1.4. Standžiosios PDL sistemos

Skaitiškai spręsdami diferencialinį uždavinį visada turime parinkti diskretųjį parametrą τ. Čia tenka rasti kompromisą tarp kelių reikalavimų.

- *Pirma*, uždavinio sprendimo laikas yra proporcingas dydžiui $\frac{T}{\tau}$, todėl norėdami sumažinti skaičiavimo kaštus, siekiame integruoti su didžiausiu galimu žingsniu τ.
- *Antra*, baigtinių skirtumų metodo aproksimavimo paklaida n-ajame žingsnyje yra proporcinga dydžiui $C\tau_n^p$. Todėl norėdami ε tikslumu apskaičiuoti diskretųjį sprendinį, turime imti pakankamai mažą žingsnį $\tau_n \leqslant \tau_A$.
- *Trečia*, jei diskretusis metodas yra tik sąlygiškai stabilusis, tai parenkant τ būtina išpildyti ir stabilumo reikalavimą $\tau \leqslant \tau_S$.

Todėl žingsnį τ_n parenkame tokį, kad galiotų nelygybė

$$\tau_n \leqslant \min(\tau_S, \tau_A).$$

Sprendžiant įvairius uždavinius, žingsnis τ_n kartais labiau ribojamas aproksimacijos tikslumo, kitais atvejais – stabilumo reikalavimo.

Nėra vienareikšmiško *standžiųjų PDL* apibrėžimo. Paprasčiausiu atveju sakome, kad PDL pradinis uždavinys yra *standusis*, jei τ_S yra daug mažesnis už τ_A, tai yra stabilumo reikalavimas yra daug griežtesnis už aproksimacijos tikslumo reikalavimą. Tačiau toks apibrėžimas neaprėpia visų svarbių atvejų, todėl vėliau pateiksime ir kitus šio apibrėžimo variantus.

Nagrinėkime modelinį uždavinį:

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = -\lambda u, \quad \lambda > 0\,, \\ u(0) = 1\,. \end{cases} \tag{1.64}$$

Šį uždavinį spręskime neišreikštiniu Eulerio metodu:

$$\frac{y^n - y^{n-1}}{\tau} = -\lambda y^n\,.$$

Iš lygties gauname lygybę

$$y^n = \frac{1}{1+\lambda\tau} y^{n-1}\,,$$

todėl neišreikštinio Eulerio metodo charakteristinės lygties sprendinys visada tenkina nelygybę

$$q = \frac{1}{1+\lambda\tau} < 1\,,$$

tai yra neišreikštinis Eulerio metodas yra nesąlygiškai stabilusis.

Dabar (1.64) uždavinį spręskime išreikštiniu Eulerio metodu:

$$\frac{y^n - y^{n-1}}{\tau} = -\lambda y^{n-1}\,.$$

Jo sprendinys yra

$$y^n = (1-\lambda\tau)y^{n-1}\,,$$

todėl šis metodas yra stabilusis, tai yra $|q| \leqslant 1$, tik kai išpildyta sąlyga

$$\tau \leqslant \frac{2}{\lambda}\,.$$

Jeigu $\lambda \ll 1$, tai reikia imti labai mažą diskretųjį žingsnį τ.

Jei sprendžiame tik vieną lygtį, tai stabilumo problema nėra labai sudėtinga, nes ir diferencialinio uždavinio sprendinys $u = e^{-\lambda t}$ mažėja greitai. Todėl laiko intervalas, kuriame sprendinio modulis didesnis už pasirinktą dydį ε, nėra ilgas. Iš tiksliojo sprendinio išraiškos gausime, kad uždavinį užtenka spręsti intervale $[0,T]$, čia T apskaičiuojamas iš lygties:

$$e^{-\lambda t} = \varepsilon \quad \Rightarrow \quad T = \frac{\ln(1/\varepsilon)}{\lambda}\,.$$

Pavyzdžiui, jei $\varepsilon = 10^{-4}$, tai $T = \dfrac{10}{\lambda}$. Todėl net ir spręsdami (1.64) uždavinį sąlygiškai stabiliąja schema, pavyzdžiui, išreikštiniu Eulerio metodu, kai parametras τ turi tenkinti apribojimą $\tau \leqslant \dfrac{2}{\lambda}$, gauname, kad žingsnių skaičius yra lygus $N = \dfrac{T}{\tau} = 5$ ir jis nepriklauso nuo parametro λ.

