

Автономная некоммерческая образовательная организация
высшего образования
«НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»

Научный центр информационных технологий и искусственного интеллекта
направление «Математическое моделирование в биомедицине и геофизике»

К ЗАЩИТЕ ДОПУСТИТЬ

Научный руководитель направления
«Математическое моделирование в
биомедицине и геофизике»
д-р. физ.-мат. наук, профессор, член
корреспондент РАН

Ю. В. Василевский

«_____» _____ 2024 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы
по направлению подготовки 01.04.02 Прикладная математика и информатика
(направленность (профиль) «Математическое моделирование в биомедицине и
нефтегазовом инжиниринге»)

Бутаков Иван Дмитриевич

1. Тема: «Разработка математических моделей и численных методов для решения задач моделирования свёртывания крови»
2. Цель: Разработка математических моделей и программного обеспечения для моделирования каскада реакций свёртывания крови.
3. Задачи: Разработка и валидация математических моделей и программного обеспечения для моделирования каскада реакций свёртывания крови, анализ возможности интеграции полученных результатов в существующие модели тромбообразования.
4. Рабочий график (план) выполнения выпускной квалификационной работы:

№	Перечень заданий	Сроки выполнения
1	Анализ существующих моделей тромбообразования	30.01.2024 – 15.02.2024
2	Анализ литературы, посвященной численному интегрированию жёстких систем реакций	15.02.2024 – 01.03.2024
3	Разработка математической модели свёртывания крови, составление набора валидационных экспериментов	01.03.2024 – 01.04.2024
4	Программная имплементация разработанной математической модели	01.04.2024 – 01.05.2024
5	Валидация полученного программного комплекса на собранном наборе проверочных экспериментов	01.05.2024 – 23.05.2024

Дата выдачи: «_____» _____ 2024 г.

Руководитель:

к.ф.-м.н., снс ИВМ РАН

К. М. Терехов

«_____» _____ 2024 г.

Задание принял к исполнению:

Студент гр. М01ММ-22

И. Д. Бутаков

(подпись)

« ____ » _____ 2024 г.

АННОТАЦИЯ

При патологиях сердечно-сосудистой системы характер течения крови меняется, повышается риск образования тромба. Для моделирования процессов коагуляции требуется решать систему переноса-диффузии-реакции, где реакционная часть представлена жёсткой системой каскада свёртывания крови. Применение традиционных численных схем при интегрировании данной системы может вести к неустойчивости, соответствующие численные решения могут оказаться нефизичными. Также большинство существующих моделей каскада свёртывания крови концентрируются на отдельных сторонах процесса, что существенно ограничивает их область применения.

Настоящая работа является объединением двух магистерских диссертаций, представленных в МФТИ (НИУ) и «Университете «Сириус» в 2024 году. В работе предложена модификация существующей модели фибринового тромба, позволяющая моделировать рост тромбоцитарного тромба в областях с особыми характеристиками потока крови. В тексте работы также предложен новый подход для построения неявных методов численного интегрирования жёстких нелинейных систем. Полученные методы лучше адаптированы к определённому классу задач и позволяют динамически поддерживать баланс между устойчивостью численного решения и линейностью возникающих на каждом шаге алгебраических уравнений. Полученные методы были проверены на следующих жёстких системах: модель Лотки-Вольтерры, модель осциллятора Ван дер Поля, модель каскада свёртывания крови. Во всех случаях предложенные методы показали улучшение устойчивости в сравнении с популярными классическими численными схемами.

Часть работы составляют результаты, опубликованные в статье [14], где метод адаптации применяется для получения двухточечной схемы с матрич-

ными весами и свойствами экспоненциального интегратора. Полученная схема с некоторыми модификациями применяется в статье [25] для интегрирования реакционной части трёхмерной конечно-объёмной модели крови.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	9
1 Моделирование образования тромба	12
1.1 Обзор актуальных задач и проблем	13
1.2 Модель распределения тромбоцитов в объёме	15
1.2.1 Случай высокой концентрации	15
1.2.2 Случай низкой концентрации	16
1.3 Модель тромбоцитарного тромба	19
1.3.1 Реакционная часть	19
1.3.2 Модель вязкости	23
1.3.3 Модель проницаемости	24
2 Теоретические сведения	25
2.1 Регулярные функции операторного аргумента	25
2.2 Линейная теория устойчивости	28
2.2.1 Асимптотический анализ	31
2.2.2 Неасимптотический анализ	37
2.3 Нелинейная теория устойчивости	40
2.4 Жесткие системы дифференциальных уравнений	43
2.4.1 Классическая жёсткость	44
2.4.2 Экспоненциальные интеграторы	47
2.4.3 Нелинейная жёсткость	50
3 Метод адаптации численных схем	55
3.1 Общее описание метода	55
3.2 Примеры использования в задачах малой размерности	58
3.2.1 Одномерная линейная динамическая система	58

