного явного метода РК. Формулы (1.3) задают экспоненциальный метод РК, поскольку в их записи присутствуют экспоненциальные функции матричного аргумента. По фамилии автора публикации [10] подобные методы стали называть методами Рунге—Кутты—Лоусона (RKL-методы), или просто экспоненциальными методами Лоусона.

Замечание 1.1. По построению методы Лоусона точны на линейных задачах с нулевой правой частью, более того, они A -устойчивы (если для матричной экспоненты используется A -устойчивая аппроксимация). Также с помощью выбора матрицы A на каждом шаге интегрирования можно управлять жёсткостью модифицированной задачи: если считать, что вся жёсткость обусловлена слагаемым Au , то модифицированная правая часть $g(t, u) = f(t, u) - Au$ должна иметь умеренную константу Липшица, а потому применение классических явных методов РК оправдано. Следовательно, возможно вести расчёт с помощью явного метода с достаточно крупным шагом.

Замечание 1.2. При $A = 0$ расчётные формулы (1.3) метода Лоусона переходят в формулы метода РК, на основе которого он был получен. Назовём такой РК-метод *внутренним* для метода Лоусона (underlying Runge—Kutta method). В работах [10], [11], [12] показано, что метод Лоусона сохраняет порядок сходимости своего внутреннего метода.

Замечание 1.3. Формулировка метода Лоусона проста, но за этой простотой скрывается один важный нюанс: как вычислять матричную экспоненту в методе Лоусона? В оригинальной работе использовалась диагональная (2,2)-аппроксимация Паде совместно с масштабированием (современная формулировка алгоритма может быть найдена в [9], более кратко метод описан в работе [8]). Поскольку на момент публикации описанная реализация метода Лоусона выглядела достаточно сложной (в частности, построение (2,2)-аппроксимации Паде — самая трудоёмкая часть алгоритма), метод не получил широкого распространения. По данной тематике позже вышла ещё одна работа [13] того же автора.

В работе [14] для вычисления матричной экспоненты применяется решение серии специальных задач Коши. Далее экспонента используется для получения решения исходной задачи методом типа метода конечных суперэлементов [14], [15, §31].

1.2. Другие экспоненциальные методы

Без потери общности можем считать, что рассматриваемая система (0.1) является автономной, т.е. в ней функция f правой части не зависит явно от t . Если это не так, то представленную систему всегда можно привести к автономному виду, добавив ещё одно неизвестное: $v^{d+1} = t$, поэтому, если не сказано обратное, здесь и далее будет рассматриваться задача Коши для автономной системы вида

$$u' = f(u), \quad t_0 < t \leq T, \quad (1.4a)$$

$$u(t_0) = u_0. \quad (1.4b)$$

Представленные выше формулы (1.3) метода Лоусона — не единственный вариант построения экспоненциальных методов. Другой вариант формулировки экспоненциальных методов состоит в следующем (при изложении мы следуем работе [16]): выделим в (1.4) линейную часть и рассмотрим модифицированную задачу:

$$u' = Au + g(u), \quad (1.5a)$$

$$u(t_0) = u_0, \quad (1.5b)$$

здесь A — некоторая матрица, стратегия вычисления которой пока никак не конкретизируется. Формально поставленная задача (1.5) может быть сведена к интегральному уравнению. Пусть t_n — некоторая точка на отрезке

интегрирования $[0, T]$, тогда справедливо уравнение

$$u(t_n + \theta h) = e^{\theta h A} u(t_n) + \int_0^{\theta h} e^{(\theta h - \xi) A} g(u(t_n + \xi)) d\xi, \quad (1.6)$$

где $h = t_{n+1} - t_n$ — шаг интегрирования, а $\theta \in [0, 1]$ — параметр. В частности, при $\theta = 1$ имеем:

$$u(t_{n+1}) = e^{h A} u(t_n) + \int_0^h e^{(h - \xi) A} g(u(t_n + \xi)) d\xi. \quad (1.7)$$

Введём на отрезке $[0, 1]$ несовпадающие узлы $\{c_i\}_{i=1}^s$ и построим по ним интерполяционный полином $L_{s-1}(\xi)$ степени $(s - 1)$ для функции $p_n(\xi) = g(u(t_n + \xi))$, тогда

$$L_{s-1}(\xi) = \sum_{j=1}^s l_j(\xi) p_{n,j},$$

где $p_{n,j} = p_n(c_j h) = g(u(t_n + c_j h))$, а $l_j(\xi)$ — классические базисные полиномы Лагранжа вида

$$l_j(\xi) = \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^s \frac{\xi/h - c_m}{c_j - c_m}.$$

Подстановка $L_{s-1}(\xi)$ в формулу (1.7) даёт квадратурную формулу интерполяционного типа

$$y_{n+1} = e^{h A} y_n + h \sum_{i=1}^s b_i(h A) G_{n,i}, \quad (1.8)$$

где y_n — приближение к значению $u(t_n)$, $Y_{n,i}$ — приближение к значению $u(t_n + c_i h)$ в промежуточных узлах, $G_{n,i} = g(Y_{n,i})$, а $b_i(z)$ — функции матричного аргумента, имеющие вид

$$b_i(h A) = \frac{1}{h} \int_0^h e^{(h - \xi) A} l_i(\xi) d\xi. \quad (1.9)$$

Хотя метод построен, необходимы вычислительные формулы для определения значений $Y_{n,i}$ — делается это по аналогии: используем тот же набор узлов $\{c_i\}_{i=1}^s$, но подставляем интерполянт $L_{s-1}(\xi)$ в (1.6) при $\theta = c_i$:

$$Y_{n,i} = e^{c_i h A} y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij}(h A) G_{n,j}, \quad (1.10)$$

$$a_{ij}(h A) = \frac{1}{h} \int_0^{c_i h} e^{(c_i h - \xi) A} l_j(\xi) d\xi. \quad (1.11)$$

Поскольку $l_j(\xi)$ — многочлен степени не выше $(s - 1)$, то фактически коэффициенты $b_i(hA)$ и $a_{ij}(hA)$ являются линейными комбинациями функций

$$\varphi_j(tA) = \frac{1}{t^j} \int_0^t e^{(t-\xi)A} \frac{\xi^{j-1}}{(j-1)!} d\xi, \quad 1 \leq j \leq s, \quad (1.12)$$

для которых выполнено рекуррентное соотношение

$$\varphi_{k+1}(z) = \frac{\varphi_k(z) - \varphi_k(0)}{z}, \quad \varphi_0(z) = e^z, \quad \varphi_k(0) = 1/k!.$$

Представленные формулы (1.8), (1.10) задают т.н. коллокационный экспоненциальный метод РК (по аналогии с классическими коллокационными методами [1, §II.12]). В указанной выше работе [16] проведено подробное исследование методов данного семейства. Отметим, что при $s \geq 2$ все коллокационные методы являются чисто неявными, что усложняет их реализацию.