Intervale $[0, \dfrac{10}{\lambda}]$ žingsnis τ labiau ribojamas dėl aproksimacijos tikslumo, o išreikštinio ir neišreikštinio Eulerio metodų aproksimavimo paklaidos yra tos pačios eilės.

1.4.1. Tiesinių PDL lygčių sistemų stabilumas

Stabilumo sąlyga yra kur kas reikšmingesnė, kai sprendžiame diferencialinių lygčių sistemą. Pirmiausia išnagrinėsime modelinę sistemą

$$\begin{cases} \dfrac{du_1}{dt} = -\lambda_1 u_1\,, \qquad u_1(0) = 1\,, \\ \dfrac{du_2}{dt} = -\lambda_2 u_2\,, \qquad u_2(0) = 1\,. \end{cases} \tag{1.65}$$

Užrašykime ją vektoriniu pavidalu

$$\frac{dU}{dt} = AU\,,$$

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \qquad U = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}.$$

Jeigu $\lambda_j > 0$, tai abi sprendinio komponentės yra monotoniškai mažėjančios funkcijos

$$u_1(t) = e^{-\lambda_1 t}, \quad u_2(t) = e^{-\lambda_2 t}\,.$$

Tarkime, kad vienas iš parametrų λ_j yra daug didesnis už kitą, pavyzdžiui, $\lambda_2 \gg \lambda_1$. Šiuo atveju komponentė $u_2(t)$ mažėja daug greičiau nei $u_1(t)$, todėl laiko intervalas $[0, T]$, kuriame nagrinėjame (1.65) uždavinį, priklauso nuo λ_1:

$$T = \frac{\ln(1/\varepsilon)}{\lambda_1} = \frac{10}{\lambda_1}\,.$$

Diferencialinių lygčių sistemą spręskime išreikštiniu Eulerio metodu:

$$\begin{cases} \dfrac{y_1^{n+1} - y_1^n}{\tau} = -\lambda_1 y_1^n\,, \\ \dfrac{y_2^{n+1} - y_2^n}{\tau} = -\lambda_2 y_2^n\,. \end{cases}$$

Tirdami šio metodo stabilumą gavome tokį diskrečiojo parametro τ apribojimą:

$$\tau \leqslant \tau_S, \quad \tau_S = \min\left(\frac{2}{\lambda_1}, \frac{2}{\lambda_2}\right) = \frac{2}{\lambda_2}\,.$$

Taigi išreikštiniu Eulerio metodu spręsdami modelinę diferencialinių lygčių sistemą intervale $[0, T]$ atliksime N integravimo žingsnių:

$$N \geqslant \frac{T}{\tau_S} = \frac{5\lambda_2}{\lambda_1} \gg 1\,.$$

Kiekvieną (1.65) modelinio uždavinio lygtį galėjome spręsti ir atskirai. Tada reikėtų imti skirtingus žingsnius τ_j ir lygtis spręsti skirtinguose laiko intervaluose $[0, T_j]$. Tačiau gauti rezultatai tinka ir bendroms diferencialinių lygčių sistemoms:

$$\begin{cases} \dfrac{dU}{dt} = AU\,, \\ U(0) = U_0\,. \end{cases} \tag{1.66}$$

Egzistuoja tokia ortogonalioji matrica Q, kad matrica

$$\tilde{A} \;=\; Q^{-1}\,A\,Q$$

yra įstrižaininė, o jos įstrižainės elementai sutampa su A matricos tikrinėmis reikšmėmis. Nagrinėkime naują vektorių V, kuris susijęs su vektoriumi U sąryšiu

$$U = QV\,.$$

Įrašę šią išraišką į (1.66) lygtį, gausime naują diferencialinių lygčių sistemą, kurią tenkina $V(t)$ vektorius:

$$\begin{cases} \dfrac{dV}{dt} = \tilde{A}\,V\,, \\ V(0) = Q^{-1}U(0)\,. \end{cases}$$

Gauta lygčių sistema yra analogiška jau išnagrinėtai modelinei diferencialinių lygčių sistemai.