3.2.2	Логистическое уравнение	62
3.2.3	Движение материальной точки по окружности	64
3.3	Многомерная экспоненциальная адаптация	66
3.3.1	Общий алгоритм экспоненциальной адаптации	66
3.3.2	Взвешенный метод Эйлера	68
3.3.3	Дважды взвешенный метод Эйлера	69
3.3.4	Адаптированный двухстадийный SDIRK-метод	70
3.4	Модифицированный метод Ньютона	71
4	Численные эксперименты	72
4.1	Система Лотки-Вольтерры	72
4.2	Осциллятор Ван дер Поля	74
4.3	Каскад свёртывания крови	77
	Заключение	82
	Список использованных источников	85

СОКРАЩЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

$\triangleleftrightharpoons$	«...по определению тогда и только тогда, когда ...»
$\triangleq$	«...по определению равно ...»
$\mathcal{B}$	банахово пространство.
$\mathcal{H}$	гильбертово пространство.
$\mathcal{L}(\mathcal{B})$	множество линейных ограниченных операторов, действующих в $\mathcal{B}$.
$\mathbf{x}$	вектор банахова пространства
$\vec{x}$	вектор конечномерного гильбертова пространства
x^*	эрмитово (в случае числа — комплексное) сопряжение.
x^*	оптимальное значение параметра x .
$R(z)$	функция устойчивости численного метода.
$\mathbf{R}$	область устойчивости численного метода.
F	матрица якоби правой части автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений: $F(\mathbf{x}) \triangleq \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x})$.
$\mathcal{R}$	невязка численного метода.
$\mathcal{J}$	матрица Якоби невязки численного метода: $\mathcal{J}(\mathbf{x}) \triangleq \frac{\partial \mathcal{R}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$.
$(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$	вероятностное пространство (Ω — множество исходов, $\mathcal{F}$ — σ -алгебра, $\mathbb{P}$ — вероятностная мера).
$\mathbb{I}_A$	индикаторная функция множества A .
$\mathbb{E} X$	математическое ожидание случайной величины X .
$\mathbb{D} X$	дисперсия случайной величины X .
$\mathring{X}$	«центрированная» случайная величина: $\mathring{X} = X - \mathbb{E} X$.

Нижний индекс может быть использован для обозначения принадлежности. Например, $R_M(z)$ — функция устойчивости численного метода M .

ВВЕДЕНИЕ

Согласно отчётам Всемирной Организации Здравоохранения, смерти от инсультов представляют для человечества серьёзную проблему, занимая второе место по общемировой частоте, уступая только смертям от сердечно-сосудистых заболеваний [37; 62]. Около восьмидесяти процентов инсультов происходят из-за различных нарушений механизма тромбообразования [62], часто вызванных изменением биохимии крови, геометрии отдельных участков сердечно-сосудистой системы или установкой имплантов. Тромбоз также является одной из причин инфарктов. В совокупности примерно двадцать пять процентов смертей по всему миру вызваны артериальным тромбозом — ограничением или полным перекрытием тромбом потока крови в крупной артерии [32]. Это объясняет повышенный интерес к математическим моделям свёртывания крови, позволяющим неинвазивно оценить риск образования тромба и разработать профилактические мероприятия.

Одним из главных вызовов в задаче моделирования тромбообразования является жёсткость реакций, описывающих процесс свёртывания крови, проявляющая себя даже в упрощённых, малокомпонентных моделях [2]. Жёсткость каскада коагуляции выражается во «взрывной» динамике происходящих биохимических процессов, в неустойчивости к малым возмущениям и в пороговом отклике на изменение параметров модели [14; 17; 64]. Такое поведение системы вынуждает использовать малый шаг по времени даже при неявном численном интегрировании, что приводит к непрактично большой длительности моделирования [36].