От коллокационных экспоненциальных методов РК можно перейти к общей формулировке экспоненциальных одношаговых s -стадийных методов: будем считать, что функции $a_{ij}(z)$ и $b_i(z)$ не обязательно вычисляются по формулам (1.11), (1.9), а являются достаточно произвольными функциями матричного аргумента. В связи с этим введём следующее

Определение 1. Назовём s -стадийным экспоненциальным методом Рунге—Кутты решения задачи (1.5) численный метод, один шаг которого выражается формулами

$$y_{n+1} = e^{hA} y_n + h \sum_{i=1}^s b_i(hA) G_{n,i}, \quad (1.13a)$$

$$G_{n,i} = g(Y_{n,i}), \quad 1 \leq i \leq s, \quad (1.13b)$$

$$Y_{n,i} = e^{c_i hA} y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij}(hA) G_{n,j}, \quad 1 \leq i \leq s, \quad (1.13c)$$

где $\{c_i\}_{i=1}^s$ — узлы на отрезке $[0, 1]$, а $\{a_{ij}(z)\}_{i,j=1}^s$, $\{b_i(z)\}_{i=1}^s$ — функции матричного аргумента, задающие численный метод.

Заметим, что представленное определение неполно, если не указано, как вычисляется матрица A . Существуют две базовые стратегии: либо матрица A в задаче (1.5) является фиксированной, и тогда имеем простой *экспоненциальный метод Рунге—Кутты*; либо матрица A пересчитывается от точки к точке, например, это матрица Якоби правой части исходной задачи (1.4), вычисленная в точке y_n : $A(t_n) = J(t_n) = f'_u(y_n)$ — тогда метод называется *экспоненциальным методом Розенброка*.

Как и в случае методов Лоусона, при $A = 0$ общий экспоненциальный метод (1.13) переходит в свой внутренний метод РК. Для экспоненциальных

методов РК так же, как и для классических методов РК, удобно использование таблицы Бутчера.

Замечание 1.4. Заметим, что методы Лоусона (1.3) тоже входят в класс (1.13) общих экспоненциальных методов РК с функциями

$$a_{ij}(z) = e^{(c_i - c_j)z}, \quad b_i(z) = e^{(1 - c_i)z}.$$

Впервые методы, подобные (1.13), появились в работе [17], в которой для решения дифференциальных уравнений предлагалось использовать вариант экспоненциального метода с вычислением только одной функции $\varphi_1(z)$. Одной из первых русскоязычных публикаций по данной теме является [18], где для вычисления функции $\varphi_1(z)$ применяется $(0, 1)$ -аппроксимация Паде в комбинации с масштабированием исходной матрицы. На протяжении XX века периодически появлялись различные публикации, посвящённые экспоненциальным методам (в основном с целью получить метод, который решал бы линейные задачи точно, см. [19]), но особого распространения они не получили в силу сложности вычисления матричных функций $\varphi_k(z)$.

Интерес к экспоненциальным методам возобновился в конце 1990-х годов с появлением публикации [20], посвящённой эффективной реализации экспоненциального метода Розенброка специального вида, названного авторами *exp4*. Для вычисления функций $\varphi_k(z)$ авторами использовались методы кривого подпространства.

2. Классические условия порядка

Для представленного класса общих экспоненциальных методов (1.13) необходимо разработать общую теорию порядка и сходимости. Решению данной задачи посвящён текущий раздел. Напомним определение порядка сходимости для классического метода РК, которое без изменений переносится на экспоненциальные методы:

Определение 2. Говорят, что экспоненциальный метод Рунге—Кутты (1.13) имеет порядок сходимости p , если для точного решения $u(t)$ и численного решения y_1 имеет место оценка

$$\|u(t_0 + h) - y_1\| \leq Ch^{p+1},$$

где константа C не зависит от h .

Замечание 2.1. В представленном определении считается, что численное решение y_1 получено в результате одного шага метода (1.13) при начальном значении $y_0 = u(t_0)$.

Впервые классические условия порядка для общих экспоненциальных методов получены в работе [21]; достаточно полное исследование методов данного семейства проведено в работе [22] (где они называются *адаптивными*

методами РК из-за функций $a_{ij}(z)$ и $b_i(z)$). Авторами [23] представлен вывод условий порядка с помощью обобщения теории B -рядов. Мы же будем следовать идеям работы [24] при выводе классических условий порядка.

2.1. Производные точного решения

Для вывода условий порядка необходимы производные точного и численного решений. Начнём с точного решения — для этого обобщим подход, описанный в [1, §II.2], на случай задачи (1.5), чтобы получить выражения для производных. Заметим, что здесь и далее мы используем бескоординатный подход, подробно описанный в работах [25, §III.1], [26, глава 31]. Выражение для первой производной u' решения получаем из задачи (1.5):

$$u' = f(u) = Au + g(u),$$

— тогда поставим в соответствие дереву $\tau_1 = \bullet$ элементарный дифференциал $\mathcal{F}(\tau_1)(u_0) = f(u_0)$. Продифференцируем правую часть уравнения (1.5) по t и учтём, что $u' = f(u)$:

$$u''(t_0) = f'u' = f'f = (A + g'(u))'f = Af(u_0) + g'(u_0)f(u_0),$$

где штрих у f и g означает дифференцирование по набору аргументов u . Будем считать, что полученное выражение есть сумма двух элементарных дифференциалов следующего вида:

$$\mathcal{F}(\circlearrowleft)(u_0) = Af(u_0), \quad \mathcal{F}(\bullet\circlearrowleft)(u_0) = g'(u_0)f(u_0),$$

— т.е. оператору A соответствуют белые узлы, а производным отображения g — чёрные (если из чёрного узла не выходят ветви, то он соответствует f). Продолжая далее, получим:

$$\begin{aligned} u'''(t_0) &= f''(f, f) + f'f'f \\ &= \underbrace{g''(f, f)}_{\text{белый узел}} + \underbrace{AAf}_{\text{белый узел}} + \underbrace{Ag'f}_{\text{чёрный узел}} + \underbrace{g'Af}_{\text{белый узел}} + \underbrace{g'g'f}_{\text{чёрный узел}} \end{aligned}$$

— здесь под каждым элементарным дифференциалом представлено соответствующее ему дерево (все дифференциалы вычислены в точке u_0). Напомним, что в координатной записи i -ые компоненты выражений $f''(f, f)$ и $g''(f, f)$, вычисленные на u_0 , соответственно имеют вид [1, §II.2]:

$$\sum_{j,k} f_{jk}^i(u_0) f^j(u_0) f^k(u_0), \quad \sum_{j,k} g_{jk}^i(u_0) f^j(u_0) f^k(u_0),$$

где верхние индексы отвечают за номера соответствующих компонент, а нижние индексы отвечают за частные производные по компонентам, соответствующим индексу, например: $f_{jk}^i = \partial^2 f^i / \partial u_j \partial u_k$. Общие определения и пояснения для бескоординатного случая описаны в указанных выше монографиях [25, §III.1], [26, глава 31].