Dabar pateiksime tikslesnį standžiųjų PDL sistemų apibrėžimą. (1.66) diferencialinių lygčių sistema yra vadinama *standžiąja*, jei išpildytos šios sąlygos:

$$\text{a)}\quad \mathrm{Re}\,\lambda_k < 0, \quad k = 1, 2, \dots, M\,,$$

$$\text{b)}\quad S = \frac{\max|\mathrm{Re}\,\lambda_k|}{\min|\Re e\;\lambda_k|} \gg 1\,,$$

čia λ_k yra matricos A tikrinės reikšmės. Skaičius S vadinamas A matricos *standumo skaičiumi.*

1.4.2. Netiesinės PDL sistemos

Dabar standumo sąvoką apibendrinsime netiesinių PDL sistemoms

$$\begin{cases} \dfrac{dU}{dt} = F(t, U)\,, \\ U(0) = U_0\,. \end{cases} \tag{1.67}$$

Pažymėkime vektorinės funkcijos $F(t, U)$ jakobianą

$$J(t, U(t)) \equiv \left(\frac{\partial f_i(t, U(t))}{\partial u_j}\right) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial u_1} & \dfrac{\partial f_1}{\partial u_2} & \dots & \dfrac{\partial f_1}{\partial u_M} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial u_1} & \dfrac{\partial f_2}{\partial u_2} & \dots & \dfrac{\partial f_2}{\partial u_M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dfrac{\partial f_M}{\partial u_1} & \dfrac{\partial f_M}{\partial u_2} & \dots & \dfrac{\partial f_M}{\partial u_M} \end{pmatrix}.$$

Sudarykime tiesinių PDL sistemą

$$\frac{dV}{dt} = J\big(t, U(t)\big)V(t)\,,$$

kuri vadinama (1.67) netiesinio PDL uždavinio *pirmuoju tiesiniu artiniu.*

Netiesinių PDL sistema yra *standžioji*, jeigu jos pirmasis tiesinis artinys yra standžioji diferencialinių lygčių sistema. (1.67) lygčių sistemos *lokalusis standumo* skaičius sutampa su matricos $J(t, U(t))$ standumo skaičiumi.

Standžiosios diferencialinių lygčių sistemos sprendinys priklauso ir nuo greitai, ir nuo lėtai mažėjančių komponenčių. Pirmosios nulemia sąlygiškai stabiliųjų metodų pasirenkamo žingsnio τ dydį, o antrosios – laiko intervalo $[0, T]$ trukmę.

Vėl nagrinėkime (1.65) modelinį uždavinį. Intervale $[0, \frac{10}{\lambda_2}]$ sprendinys $u_2(t)$ keičiasi labai greitai, todėl ne tik dėl stabilumo, bet ir siekdami norimo aproksimacijos tikslumo, turime skaičiuoti žingsniu $\tau \leqslant \dfrac{2}{\lambda_2}$. Tačiau laiko momentu $t_1 = \dfrac{10}{\lambda_2}$ komponentė $u_2(t)$ jau yra labai maža, nes $u_2(t_1) = e^{-10} < 0,0001$, todėl norėdami pakankamai tiksliai aproksimuoti funkciją $u_1(t)$ galėtume padidinti žingsnį τ iki $\mathcal{O}\big(\dfrac{1}{\lambda_1}\big)$. Tačiau išreikštinis Eulerio metodas yra tik sąlygiškai stabilusis, todėl ir toliau turime skaičiuoti mažu žingsniu $\tau = \dfrac{2}{\lambda_2}$.

Išeitis iš šios situacijos – taikyti neišreikštinius nesąlygiškai stabiliuosius metodus, tada diskretusis žingsnis τ parenkamas tik atsižvelgiant į aproksimacijos tikslumo reikalavimą. Kaip pavyzdį galime nurodyti neišreikštinį Eulerio metodą. Tiesinių PDL sistemoms šis metodas užrašomas tokiu būdu:

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau_n} = AY^n\,,$$

o netiesinių PDL sistemoms:

$$\frac{Y^n - Y^{n-1}}{\tau_n} = F(t_n, Y^n)\,.$$

Artinys Y^n yra randamas iš tiesinių lygčių sistemos

$$(I - \tau_n A)Y^n = Y^{n-1}\,.$$

Turėdami netiesines PDL sistemas, kiekviename žingsnyje sprendžiame netiesinių lygčių sistemą

$$Y^n - \tau_n F(t_n, Y^n) = Y^{n-1}\,.$$

Neišreikštiniam Eulerio metodui realizuoti reikia daugiau aritmetinių veiksmų nei išreikštinio Eulerio metodo. Tačiau tai, kad galime integruoti daug didesniu integravimo žingsniu τ, kompensuoja šį trūkumą. Todėl standžiosios PDL sistemos yra sprendžiamos tik neišreikštiniais nesąlygiškai stabiliaisiais metodais.