Жёсткость, связанная с наличием разномасштабных процессов, хорошо изучена в классических работах по устойчивости численных схем [7; 22; 23; 40]. Известно, что неявные методы численного интегрирования успешно подавляют нефизичные неустойчивости и осцилляции, позволяя интегриро-

вать жёсткие системы с разномасштабными процессами, используя большой шаг по времени [75]. Малоизученной, однако, остаётся жёсткость, связанная с нелинейностью правой части системы дифференциальных уравнений, хуже всего проявляющая себя как раз в случае неявных схем, «переносящих» нелинейный характер системы на невязку дискретизованного уравнения; это выражается в ухудшении или полном отсутствии сходимости традиционных методов поиска корней невязки — метода Ньютона и метода прямой итерации [35]. Проблема нелинейной жёсткости частично решается использованием продвинутых методов оптимизации [4; 12; 44; 55], однако особо жёсткие задачи могут потребовать применения крайне медленных и непрактичных алгоритмов полного поиска корней [27].

Перспективным кажется подход, основанный на динамической интерполяции между явными и неявными численными схемами для достижения баланса между устойчивостью и простотой нахождения корней. В качестве примера можно привести замену компонент уравнений реакции, дающих большой вклад во внедиагональную часть матрицы Якоби невязки, на их экстраполированные значения [48]. Также ранее было предложено напрямую взвешивать явную и неявную часть метода Эйлера для улучшения сходимости метода Ньютона при сохранении устойчивости численного решения [14].

Другой важной задачей является построение согласованной модели образования фибринового («красного») и тромбоцитарного («белого») тромба. Традиционно выделяется два механизма коагуляции: полимеризация фибрина, обычно происходящая в местах повреждения тканей [52; 72; 73], и слипание тромбоцитов в областях повышенного сдвигового напряжения [51; 54; 74]. Первый механизм отличается сложностью каскада реакций свёртывания крови, а второй — нетривиальным характером слипания тромбоцитов между собой и со стенками сосуда. Также в обоих случаях образующийся тромб ведёт себя как вязкопластичная и пористая среда [66; 69], что только усложняет моделирование.

В связи со сложностью полноценного математического описания каскада свёртывания крови большинство моделей фокусируется лишь на отдельных аспектах коагуляции, полностью или частично игнорируя другие существенные стороны процесса. Зачастую воспроизводится образование либо фибринового тромба [2; 48], либо тромбоцитарного [19; 20; 24; 45]. Это существенно сужает область применения имеющихся моделей. Поэтому так важно получить наиболее общую, но одновременно наиболее простую модель тромбообразования.

Настоящая работа посвящена как разработке новых методов интегрирования жёстких систем реакций, так и созданию общей модели свёртывания крови. В главе 1 приведены результаты разработки упрощённой модели образования белого тромба; полученные уравнения планируется добавить в уже существующую модель роста фибринового тромба [2; 48]. В главе 2 даётся краткий обзор традиционной теории жёстких систем дифференциальных уравнений, обосновывается необходимость разделения жёсткости на «классическую», связанную с наличием в системе процессов, протекающих на разных временных масштабах, и «неклассическую», наблюдаемую в существенно нелинейных системах. Глава 3 посвящена развитию идеи динамической адаптации численных схем для достижения баланса между устойчивостью и простотой поиска корней невязки дискретизованного уравнения. Наконец, в главе 4 проводятся испытания предложенных методов на наборе классических жёстких задач.

1 МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ТРОМБА

Данный раздел посвящен вопросам разработки универсальной модели коагуляции. Важность медицинских приложений такой модели нельзя переоценить, так как нарушения гемостаза могут вызывать серьезные осложнения и являются одной из наиболее частых причин смерти [32; 37; 62]. Персонализированные модели свёртывания крови в перспективе позволят выявлять пациентов из группы риска и подбирать им индивидуальное лечение с минимальным вмешательством в механизмы гемостаза. Подобные модели полезны и для анализа рисков при установке имплантов, которые, как известно, могут как катализировать, так и подавлять свёртывание крови [11; 52; 58; 59].