По аналогии с тем, как в классическом случае каждому элементарному дифференциалу ставится в соответствие корневое дерево, так и в случае экспоненциального метода каждому слагаемому, входящему в выражение для $u^{(q)}$, $q = 1, 2, 3$, можно поставить в соответствие корневое двухцветное дерево. Продолжая процесс дифференцирования, получим, что в разложении $u^{(q)}$ возникают элементарные дифференциалы, соответствующие всевозможным двухцветным корневым деревьям порядка q и удовлетворяющие следующим двум правилам:

- 1) белый узел (соответствующий оператору A) никогда не может быть самым верхним узлом,
- 2) узлы, из которых исходят две и более ветвей, никогда не могут быть белыми (т.к. $\partial A / \partial u = 0$).

Видно, что ситуация во многом аналогична классическому случаю [1, §II.2], к тому же функции $\alpha(\tau)$ и $\gamma(\tau)$, определяемые для двухцветных деревьев τ , дают тот же результат, что и в «одноцветном» случае.

2.2. Производные численного решения

Из-за наличия в записи решения (1.13) матричных экспонент его представление с использованием формулы Тейлора может быть сопряжено с трудностями. Поэтому для вывода условий порядка удобно воспользоваться следующим предположением: пусть экспоненциальный метод (1.13) сохраняет положение равновесия исходной задачи, т.е. если $y_n = u^*$, и $f(u^*) = 0$, откуда $Au^* + g(u^*) = 0$, то и $y_{n+1} = u^*$. Тогда, проводя элементарные преобразования, получим, что коэффициенты $b_i(z)$ метода должны удовлетворять условию

$$\frac{e^z - 1}{z} = \varphi_1(z) = \sum_{i=1}^s b_i(z), \quad (2.1)$$

аналогичное верно и для коэффициентов $a_{ij}(z)$:

$$c_i \varphi_1(c_i z) = \sum_{j=1}^s a_{ij}(z), \quad 1 \leq j \leq s. \quad (2.2)$$

Замечание 2.2. Нетрудно видеть, что экспоненциальный метод Лоусона (1.3) не удовлетворяет этим условиям, а значит, не сохраняет положение равновесия. Поэтому, строго говоря, приведённый ниже анализ к нему не применим. С другой стороны, для методов Лоусона в работах [10], [11], [12] показано, что в случае конечномерной задачи метод сохраняет порядок сходимости внутреннего метода, поэтому его исключение из рассмотрения в данном разделе не критично.

Допустим, что метод (1.13) удовлетворяет указанным условиям (2.1), (2.2) сохранения положения равновесия, тогда из расчётных формул возможно исключить матричные экспоненты:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i(hA) (G_{n,i} + Ay_n), \quad (2.3a)$$

$$G_{n,i} = g(Y_{n,i}), \quad 1 \leq i \leq s, \quad (2.3b)$$

$$Y_{n,i} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij}(hA) (G_{n,j} + Ay_n), \quad 1 \leq i \leq s. \quad (2.3c)$$

— полученный метод формально можно трактовать как классический метод РК, у которого от точки к точке меняются значения коэффициентов. Без потери общности достаточно получить производные только внутренних стадий $Y_{n,i}$; для их вычисления воспользуемся формулой Лейбница [1, §II.2]:

$$\left. \frac{d^q}{dh^q} [h\psi(h)] \right|_{h=0} = q \left. \frac{d^{q-1}}{dh^{q-1}} \psi(h) \right|_{h=0},$$

где $\psi(h)$ — достаточное число раз дифференцируемая функция.

Если считать, что для получения значения y_{n+1} метод (2.3) начинает расчёт с точного решения $u_n = u(t_n)$, получим следующие значения производных:

$$\begin{aligned} Y_{n,i} \Big|_{h=0} &= y_n = u_n = f(u_n), \\ Y'_{n,i} \Big|_{h=0} &= \sum_{j=1}^s a_{ij}(hA) (G_{n,j} + Ay_n) \Big|_{h=0} = \sum_{j=1}^s a_{ij}(0) f(u_n), \\ Y''_{n,i} \Big|_{h=0} &= 2 \sum_{j=1}^s a'_{ij}(hA) A (G_{n,j} + Ay_n) \Big|_{h=0} + 2 \sum_{j=1}^s a_{ij}(hA) g'(Y_{n,j}) Y'_{n,j} \Big|_{h=0} \\ &= 2 \sum_{j=1}^s a_{ij}(0) A f(u_n) + 2 \sum_{j=1}^s a_{ij}(0) a_{jk}(0) g'(u_n) f(u_n). \end{aligned}$$

Продолжая этот процесс далее, увидим, что в разложении решения возникают элементарные дифференциалы из разложения точного решения, но домноженные на элементарный вес $\Phi_i(\tau)$ и функции $\gamma(\tau)$, где τ — соответствующее корневое дерево. Как отмечено выше, функции $\gamma(\tau)$ определяются так же, как и в классическом случае, а определение веса $\Phi_i(\tau)$ в данном «двухцветном» случае вводится иначе. Для простоты обозначений будем считать, как и авторы работы [24], что функции $a_{ij}(z)$ и $b_i(z)$ представимы в виде следующих разложений:

$$a_{ij}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_{ij}^{(k)} z^k, \quad b_i(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \beta_i^{(k)} z^k,$$

тогда члены, возникающие в условиях порядка, определяются по правилам:

- 1) Чёрный узел, за которым следует ещё один чёрный узел, соответствует коэффициенту $\alpha_{ij}^{(0)}$; если узел является корнем, то он соответствует коэффициенту $\beta_i^{(0)}$.
- 2) Если в дереве имеется k следующих друг за другом белых узлов, за которыми следует чёрный узел, то им ставится в соответствие коэффициент $\beta_i^{(k)}$ или коэффициент $\alpha_{ij}^{(k)}$ в зависимости от того, идут ли они из корня, или нет.