1.4.3. Neišreikštinis Rungės ir Kuto metodas

Šiame poskyryje sudarysime A stabiliuosius *neišreikštinio Rungės ir Kuto metodo* algoritmus.

Neišreikštinį m-pakopį Rungės ir Kuto metodą apibrėžiame tokia matrica:

$$\begin{array}{c|cccc}
a_1 & b_{11} & b_{21} & \cdots & b_{1m} \\
a_2 & b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
a_m & b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mm} \\
\hline
 & \sigma_1 & \sigma_2 & \cdots & \sigma_m
\end{array}$$

Koeficientų radimas. Neišreikštinio Rungės ir Kuto metodo koeficientus apskaičiuosime naudodami skaitinio integravimo formules. Norėdami gauti $2m$-osios eilės aproksimacijos tikslumo metodą, naudosime Gauso skaitinio integravimo formules. Imkime m-osios eilės *Ležandro* (*Legendre*) daugianarį. Šie daugianariai yra ortogonalūs intervale $[-1, 1]$, juos galime sudaryti rekurenčiąja formule:

$$\begin{aligned}
&(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1)xL_n(x) - nL_{n-1}(x)\,, \qquad (1.68)\\
&L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x\,.
\end{aligned}$$

Rungės ir Kuto metodo koeficientai $a_1, a_2, \ldots, a_m$ parenkami kaip modifikuoto Ležandro daugianario $\tilde{L}_m(y) = L_m(2y-1)$ šaknys.

Koeficientus b_{ij}, $1 \leqslant i,j \leqslant m$ apskaičiuojame neapibrėžtinių koeficientų metodu. Reikalausime, kad visiems daugianariams $P_{m-1}(x)$, kurių eilė neviršija $m-1$, galiotų lygybės

$$\int\limits_0^{a_i} P_{m-1}(x)\,dx = \sum_{j=1}^m b_{ij} P_{m-1}(a_j), \quad i = 1, 2, \ldots, m\,.$$

Koeficientus σ_j randame iš panašios lygybės:

$$\int\limits_0^1 P_{m-1}(x)\,dx = \sum_{j=1}^m \sigma_j P_m(a_j)\,.$$

Pasirinkę tiesiškai nepriklausomų laipsninių vienanarių sistemą

$$1,\ x,\ x^2,\ \cdots,\ x^{m-1}\,,$$

kuri yra pilna daugianarių $P_{m-1}(x)$ aibėje, gauname tiesinių lygčių sistemas:

$$\begin{cases} b_{i1} + b_{i2} + \cdots + b_{im} = a_i\,, \\ a_1 b_{i1} + a_2 b_{i2} + \cdots + a_m b_{im} = \dfrac{1}{2} a_i^2\,, \\ a_1^2 b_{i1} + a_2^2 b_{i2} + \cdots + a_m^2 b_{im} = \dfrac{1}{3} a_i^3\,, \\ \cdots \quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ a_1^{m-1} b_{i1} + a_2^{m-1} b_{i2} + \cdots + a_m^{m-1} b_{im} = \dfrac{1}{m} a_i^m\,. \end{cases} \tag{1.69}$$

Kadangi visos Ležandro daugianario šaknys yra skirtingos, tai tokios tiesinių lygčių sistemos matricos determinantas nelygus nuliui ir egzistuoja vienintelis jos sprendinys $\{b_{i1}, b_{i2}, \ldots, b_{im}\}$. Panašiai apskaičiuojame ir koeficientus $\{\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_m\}$.