Тромбы, значительный объем которых составляет полимеризованная масса фибрина, называют *фибриновыми*, а тромбы, в основном состоящие из слипшихся тромбоцитов — *тромбоцитарными*. Традиционно модели фокусируются на воспроизведении либо фибринового тромба, либо тромбоцитарного. С одной стороны, это обусловлено высокой сложностью каскада реакций полимеризации фибрина [2; 52], с другой — многообразием механизмов слипания тромбоцитов в артериальных потоках крови [51; 52; 54]. В основе разрабатываемой универсальной модели коагуляции лежит модель фибринового тромба, предложенная в работах [2; 48]. Поэтому основной упор будет сделан на модификации, позволяющие моделировать рост тромбоцитарного тромба.

В первой секции настоящей главы приведён краткий обзор актуальных задач и характерных трудностей, возникающих при моделировании процесса образования тромба. Во второй секции поставлены и решены вспомогательные задачи, необходимые для моделирования взаимодействия распределённых в объёме тромбоцитов. Наконец, в третьей секции подробно описана модель тромбоцитарного тромба, предложенная в рамках данной работы.

1.1 Обзор актуальных задач и проблем

При моделировании свёртывания крови приходится решать две существенные проблемы, напрямую вытекающие из сложности и многообразия механизмов поддержания гемостаза. Во-первых, каскад реакций свёртывания крови является жёсткой системой [14; 17; 64], что вынуждает либо тратить значительные вычислительные ресурсы на интегрирование модели с малым шагом по времени, либо использовать дорогостоящие продвинутое численные методы для обхода ограничений, вызванных жёсткостью [14; 48]. Жёсткое поведение является характерным свойством исходной системы, позволяющим эффективно поддерживать гемостаз [17; 64]. Поэтому проблему жёсткости невозможно решить выбором «нежёсткой» модели, не теряя при этом описательной способности. Иначе говоря, формальное описание и решение указанной проблемы лежит в плоскости численных методов, а потому оно вынесено в отдельные главы 2 и 3.

Во-вторых, свёртывание крови может инициироваться, поддерживать-ся и подавляться механизмами, значительно отличающимися друг от друга как по принципу работы, так и по роли в общем каскаде коагуляции [52], что делает поиск компромисса между универсальностью и простотой модели крайне тяжелым. Хорошим показателем высокой сложности построения универсальной модели свёртывания крови служит тот факт, что процесс коагуляции может быть инициирован как химическим воздействием, так и механическим. Конкретно, образование тромба может быть вызвано длинной цепочкой биохимических реакций, инициированной высвобождением тканевого фактора из повреждённого участка сосуда и приводящей к полимеризации фибрина [52; 72; 73]. Также рост тромба может быть запущен слипанием тромбоцитов под действием коллагена [51; 52], фибрина, фибриногена [51; 54] и фактора фон Виллебранда (vWF) [51; 54; 74]. Причём в последнем случае наблюдается усиление слипания с ростом сдвиговых напряжений в потоке

крови [51; 54]. Этот эффект связывают с механическими свойствами фактора фон Виллебранда: при малых скоростях сдвига фактор свёрнут в глобулу и не может сцеплять тромбоциты между собой и со стенкой, однако высокое сдвиговое напряжение позволяют глобулам развернуться, что приводит к агрегации тромбоцитов [1; 56; 57].

Несмотря на то, что современные исследования позволяют говорить о решающей роли фактора фон Виллебранда в агрегации тромбоцитов [15; 16], построение полноценной модели слипания в значительной степени затруднено. Поскольку фактор фон Виллебранда в свёрнутом состоянии не формирует связи с тромбоцитами [74], существенная часть исследований фокусируется на моделировании разворачивания фактора в быстрых потоках крови. Здесь стоит упомянуть феноменологические модели [56; 57], статическую [70] и динамическую [50] модели разворачивания фактора с закреплённым концом, а также модель разворачивания свободной молекулы, учитывающую, помимо высокого сдвигового напряжения, другие механические факторы [1]. Опыты, однако, показывают, что агрегация тромбоцитов начинается при сдвиговых напряжениях, недостаточных для полного разворачивания фактора фон Виллебранда [51; 54]. Таким образом, вышеописанные модели разворачивания фактора невозможно напрямую использовать для регуляции слипания тромбоцитов в моделях тромбоцитарного тромба. Наконец, в универсальной модели каскада коагуляции также необходимо учитывать не только агрегацию, но и активацию тромбоцитов в потоках крови с высокими сдвиговыми напряжениями [15; 52].