Описанная формулировка поясняется таблицей 1, содержащей корневые двухцветные деревья τ порядка $q \leq 4$, соответствующие им элементарные дифференциалы $\mathcal{F}(\tau)(u)$, значения функций $\gamma(\tau)$, $\alpha(\tau)$ и условия порядка (таблица взята из работы [24] с некоторыми модификациями).

Таблица 1. Двухцветные деревья и их характеристики

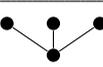
q	№	Дерево τ	$\gamma(\tau)$	$\alpha(\tau)$	$\mathcal{F}(\tau)(u)$	Условие порядка
1	1		1	1	f	$\sum \beta_i^{(0)} = 1/\gamma(t)$
2	2		2	1	$g'f$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	3		2	1	Af	$\sum \beta_i^{(1)} = 1/\gamma(t)$
3	4		3	1	$g''(f, f)$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{ik}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	5		3	1	$g'g'f$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{jk}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	6		3	1	$g' Af$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(1)} = 1/\gamma(t)$
	7		3	1	$Ag'f$	$\sum \beta_i^{(1)} \alpha_{ij}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	8		3	1	AAf	$\sum \beta_i^{(2)} = 1/\gamma(t)$
4	9		4	1	$g'''(f, f, f)$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{ik}^{(0)} \alpha_{il}^{(0)} \alpha_{ik}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	10		8	3	$g''(g'f, f)$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{ik}^{(0)} \alpha_{kl}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	11		8	3	$g''(Af, f)$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{ik}^{(1)} = 1/\gamma(t)$
	12		12	1	$g'g''(f, f)$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{jk}^{(0)} \alpha_{jl}^{(0)} = 1/\gamma(t)$

Таблица 1. Продолжение с предыдущей страницы

q	№	Дерево τ	$\gamma(\tau)$	$\alpha(\tau)$	$\mathcal{F}(\tau)(u)$	Условие порядка
	13		12	1	$Ag''(f, f)$	$\sum \beta_i^{(1)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{ik}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	14		24	1	$g'g'g'f$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{jk}^{(0)} \alpha_{kl}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	15		24	1	$g'g' Af$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{jk}^{(1)} = 1/\gamma(t)$
	16		24	1	$g' Ag' f$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(1)} \alpha_{jk}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	17		24	1	$Ag'g'f$	$\sum \beta_i^{(1)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{jk}^{(0)} = 1/\gamma(t)$
	18		24	1	$g'AAf$	$\sum \beta_i^{(0)} \alpha_{ij}^{(2)} = 1/\gamma(t)$
	19		24	1	$Ag' Af$	$\sum \beta_i^{(1)} \alpha_{ij}^{(1)} = 1/\gamma(t)$
	20		24	1	$AAg'f$	$\sum \beta_i^{(2)} \alpha_{ij}^{(0)} \alpha_{jk}^{(1)} = 1/\gamma(t)$
	21		24	1	$AAAf$	$\sum \beta_i^{(3)} = 1/\gamma(t)$

3. Условия жёсткого порядка

Представленные выше условия порядка являются переформулировкой классической теории для методов РК. Описанные условия порядка имеют место только в случае интегрирования конечномерных систем. При решении задач, полученных с помощью пространственной дискретизации уравнений математической физики с частными производными, данные условия порядка теряют смысл. Решением возникшей проблемы являются условия жёсткого порядка.

3.1. Мотивирующий пример

Чтобы мотивировать введение условий жёсткого порядка, рассмотрим задачу Коши для следующего параболического уравнения:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = k \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + f(x, t), \quad x \in [0, L], t > 0, \quad (3.1a)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad (3.1b)$$

$$u(0, t) = u_1(t), \quad (3.1c)$$

$$u(L, t) = u_2(t). \quad (3.1d)$$

Решим поставленную задачу методом прямых: введём пространственную дискретизацию задачи на отрезке $[0, L]$, для чего разместим на отрезке узлы $\{x_i\}_{i=0}^d$ с равномерным шагом $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $i = \overline{1, d}$; для оператора ∂_{xx}^2 используем стандартную аппроксимацию с помощью разделённых разностей

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \approx \frac{U^{i-1} - 2U^i + U^{i+1}}{(\Delta x)^2},$$

будем считать, что значения $\{U^i\}_{i=0}^d$ в узлах являются функциями непрерывного аргумента t , тогда придём к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений для вектора неизвестных $U(t) = (U^0(t), U^1(t), \dots, U^d(t))$:

$$\frac{dU^i}{dt} = k \frac{U^{i-1} - 2U^i + U^{i+1}}{(\Delta x)^2} + f(x_i, t), \quad i = \overline{1, d-1}; \quad (3.2a)$$

$$U^0 = u_1(t), \quad (3.2b)$$

$$U^d = u_2(t), \quad (3.2c)$$

$$U^i(0) = u_0(x_i), \quad i = \overline{0, d}. \quad (3.2d)$$

— фактически получена задача вида:

$$\begin{aligned} U' &= AU + g(t), \\ U(0) &= U^0, \end{aligned}$$

где A — пространственная дискретизация оператора двойного дифференцирования с учётом краевых условий в $x_0 = 0$ и $x_d = L$, а $g = (g^1(t), \dots, g^d(t))$, $g^i(t) = f(x_i, t)$, $i = \overline{2, d-1}$, компоненты $g^1(t)$ и $g^d(t)$ помимо $f(x_i, t)$ содержат информацию о краевых условиях. После автономизации получим задачу вида (1.5), для которой выше представлен общий экспоненциальный метод (1.13) и условия порядка.

Однако из вывода условий порядка видно (см. табл. 1), что остаточный член содержит комбинации линейного оператора A (и его степеней) с производными $g^{(k)}$. Известно, что исходный дифференциальный оператор является, вообще говоря, неограниченным; поэтому норма и разностного оператора A неограниченно возрастает: $\|A\| \rightarrow 0$ при $\Delta x \rightarrow 0$. Поэтому выполнение классических условий порядка не гарантирует равномерной сходимости при $h \rightarrow 0$ независимо от числа обусловленности.