Pažymėsime, kad visas $m+1$ sistemas efektyviausia spręsti kartu kaip vieną matricinę lygtį:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ a_1^2 & a_2^2 & \cdots & a_m^2 \\ .. & \cdots & \cdots & .. \\ a_1^{m-1} & a_2^{m-1} & \cdots & a_m^{m-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{m1} & \sigma_1 \\ b_{12} & \cdots & b_{m2} & \sigma_2 \\ b_{13} & \cdots & b_{m3} & \sigma_3 \\ .. & \cdots & \cdots & .. \\ b_{1m} & \cdots & b_{mm} & \sigma_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & \cdots & a_m & 1 \\ \frac{a_1^2}{2} & \cdots & \frac{a_m^2}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{a_1^3}{3} & \cdots & \frac{a_m^3}{3} & \frac{1}{3} \\ . & \cdots & . & . \\ \frac{a_1^m}{m} & \cdots & \frac{a_m^m}{m} & \frac{1}{m} \end{pmatrix}$$

1.13 pavyzdys. Dvipakopis neišreikštinis Rungės ir Kuto metodas. Sudarysime dvipakopio neišreikštinio Rungės ir Kuto metodo formulę. Šio metodo aproksimacijos tikslumo eilė yra ketvirtoji. Iš (1.68) lygties randame antrosios eilės Ležandro daugianarį:

$$L_2(x) = \frac{1}{2}\big(3x^2 - 1\big)\,,$$

todėl modifikuoto Ležandro daugianario $\tilde{L}_2(y)$ šaknys yra tokios:

$$a_1 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}, \quad a_2 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}\,.$$

Sudarome matricinę tiesinių lygčių sistemą:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \dfrac{3-\sqrt{3}}{6} & \dfrac{3+\sqrt{3}}{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} & \sigma_1 \\ b_{12} & b_{22} & \sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{3-\sqrt{3}}{6} & \dfrac{3+\sqrt{3}}{6} & 1 \\ \dfrac{2-\sqrt{3}}{12} & \dfrac{2+\sqrt{3}}{12} & \dfrac{1}{2} \end{pmatrix},$$

kurią išsprendę randame Rungės ir Kuto metodo koeficientus

$$\begin{aligned} b_{11} &= \frac{1}{4}, & b_{12} &= \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}\,, \\ b_{21} &= \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}, & b_{22} &= \frac{1}{4}\,, \\ \sigma_1 &= \frac{1}{2}, & \sigma_2 &= \frac{1}{2}\,. \end{aligned}$$

1.4.4. Įstrižaininis neišreikštinis Rungės ir Kuto metodas

Neišreikštinio Rungės ir Kuto metodo privalumai yra A stabilumas ir didelė metodo aproksimacijos tikslumo eilė.

Tačiau reakizuodami šį algoritmą atliekame labai daug skaičiavimų, kadangi kiekviename jo žingsnyje net ir vienos diferencialinės lygties atveju tenka spręsti m-osios eilės netiesinių lygčių sistemą. Jei sprendžiame M-osios eilės PDL sistemą, tai pagalbinės netiesinių lygčių sistemos eilė padidėja iki mM-osios.

Yra pasiūlyta daug neišreikštinio Rungės ir Kuto metodo modifikacijų, leidžiančių sumažinti algoritmo neišreikštinumą. Nagrinėsime tik vieną tokį metodą, vadinamą *įstrižaininiu neišreikštiniu* Rungės ir Kuto metodu (angl. *singly diagonally implicit* Runge–Kutta arba SDIRK). Šio metodo matrica yra tokia:

$$
\begin{array}{c|cccc}
a_1 & \lambda & 0 & \cdots & 0 \\
a_2 & b_{21} & \lambda & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
a_m & b_{m1} & b_{m2} & \cdots & \lambda \\
\hline
 & \sigma_1 & \sigma_2 & \cdots & \sigma_m
\end{array}
$$

Kiekviename vieno žingsnio realizavimo etape nuosekliai sprendžiame tik M-osios eilės netiesinių lygčių sistemą. Gautasis metodas vėl yra A stabilusis.

1.14 pavyzdys. Dvipakopis įstrižaininis neišreikštinis Rungės ir Kuto metodas. Įstrižaininio neišreikštinio Rungės ir Kuto metodo formulės sudaromos panašiai kaip ir išreikštinio Rungės ir Kuto metodo formulės. Koeficientus parenkame taip, kad metodo aproksimacijos tikslumo eilė būtų didžiausia ir metodas būtų A stabilusis. Gauname sudėtingas netiesinių lygčių sistemas, todėl tokia analizė yra labai sunkus uždavinys, kai nagrinėjame daugiaetapius metodus.