Отдельным вызовом также является моделирование механических свойств тромба. Известно, что полимеризованный фибрин и слипшиеся тромбоциты образуют пористую среду, что необходимо учитывать в виде переменного коэффициента проницаемости [69]. Также тромбоциты, скреплённые фактором фон Виллебранда, обладают сравнительно высокой подвижностью [54], что делает тромбоцитарный тромб вязкопластичной средой [66].

1.2 Модель распределения тромбоцитов в объёме

Распределение тромбоцитов в объёме напрямую влияет на формирование связей между ними, что сказывается как на механических свойствах слипшейся массы, так и на скорости слипания. Отсюда следует важность отдельного моделирования объёмного распределения тромбоцитов.

В данном разделе рассматривается вывод закона распределения из небольшого числа интуитивно понятных предположений. Во-первых, предполагается, что при достижении предельной концентрации взаимное расположение тромбоцитов близко к плотной упаковке трёхмерных шаров. Во-вторых, считается, что при малых концентрациях тромбоциты распределены по объёму почти равномерно и случайно, их взаимодействие между собой несущественно. В-третьих, предполагается существование для средних значений концентрации переходного режима, в котором распределение тромбоцитов всё ещё достаточно случайное, но взаимодействием между ними пренебрегать уже нельзя в силу значительности занимаемого ими объёма.

1.2.1 Случай высокой концентрации

Высокая концентрация соответствует сформировавшемуся тромбу. Тромбоциты в таком тромбе прилегают друг другу плотно. В приближении сферически симметричных тромбоцитов можно задействовать известный результат для плотной упаковки трёхмерных шаров:

Теорема 1.1 (Гаусс, Кеплер, Хейлз [29]). *В пространстве $\mathbb{R}^3$ рассмотрим последовательность ограниченных измеримых множеств S_n таких, что n -ое множество содержит шар радиуса хотя бы n . Пусть $\mathcal{F}_n$ — семейство подмножеств S_n , являющихся дизъюнктивным объединением единичных шаров. Пусть $\varphi: \bigcup_{n \in \mathbb{N}} \mathcal{F}_n \rightarrow \mathbb{N}_0$ отображает дизъюнктивное объединение шаров в*

число шаров в этом объединении. Тогда

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \max_{R \in \mathcal{F}_n} \frac{\varphi(R)}{\mu(S_n)} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$$

Таким образом, максимально возможная концентрация частиц радиуса R равна

$$n_{\max} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{1}{4\sqrt{2}R^3} = \frac{\sqrt{2}}{(2R)^3}$$

Размер тромбоцитов в человеческой крови составляет примерно 3–4 мкм [53]. Приняв этот размер за диаметр, получаем значение предельной концентрации: от $2 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ до $6 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$, или примерно $40 \cdot 10^6 \text{ мкл}^{-1}$. При нормальных условиях концентрация тромбоцитов в крови человека примерно равна $0.3 \cdot 10^6 \text{ мкл}^{-1}$ [3], что более чем в 100 раз меньше предельной концентрации (или, иначе говоря, среднее расстояние между тромбоцитами примерно в $\sqrt[3]{100} \approx 5$ раз больше их радиуса).

Таким образом, можно вполне справедливо полагать, что на ранних этапах образования тромба концентрация тромбоцитов достаточно мала.

1.2.2 Случай низкой концентрации

Рассмотрим сосуд объёма V_0 , наполненный жидкостью с равномерно распределённой примесью концентрации $n = N/V_0$. Число частиц в части сосуда объёма V распределено биномиально с параметром $p = Vn/N = V/V_0$:

$$\mathbb{P}\{\# \text{ частиц} = k\} = \binom{N}{k} \left(\frac{V}{V_0}\right)^k \left(1 - \frac{V}{V_0}\right)^{N-k}$$

При устремлении $V_0/V \rightarrow +\infty$ получаем известный результат — распределение Пуассона для числа частиц в малом объёме:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\{\# \text{ частиц} = k\} &\sim \frac{N^k}{k!} \left(\frac{V}{V_0}\right)^k \left(1 - \frac{V}{V_0}\right)^N = \\ &= \frac{(V_0 n)^k}{k!} \left(\frac{V}{V_0}\right)^k \left(1 - \frac{V}{V_0}\right)^{V_0 n} \sim \frac{(V n)^k}{k!} e^{-V n}\end{aligned}$$