В таком случае применение экспоненциальных методов (как и методов РК) к решению задач методом прямых требует отдельного подхода. Один из таких подходов состоит в том, чтобы рассматривать исходную задачу Коши для u в бесконечномерном пространстве, а оператор A и отображение g подчинить некоторым условиям — это позволяет отвлечься от конкретной техники дискретизации и получать результаты, зависящие только от свойств исходного оператора, а не от его пространственной дискретизации. Для экспоненциальных методов РК подобный подход впервые был реализован в работах [16], [24], авторы которых не только вывели условия жёсткого порядка, но и подтвердили их содержательность на конкретных примерах. В связи с этим введём следующее

Определение 3. Будем говорить, что экспоненциальный метод Рунге—Кутты (1.13), применяемый в банаховом пространстве X с нормой $\|\cdot\|$, обладает порядком сходимости p , если выполнено

$$\|u(t_0 + h) - y_1\| \leq Ch^{p+1},$$

где константа C не зависит от шага h и нормы оператора A .

При решении нестационарных задач математической физики жёсткий порядок сходимости гарантирует безусловную (абсолютную) сходимость численного решения при $h \rightarrow 0$. Условия классического (т.е. нежёсткого) порядка, представленные в разделе 2, гарантировали, что решение имеет порядок p при *фиксированном* Δx (что эквивалентно фиксированной размерности). В этом случае константа погрешности C зависит от $\|A\| = \|A\|(\Delta x)$ (в примере выше $\|A\| \sim 1/(\Delta x)^2$), и поэтому

$$\|u(t_0 + h) - y_1\| \leq C(\|A\|)h^{p+1},$$

что в примере для параболического уравнения даёт

$$\|u(t_0 + h) - y_1\| \leq C(\|A\|)h^{p+1} = O\left(\frac{h^{p+1}}{|\Delta x|^2}\right),$$

что соответствует определению условной сходимости. Условия жёсткого порядка обеспечивают абсолютную сходимость.

3.2. Основные допущения

Впервые о важности условий жёсткого порядка говорилось в работе [24] — авторами показано, что некоторые (известные к тому времени) экспоненциальные методы удовлетворяют лишь ограниченному набору условий жёсткого порядка, что приводит (в общем случае при решении бесконечномерных задач) к достижению порядка $q < p$, где p — классический (нежёсткий) порядок метода. Изложим далее основные идеи теории жёсткого порядка в соответствии с упомянутой работой.

Первое, что необходимо определить, — это условия, которым удовлетворяет искомый оператор A . Первое допущение работы [24] состоит в следующем:

Допущение 1. Пусть X — банахово пространство с нормой $\|\cdot\|$. Предположим, что A — инфинитезимальный генератор аналитической полугруппы e^{tA} на X .

Ссылки на литературу, в которой содержится пояснение этого определения, могут быть найдены в упомянутой работе. Нам же важно, что данное допущение утверждает истинность следующих оценок

$$\|e^{tA}\|_{X \rightarrow X} + \|t^\gamma \tilde{A}^\gamma e^{tA}\|_{X \rightarrow X} \leq C, \quad \gamma \geq 0, \quad (3.4)$$

$$\left\| hA \sum_{j=1}^{n-1} e^{jhA} \right\|_{X \rightarrow X} \leq C. \quad (3.5)$$

Здесь $\tilde{A} = A + \omega I$ — сдвинутый оператор, где ω — вещественное число, такое что определены вещественные степени оператора \tilde{A} . Сделанное допущение позволяет утверждать, что все операторы $\varphi_k(hA)$ являются ограниченными, а также их произведения с оператором \tilde{A}^α тоже являются ограниченными.

Следующее допущение затрагивает свойства функции правой части.

Допущение 2. Пусть $\alpha \in [0, 1)$ и V — банахово пространство следующего вида:

$$V = \{v \in X : \tilde{A}^\alpha v \in X\},$$

где норма $\|\cdot\|_V$ определяется как $\|v\|_V = \|\tilde{A}^\alpha v\|_X$. Предположим, что функция $g : [0, T] \times V \rightarrow X$ локально Липшиц-непрерывна в полосе, содержащей точное решение u , т.е. существует такое $L = L(R, T) > 0$, что выполнено

$$\forall t \in [0, T] : \|g(t, v) - g(t, w)\| \leq L\|v - w\|_V,$$

если $\max\{\|v - u(t)\|_V, \|w - u(t)\|_V\} \leq R$.

Вещественная степень α оператора \tilde{A} и соответствующее пространство V вводятся в работе [24] с той целью, чтобы в недостаточно регулярных случаях получать результаты о дробном порядке сходимости. Если положить $\alpha = 0$, пространство V совпадёт с X . Обычно исследование методов высоких порядков предполагает более высокий класс гладкости функции правой части, поэтому в работе [24] вводится следующее

Допущение 3. *Предположим, что искомая задача (1.5) допускает достаточно гладкое решение $u : [0, T] \rightarrow V$ с производными в V . Пусть функция правой части $g : [0, T] \times V \rightarrow X$ достаточно число раз дифференцируема по Фреше в полосе, содержащей точное решение u , при этом все возникающие производные $u^{(k)}$ и $g^{(m)}$ равномерно ограничены на соответствующих множествах.*

Очевидно, что если выполнено допущение 3, то выполнено и допущение 2.

Теперь можем перейти к описанию основных инструментов, используемых при выводе условий жёсткого порядка. Во-первых, вернёмся к формуле (1.6) для точного решения u :

$$u(t_n + \theta h) = e^{\theta h A} u(t_n) + \int_0^{\theta h} e^{(\theta h - \xi) A} g(u(t_n + \xi)) d\xi. \quad (1.6)$$

Для простоты обозначений введём функцию $p(t) = g(u(t))$ и построим разложение по формуле Тейлора для функции $p(t)$ (это возможно, поскольку в силу допущения 3 композиция $p(t) = g(u(t))$ является достаточно гладкой функцией с равномерно ограниченными производными):

$$p(t_n + \xi) = \sum_{j=1}^q \frac{\xi^{j-1}}{(j-1)!} p^{(j-1)}(t_n) + \int_0^{\xi} \frac{(\xi - \sigma)^{q-1}}{(q-1)!} p^{(q)}(t_n + \sigma) d\sigma. \quad (3.6)$$

Далее подставим разложение (3.6) в (1.6) и получим:

$$u(t_n + \theta h) = e^{\theta h A} u(t_n) + \sum_{j=1}^q (\theta h)^j \varphi_j(\theta h A) p^{(j-1)}(t_n) + I_n^q(\theta h), \quad (3.7)$$