Užrašykime dvipakopio įstrižaininio neišreikštinio Rungės ir Kuto metodo formulę standartine forma

$$
\begin{cases}
\dfrac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = \sigma_1 K_1 + \sigma_2 K_2 \,, \\
K_1 = f(t_n + a_1\tau, y^n + \tau\lambda K_1) \,, \\
K_2 = f\big(t_n + a_2\tau, y^n + \tau(b_{21}K_1 + \lambda K_2)\big) \,.
\end{cases}
$$

Šio metodo aproksimavimo paklaida yra

$$
\psi^n = \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} - \sigma_1 \tilde{K}_1 - \sigma_2 \tilde{K}_2 \,,
$$

čia pažymėjome

$$
\begin{aligned}
\tilde{K}_1 &= f\big(t_n + a_1\tau, u^n + \tau\lambda\tilde{K}_1\big) \,, \\
\tilde{K}_2 &= f\big(t_n + a_2\tau, u^n + \tau(b_{21}\tilde{K}_1 + \lambda\tilde{K}_2)\big) \,.
\end{aligned}
$$

Taigi turime šešis koeficientus $\sigma_1, \sigma_2, a_1, a_2, b_{21}, \lambda$, kuriuos parinksime taip, kad aproksimavimo paklaida būtų $\mathcal{O}(\tau^3)$ eilės dydis.

Pažymėkime funkcijos f išvestines:

$$f = f(t_n, u^n), \qquad f_t = \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial t},$$
$$f_u = \frac{\partial f(t_n, u^n)}{\partial u}, \quad f_{tu} = \frac{\partial^2 f(t_n, u^n)}{\partial t \partial u}.$$

Iš diferencialinės lygties $u' = f$ nesunkiai išvedame lygybes

$$u'' = f_t + f f_u\,,$$
$$u''' = f_{tt} + 2f f_{tu} + f_t f_u + f f_u^2 + f f_u^2 + f^2 f_{uu}\,.$$

Pasinaudoję funkcijos u^{n+1} Teiloro skleidiniu, gausime lygybę

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = f + \frac{\tau}{2}\big(f_t + f f_u\big) + \frac{\tau^2}{6}\big(f_{tt} + 2f f_{tu} + f_t f_u + f f_u^2 + f^2 f_{uu}\big) + \mathcal{O}(\tau^3)\,.$$

Funkcijos $\tilde{K}_1$ skleidinį apskaičiuojame tris kartus pritaikę Teiloro formulę

$$\begin{aligned}\tilde{K}_1 &= f + \tau a_1 f_t + \tau\lambda \tilde{K}_1 f_u + \frac{\tau^2 a_1^2}{2} f_{tt} + \tau^2 a_1 \lambda K_1 f_{tu} \\ &\qquad + \frac{\tau^2\lambda^2}{2} K_1^2 f_{uu} + \mathcal{O}(\tau^3) \\ &= f + \tau a_1 f_t + \tau\lambda\big(f + \tau a_1 f_t + \tau\lambda\tilde{K}_1 f_u\big) f_u + \frac{\tau^2 a_1^2}{2} f_{tt} \\ &\qquad + \tau^2 a_1 \lambda f f_{tu} + \frac{\tau^2\lambda^2}{2} f^2 f_{uu} + \mathcal{O}(\tau^3) \\ &= f + \tau\big(a_1 f_t + \lambda f f_u\big) + \tau^2\big(\lambda a_1 f_t f_u + \lambda^2 f f_u^2 + \frac{a_1^2}{2} f_{tt} \\ &\qquad + a_1\lambda f f_{tu} + \frac{\lambda^2}{2} f^2 f_{uu}\big) + \mathcal{O}(\tau^3)\,.\end{aligned}$$

Panašiai apskaičiuojame ir funkcijos $\tilde{K}_2$ skleidinį

$$\begin{aligned}\tilde{K}_2 = f &+ \tau(a_2 f_t + (b_{21} + \lambda) f f_u) + \tau^2\big((b_{21} a_1 + \lambda a_2) f_t f_u \\ &+ (2b_{21} + \lambda)\lambda f f_u^2 + \frac{a_2^2}{2} f_{tt} + a_2(b_{21} + \lambda) f f_{tu} \\ &+ \frac{(b_{21} + \lambda)^2}{2} f^2 f_{uu}\big) + \mathcal{O}(\tau^3)\,.\end{aligned}$$