Заметим, что вероятность обнаружить в объёме V не менее k частиц равна

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\{\# \text{ частиц} \geq k\} &= 1 - \mathbb{P}\{\# \text{ частиц} < k\} = 1 - \sum_{m=0}^{k-1} \mathbb{P}\{\# \text{ частиц} = m\} = \\ &= 1 - e^{-V n} \sum_{m=0}^{k-1} \frac{(V n)^m}{m!} \quad (1.1)\end{aligned}$$

Полученное выражение является функцией распределения для *гамма-распределения* с параметрами $k, 1/n$.

Нас интересует вероятностное распределение расстояния от выбранной частицы до k -ого ближайшего соседа (обозначим это расстояние r_k). То есть, что эквивалентно, вероятностное распределение объёма шара, в котором есть хотя бы k частиц (помимо центра).

Обозначим $V(r)$ и $S(r)$ — объём шара и площадь сферы радиуса r соответственно (в трёхмерном случае — $\frac{4}{3}\pi r^3$ и $4\pi r^2$ соответственно).

$$\mathbb{P}\{r_k < x\} = \mathbb{P}\{\text{в } V = V(x) \text{ находится } \geq k \text{ частиц}\} \quad (1.2)$$

Комбинируя (1.1) и (1.2), получаем функцию распределения для r_k :

$$F_{r_k}(x) = 1 - e^{-V(x)n} \sum_{m=0}^{k-1} \frac{(V(x)n)^m}{m!} \quad (1.3)$$

Дифференцируя по x (с учётом соотношения $\partial V(x)/\partial x = S(x)$), получаем

плотность распределения:

$$\begin{aligned}\rho_{r_k}(x) &= e^{-V(x)n} \cdot \left[S(x)n \sum_{m=0}^{k-1} \frac{(V(x)n)^m}{m!} - \sum_{m=1}^{k-1} \frac{S(x)n(V(x)n)^{m-1}}{(m-1)!} \right] = \\ &= S(x)n \cdot e^{-V(x)n} \frac{(V(x)n)^{k-1}}{(k-1)!}\end{aligned}$$

Характерный вид $F_{r_k}(x)$ и $\rho_{r_k}(x)$ представлен на рисунке 1.1.

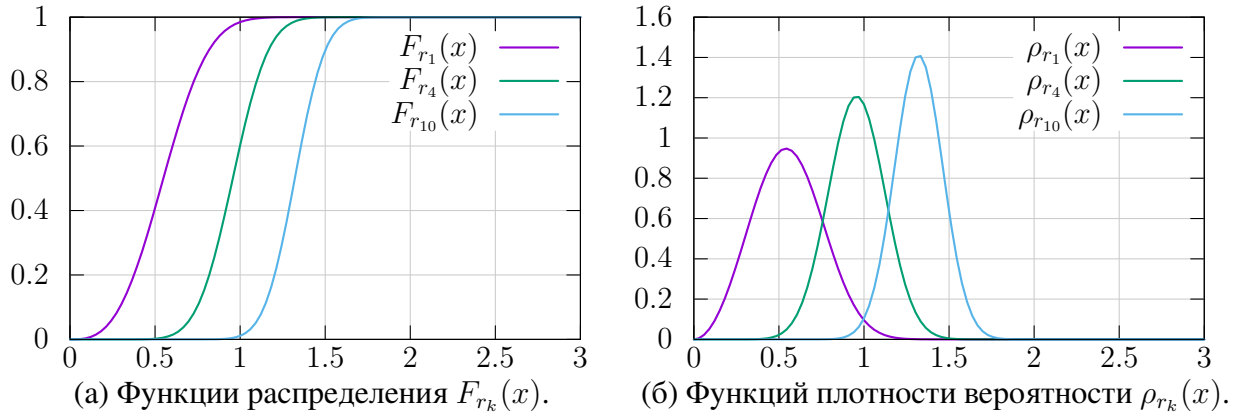


Рисунок 1.1 – Графики распределения случайной величины r_k для $k \in \{1, 4, 10\}$.