где $I_n^q(\theta h)$ — остаточный член вида

$$I_n^q(\theta h) = \int_0^{\theta h} e^{(\theta h - \xi) A} \int_0^{\xi} \frac{(\xi - \sigma)^{q-1}}{(q-1)!} p^{(q)}(t_n + \sigma) d\sigma d\xi.$$

Видно, что представленное разложение (3.7) отличается от классической формулы Тейлора: коэффициенты перед $p^{(j-1)}(t_n)$ являются функциями оператора A , а не фиксированными отображениями, не зависящими от A (см. раздел

2). Подставляя в (3.7) вместо θ значения c_i , получим разложения решения u в узлах $t_n + c_i h$:

$$u(t_n + c_i h) = e^{c_i h A} u(t_n) + \sum_{j=1}^{q_i} (c_i h)^j \varphi_j(c_i h A) p^{(j-1)}(t_n) + I_n^{q_i}(c_i h). \quad (3.8)$$

Чтобы получить выражения для погрешностей аппроксимации, подставим точное решение $u(t)$ в исходные расчётные формулы (1.13):

$$u(t_n + h) = e^{hA} u(t_n) + h \sum_{i=1}^s b_i(hA) p(t_n + c_i h) + \delta_{n+1},$$

$$u(t_n + c_i h) = e^{c_i h A} u(t_n) + h \sum_{j=1}^s a_{ij}(hA) p(t_n + c_j h) + \Delta_{n,i},$$

где δ_{n+1} и $\Delta_{n,i}$ — погрешности внешних и внутренних стадий соответственно. Чтобы уточнить полученные соотношения, воспользуемся разложением (3.6):

$$u(t_n + h) = e^{hA} u(t_n) + h \sum_{k=1}^s b_k(hA) \sum_{j=1}^q \frac{(c_k h)^{j-1}}{(j-1)!} p^{(j-1)}(t_n) +$$

$$+ h \sum_{k=1}^s b_k(hA) \int_0^{c_k h} \frac{(c_k h - \sigma)^{q-1}}{(q-1)!} p^{(q)}(t_n + \sigma) d\sigma + \delta_{n+1}; \quad (3.9a)$$

$$u(t_n + c_i h) = e^{c_i h A} u(t_n) + h \sum_{k=1}^s a_{ik}(hA) \sum_{j=1}^{q_i} \frac{(c_k h)^{j-1}}{(j-1)!} p^{(j-1)}(t_n) +$$

$$+ h \sum_{k=1}^s a_{ik}(hA) \int_0^{c_k h} \frac{(c_k h - \sigma)^{q_i-1}}{(q_i-1)!} p^{(q_i)}(t_n + \sigma) d\sigma + \Delta_{n,i}. \quad (3.9b)$$

Чтобы определить выражение для $\Delta_{n,i}$, вычтем (3.9b) из (3.8) и получим:

$$\Delta_{n,i} = \sum_{j=1}^{q_i} h^j \psi_{j,i}(hA) p^{(j-1)}(t_n) + \Delta_{n,i}^{[q_i]},$$

где

$$\psi_{j,i}(hA) = c_i^j \varphi_j(c_i h A) - \sum_{k=1}^s a_{ik}(hA) \frac{c_k^{j-1}}{(j-1)!}, \quad (3.10)$$

а $\Delta_{n,i}^{[q_i]}$ содержит разность интегральных остаточных членов из (3.9b) и (3.8). Аналогично получаем выражение для δ_{n+1} :

$$\delta_{n+1} = \sum_{j=1}^q h^j \psi_j(hA) p^{(j-1)}(t_n) + \delta_{n+1}^{[q]},$$

где

$$\psi_j(hA) = \varphi_j(hA) - \sum_{k=1}^s b_k(hA) \frac{c_k^{j-1}}{(j-1)!}, \quad (3.11)$$

а $\delta_{n+1}^{[q]}$ содержит соответствующие остаточные интегральные члены.

Полученные выражения (3.10), (3.11) определяют порядки квадратурных формул внутренних и внешних стадий соответственно. Поэтому условия

$$\psi_{j,i}(hA) = 0, \quad j = \overline{1, q_i}, \quad i = \overline{1, s}, \quad \psi_j(hA) = 0, \quad j = \overline{1, q} \quad (3.12)$$

являются условиями жёсткого порядка. Но в общем случае они недостаточны для достижения жёсткого порядка выше второго. В работе [16] показано, что условия (3.12) необходимы и достаточны для достижения порядка сходимости $s = q_i = q$ полностью неявных коллокационных экспоненциальных методов, а также показано, как за счёт дополнительных предположений о внутреннем методе можно повысить жёсткий порядок экспоненциального метода. Но поскольку, как отмечено выше, коллокационные методы являются полностью неявными и поэтому сложны в реализации, наиболее интересными для исследователей являются явные экспоненциальные методы РК, у которых $a_{ij}(z) = 0$ при $j \geq i$ и $c_1 = 0$.

Для того чтобы получить условия жёсткого порядка 4, в работе [24] проведены достаточно кропотливые выкладки, поэтому сразу сформулируем итоговый результат:

Таблица 2. Условия жёсткого порядка вплоть до порядка 4.

№	Порядок	Условия жёсткого порядка
1	1	$\psi_1(hA) = 0$
2	2	$\psi_2(hA) = 0$
3		$\psi_{1,i}(hA) = 0$
4	3	$\psi_3(hA) = 0$
5		$\sum_{i=1}^s b_i(hA) J \psi_{2,i}(hA) = 0$
6	4	$\psi_4(hA) = 0$
7		$\sum_{i=1}^s b_i(hA) J \psi_{3,i}(hA) = 0$
8		$\sum_{i=1}^s b_i(hA) J \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij}(hA) J \psi_{2,j}(hA) = 0$
9		$\sum_{i=1}^s b_i(hA) c_i K \psi_{2,i}(hA) = 0$

Теорема 1. Пусть задача Коши (1.5) удовлетворяет допущениям 1–3 при $\alpha = 0$. Применим к решению задачи явный экспоненциальный метод Рунге—Кутты.

Пусть при $2 \leq p \leq 4$ выполнены условия таблицы 2 (где J и K — произвольные ограниченные операторы на X) вплоть до порядка $p - 1$, $\psi_p(0) = 0$, а оставшиеся условия порядка p выполнены в упрощённой форме при $b_i(0)$ вместо $b_i(hA)$ для $i = \overline{2, s}$. Тогда для численного решения верно:

$$\|u(t_n) - y_n\| \leq Ch^p,$$

где $C = C(T)$ не зависит от n и h , оценка выполнена равномерно для $t_n \in [0, T]$

Замечание 3.1. В формулировке теоремы используется определение порядка сходимости, отличное от представленного в определении 3, но эквивалентное ему.