Norėdami gauti trečiosios tikslumo eilės aproksimaciją, sudarome lygčių sistemą

$$\begin{cases} \sigma_1 + \sigma_2 = 1\,, \\ a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 = \dfrac{1}{2}\,, \\ \lambda\sigma_1 + (b_{21} + \lambda)\sigma_2 = \dfrac{1}{2}\,, \\ a_1^2\sigma_1 + a_2^2\sigma_2 = \dfrac{1}{3}\,, \\ a_1\lambda\sigma_1 + a_2(b_{21} + \lambda)\sigma_2 = \dfrac{1}{3}\,, \\ a_1\lambda\sigma_1 + (b_{21}a_1 + \lambda a_2)\sigma_2 = \dfrac{1}{6}\,, \\ \lambda^2\sigma_1 + \lambda(2b_{21} + \lambda)\sigma_2 = \dfrac{1}{6}\,, \\ \lambda^2\sigma_1 + (b_{21} + \lambda)^2\sigma_2 = \dfrac{1}{3}\,. \end{cases} \tag{1.70}$$

Pirmosios dvi lygtys garantuoja, kad metodo aproksimacijos tikslumo eilė yra antroji, kitos šešios lygtys reikalingos metodui sudaryti, kurio aproksimacijos tikslumo eilė yra trečioji.

Matome, kad šeši koeficientai turi tenkinti aštuonias lygtis, todėl tokia lygčių sistema gali būti nesuderinta ir neturėti sprendinių. Tačiau įrodyta, kad (1.70) lygčių sistema turi vienintelį sprendinį, kuris apibrėžia dvipakopį įstrižaininį neišreikštinį Rungės ir Kuto metodą

$$\begin{array}{c|cc} \dfrac{3+\sqrt{3}}{6} & \dfrac{3+\sqrt{3}}{6} & 0 \\ \dfrac{3-\sqrt{3}}{6} & -\dfrac{\sqrt{3}}{3} & \dfrac{3+\sqrt{3}}{6} \\ \hline & \dfrac{1}{2} & \dfrac{1}{2} \end{array}$$

1.4.5. Rozenbroko metodas

Realizuodami m-etapį įstrižaininį neišreikštinį Rungės ir Kuto metodą kiekviename jo žingsnyje sprendžiame m netiesinių lygčių arba jų sistemų. Šio trūkumo neturi *Rozenbroko* (*Rosenbrock*) metodas. Tai dar viena Rungės ir Kuto metodo modifikacija. Pateiksime tik dvipakopio Rozenbroko metodo formulę:

$$\begin{cases} \dfrac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = \dfrac{3}{2}K_1 + \dfrac{1}{2}K_2\,, \\ \big(I - \gamma\tau J(t_n, y^n)\big)K_1 = f(t_n, y^n)\,, \\ \big(I - \gamma\tau J(t_n, y^n)\big)K_2 = f(t_n + \tau, y^n + \tau K_1) - 2K_1\,, \end{cases} \tag{1.71}$$

čia $\gamma = 1 + \dfrac{\sqrt{2}}{2}$, o $J(t, y)$ yra funkcijos f Jakobio matrica. Realizuodami algoritmą sprendžiame dvi tiesinių lygčių sistemas. Pažymėsime, kad abiejų lygčių sistemų matrica yra ta pati, todėl užtenka tik vieną kartą apskaičiuoti šios matricos LU išskaidymą.

Nesunku patikrinti, kad (1.71) metodo aproksimacijos tikslumo eilė yra antroji. Ištirsime dvipakopio Rozenbroko metodo stabilumą. Šiuo metodu spręskime modelinę diferencialinę lygtį

$$\frac{du}{dt} = -\lambda u, \quad \lambda \geqslant 0\,,$$

tada gauname tokį skaitinį sprendinį:

$$y^{n+1} = R(\tau\lambda)y^n,$$

čia $R(\mu)$ yra Rozenbroko metodo stabilumo funkcija

$$R(\mu) = \frac{1 + (1 + \sqrt{2})\mu}{\big(1 + (1 + \sqrt{2}/2)\mu\big)^2}\;.$$

Kadangi $R(\mu) \leqslant 1$, kai $\mu \geqslant 0$, tai dvipakopis Rozenbroko metodas yra nesąlygiškai stabilusis. Tirdami jo stabilumo sritį kompleksinių skaičių plokštumoje $\mathbb{C}$, taip pat nesunkiai įsitikiname, kad metodas yra ir A stabilusis.