Замечание 3.2. Утверждение представленной теоремы истинно в случае постоянного шага интегрирования. Для того чтобы численное решение сходилось с порядком p при интегрировании с переменным шагом, необходимо потребовать выполнения всех условий таблицы 2 вплоть до порядка p .

Также заметим, что условия порядка №1 и №3 в таблице 2 на самом деле есть не что иное, как условия (2.1), (2.2) сохранения положения равновесия.

Замечание 3.3. Помимо представленной теоремы, в работе [24] можно отметить следующие важные результаты:

- 1) показано, что экспоненциальный метод порядка 4 не может иметь меньше 5 стадий;
- 2) обсуждены различные экспоненциальные методы из работ [27], [28], [29], [30], показано, что некоторые из них, хотя и удовлетворяют классическим условиям порядка p , не удовлетворяют условиям жёсткого порядка p , а потому могут страдать от снижения порядка сходимости (что в действительности и происходит — см. оригинальную работу [24]).

Замечание 3.4. Выше мы упомянули о возможности построения экспоненциальных методов типа Розенброка, когда матрица A пересчитывается на каждом шаге по правилу:

$$A = J_n = J(u_n), \quad g(u) = g_n(u) = f(u) - J_n u,$$

где J — матрица Якоби правой части. Условия жёсткого порядка для данного класса методов впервые представлены в работах [31], [32] — для их вывода использовался инструментарий работ [16, 24], расширенный на случай построения матрицы A по указанному правилу.

Отметим, что в силу вычисления матрицы Якоби на каждом шаге количество условий жёсткого порядка для экспоненциальных методов Розенброка меньше, чем в случае экспоненциального метода (1.13) с фиксированной матрицей A . Наиболее естественно данная «редукция» объясняется в терминах деревьев Бутчера для экспоненциальных методов [33].

Заключение

В работе представлен краткий исторический обзор развития экспоненциальных методов Рунге—Кутты интегрирования жёстких систем ОДУ. Отметим, что основное внимание уделено экспоненциальным методам Рунге—Кутты и условиям жёсткого порядка для них. Однако возможно построение и экспоненциальных многошаговых методов [28], а также их обобщений — общих линейных методов [34].

Отдельно отметим исторический обзор [35], и особенно — работу [36], в которой обсуждается широкий спектр вопросов: от экспоненциальных методов и родственных им тригонометрических интеграторов до вопросов вычисления матричных функций φ_k . По каждому из вопросов представлена обширная библиография.

Вопросы эффективного вычисления матричных функций остались вне поля зрения обзора. Обсуждению данного вопроса посвящён отдельный раздел работы [36]. Отметим работы [20], [37], [38], а также работу [39], в которой описана широко используемая реализация алгоритма `phipm` вычисления функций $\varphi_k(z)$ с помощью методов крыловского подпространства. В недавней работе [40] представлена улучшенная версия алгоритма `phipm`.

Отметим, что помимо экспоненциальных методов Рунге—Кутты и Розенброка возможно построение «промежуточного» класса экспоненциальных W -методов (по аналогии с W -методами Розенброка [2, §IV.7]), когда матрица A является не точной матрицей Якоби, а некоторым приближением к ней [41].

Одним из интересных направлений в теории жёсткого порядка экспоненциальных методов является обобщение теории деревьев Бутчера. Краткий обзор работ по данной тематике планируется дать в следующих публикациях.

Благодарности. Авторы выражают благодарность участникам конференции СММ-8 В. Аузингеру (Winfried Auzinger), Р. Вайнеру (Rüdiger Weiner) и Х. Подхайскому (Helmuth Podhaisky) за информацию о методе Лусона [10], нашедшую отражение в данной публикации.

Список литературы

- [1] Hairer E., Nørsett S.P., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems. Berlin. Springer. 1993. 528 p. DOI:10.1007/978-3-540-78862-1
- [2] Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Berlin. Springer. 2010. 614 p. DOI:10.1007/978-3-642-05221-7
- [3] Галанин М.П., Савенков Е.Б. Методы численного анализа математических моделей. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана. 2010. 591 с.

- [4] *Новиков Е.А.* Явные методы для жестких систем. Новосибирск. Наука. Сиб. предприятие РАН. 1997. 195 с.
- [5] *Лебедев В.И.* Функциональный анализ и вычислительная математика. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2005. 296 с.
- [6] *Butcher J.C.* Implicit Runge—Kutta processes //Math. Comp. 1964. V. 18. № 85. pp. 50–64. DOI:10.1090/S0025-5718-1964-0159424-9
- [7] *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations //The Comput. J. 1963. V. 5. № 4. pp. 329–330. DOI:10.1093/comjnl/5.4.329
- [8] *Moler C., van Loan C.* Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later //SIAM Rev. 2003. V. 45. № 1. pp. 3–49. DOI:10.1137/S00361445024180
- [9] *Higham N.J.* Functions of Matrices: Theory and Computation. SIAM. Philadelphia. 2008. 446 p. DOI:10.1137/1.9780898717778
- [10] *Lawson J.D.* Generalized Runge—Kutta processes for stable systems with large Lipschitz constants //SIAM J. Numer. Anal. 1967. V. 4. № 3. pp. 372–380. DOI:10.1137/0704033
- [11] *Галанин М.П., Конев С.А.* Разработка и применение экспоненциального метода интегрирования жёстких систем на основе классического метода Рунге—Кутты //Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 51. 24 с. DOI:10.20948/prepr-2018-51
- [12] *Галанин М.П., Конев С.А.* Разработка и применение экспоненциального метода интегрирования жёстких систем на основе классического метода Рунге—Кутты //Дифференциальные уравнения. 2018. Т. 54. № 7. с. 909–918. DOI:10.1134/S0374064118070075
- [13] *Ehle B.L., Lawson J.D.* Generalized Runge—Kutta processes for Stiff initial-value problems //IMA J. Appl. Math. 1975. V. 16. № 1. pp. 11–21. DOI:10.1093/imamat/16.1.11
- [14] *Галанин М.П., Ходжаева С.Р.* Методы решения жёстких обыкновенных дифференциальных уравнений. Результаты тестовых расчётов //Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2013. № 98. 29 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-98>
- [15] *Федоренко Р.П.* Введение в вычислительную физику. Долгопрудный. Издательский дом «Интеллект». 2008. 504 с.
- [16] *Hochbruck M., Ostermann A.* Exponential Runge—Kutta methods for parabolic problems. //Appl. Numer. Math. 2005. V. 53. № 2–4. pp. 323–339. DOI:10.1016/j.apnum.2004.08.005

- [17] *Pope D.A.* An exponential method of numerical integration of ordinary differential equations //Communications of the ACM. 1963. V. 6. № 8. pp. 491–493. DOI:10.1145/366707.367592
- [18] *Федоренко Р.П.* Динамическое программирование, инвариантное погружение, квазилинеаризация и вычислительные алгоритмы //Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1979. С. 119–155.
- [19] *Nørsett S.P.* An A-stable modification of the Adams-Bashforth methods. //Conference on the Numerical Solution of Differential Equations. Lecture Notes in Math. V. 109. Morris J.L. (eds). Springer. Berlin, Heidelberg. 1969. pp. 214–219. DOI:10.1007/BFb0060031
- [20] *Hochbruck M., Lubich C., Selhofer H.* Exponential integrators for large systems of differential equations //SIAM J. Sci. Comput. 1998. V. 19. № 5. pp. 1552–1574. DOI:10.1137/S1064827595295337
- [21] *Friedli A.* Verallgemeinerte Runge–Kutta Verfahren zur Lösung steifer Differentialgleichungssysteme //Numerical Treatment of Differential Equations, Lecture Notes in Math. 631. R. Burlirsch, R. Grigorieff, and J. Schrödinger (eds.). Springer. Berlin. 1978. pp. 35–50. DOI:10.1007/BFb0067462
- [22] *Strehmel K., Wiener R.* Linear-implizite Runge–Kutta Methoden und ihre Anwendungen. Teubner. Leipzig. 1992. 356 p. DOI:10.1007/978-3-663-10673-9
- [23] *Berland H., Owren B., Skaflestad B.* B-series and order conditions for exponential integrators. //SIAM J. Numer. Anal. 2006. V. 43. № 4. pp. 1715–1727. DOI:10.1137/040612683
- [24] *Hochbruck M., Ostermann A.* Explicit exponential Runge–Kutta methods for semilinear parabolic problems //SIAM J. Sci. Comput. 2005. V. 43. № 3. pp. 1069–1090. DOI:10.1137/040611434
- [25] *Hairer E., Lubich C., Wanner G.* Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Berlin, Heidelberg. Springer-Verlag. 2006. xvi+644 p. DOI:10.1007/3-540-30666-8
- [26] *Butcher J.C.* Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Chichester. John Wiley & Sons, Ltd. 2016. xxiv+519 p. DOI:10.1002/9781119121534
- [27] *Celledoni E., Marthinsen A., Owren B.* Commutator-free Lie group methods //Future Generation Computer Systems. 2003. V. 19. № 3. pp. 341–352. DOI:10.1016/S0167-739X(02)00161-9

- [28] *Cox M., Matthews P.* Exponential Time Differencing for Stiff Systems //J. Comput. Phys. 2002. V. 176. № 2. pp. 430–455. DOI:10.1006/jcph.2002.6995
- [29] *Kassam A.-K., Trefethen L. N.* Fourth-order time stepping for stiff PDEs //SIAM J. Sci. Comput. 2005. V. 26. № 4. pp. 1214–1233. DOI:10.1137/S1064827502410633
- [30] *Krogstad S.* Generalized integrating factor methods for stiff PDEs //J. Comput. Phys. 2005. V. 203. №. 1. pp. 72–88. DOI:10.1016/j.jcp.2004.08.006
- [31] *Hochbruck M., Ostermann A.* Explicit integrators of Rosenbrock-type //Oberwolfach Reports 3. 2006. pp. 1107–1110.
- [32] *Hochbruck M., Ostermann A.,* Exponential Rosenbrock-type methods //SIAM J. Numer. Anal. 2009. V. 47. № 1. pp. 786–803. DOI:10.1137/080717717
- [33] *Luan V.T., Ostermann A.* Exponential B-series: The stiff case //SIAM J. Numer. Anal. 2013. V. 51. № 6. pp. 3431–3445. DOI:10.1137/130920204
- [34] *Ostermann A., Thalhammer M., Wright W.* A Class of Explicit Exponential general linear methods //BIT Numer. Math. 2006. V. 46. № 2. pp. 409–431. DOI:10.1007/s10543-006-0054-3
- [35] *Minchev B., Wright W.* A review of exponential integrators for first order semi-linear problems //Tech. report 2/05. Department of Mathematics, NTNU, April 2005.
- [36] *Hochbruck M., Ostermann A.* Exponential integrators //Acta Numerica. 2010. V. 19. pp. 209–286. DOI:10.1017/S0962492910000048
- [37] *Tokman M.* Efficient integration of large stiff systems of ODEs with exponential propagation iterative (EPI) methods. //J. Comput. Phys. 2006. V. 213. № 2. pp. 748–776. DOI:10.1016/j.jcp.2005.08.032
- [38] *Botchev M.A., Grimm V., Hochbruck M.* Residual, restarting and Richardson iteration for the matrix exponential //SIAM J. of Sci. Comput. 2013. V. 35. № 3. pp. A1376–A1397. DOI:10.1137/110820191
- [39] *Niesen J., Wright W.* Algorithm 919: A Krylov Subspace Algorithm for evaluating the φ -functions appearing in Exponential Integrators //ACM Trans. of Math. Soft. 2012. V. 38. № 3. pp. 22:1–22:19. DOI:10.1145/2168773.2168781
- [40] *Gaudreault S., Rainwater G., Tokman M.* KIOPS: A fast adaptive Krylov subspace solver for exponential integrators //J. Comput. Phys. 2018. V. 372. 1 November 2018. pp. 236–255. DOI:10.1016/j.jcp.2018.06.026

- [41] *Narayanamurthi M., Tranquilli P., Sandu A., Tokman M.* EPIRK-W and EPIRK-K time discretization methods //J. Sci. Comput. 2018. DOI:10.1007/s10915-018-0761-3

Содержание

Введение	3
1. Определение экспоненциальных методов	4
1.1. Методы Лоусона	4
1.2. Другие экспоненциальные методы	6
2. Классические условия порядка	9
2.1. Производные точного решения	10
2.2. Производные численного решения	11
3. Условия жёсткого порядка	15
3.1. Мотивирующий пример	15
3.2. Основные допущения	17
Заключение	22