Найдём моменты случайной величины r_k . Вспомним, что объём d -мерного шара радиуса r пропорционален r^d :

$$V_d(r) = V_d(1) \cdot r^d \quad \Rightarrow \quad r = \sqrt[d]{V_d(r)/V_d(1)},$$

Тогда

$$\begin{aligned}\mathbb{E} r_k^m &= \int_0^{+\infty} x^m \rho_{r_k}(x) dx = \int_0^{+\infty} x^m e^{-V(x)n} \frac{(V(x)n)^{k-1}}{(k-1)!} S(x)n dx = \\ &= \int_0^{+\infty} x^m(V) \cdot e^{-Vn} \frac{(Vn)^{k-1}}{(k-1)!} d(Vn) = \\ &= V(1)^{-m/d} \int_0^{+\infty} V^{m/d} \cdot e^{-Vn} \frac{(Vn)^{k-1}}{(k-1)!} d(Vn) =\end{aligned}$$

$$= \frac{(V(1)n)^{-m/d}}{(k-1)!} \int_0^{+\infty} z^{m/d+k-1} e^{-z} dz = \frac{\Gamma(m/d+k)}{\Gamma(k)} (V(1)n)^{-m/d}$$

В частности, в трёхмерном случае среднее расстояние до ближайшего соседа примерно равно $0.83 \cdot n^{-1/3}$.

1.3 Модель тромбоцитарного тромба

В данном разделе будет предложена модель образования белого тромба, дополняющие результаты работ [2; 48]. Основу модели будут составлять три компонента: свободные, липкие и закрепившиеся тромбоциты. Первые два компартмента будут моделироваться пассивной примесью, третий будет образовывать неподвижную пористую среду. Реакционная часть модели позволит описать переход тромбоцитов из одного компартмента в другой под действием слипания и разъединения потоком. Модели вязкости и проницаемости слипшейся массы должны позволить воспроизвести наблюдаемые процессы закрепления тромба и блокировки потока крови.

Программная имплементация основана на конечно-объемном коде уравнения переноса-диффузии-реакции из работы [48], позволяющем модифицировать реакционную часть, отключать перенос определённых примесей, а также динамически менять вязкость и проницаемость среды. Поэтому в настоящем разделе мы сфокусируемся только на существенных модификациях, вносимых в используемую модель. Конкретно, будут описаны новые реакционные члены, а также модель вязкости и проницаемости.

1.3.1 Реакционная часть

Традиционно процесс образования белого тромба описывается многокомпонентной моделью [19; 20; 24; 45]. Однако экспериментальные данные позволяют предположить, что воспроизведение отдельно механизма слипа-

ния тромбоцитов может потребовать добавления лишь небольшого числа новых компонент в существующую модель фибринового тромба.

Результаты лабораторных опытов говорят о том, что в областях повышенных сдвиговых напряжений происходят качественные изменения тромбоцитов, заставляющие их налипать на стенку ниже по течению, где сдвиговое напряжение возвращается к нормальному значению [51]. Также известно, что сдвиговое напряжение влияет и на местную агрегацию тромбоцитов: при его повышении фибриновые и фибриногеновые связи наблюдаются реже, а связи посредством фактора фон Виллебранда — чаще [54]. Это связано с механическими свойствами фактора фон Виллебранда: при малых скоростях сдвига фактор свёрнут в глобулу и не может сцеплять тромбоциты между собой и со стенкой, однако высокое сдвиговое напряжение разворачивает глобулы и открывает сайты связывания, что в конечном итоге приводит к агрегации тромбоцитов [1; 56; 57; 74].

Можно выдвинуть предположение, что в областях с повышенным сдвиговым напряжением тромбоциты образуют липкие агрегаты, скреплённые частично или полностью развёрнутым фактором фон Виллебранда. Агрегаты могут далее оседать как в месте своего образования, так и ниже по течению. Такая модель требует введения всего двух компонент: концентрации липких и слипшихся тромбоцитов. Требуется также учесть разрушение связей между тромбоцитами из-за механического воздействия или других факторов. Итоговые уравнения имеют вид

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi_f}{\partial t} &= -k_{f \rightarrow a} \cdot \phi_f + k_{da} \cdot \phi_a \\ \frac{\partial \phi_a}{\partial t} &= k_{f \rightarrow a} \cdot \phi_f - k_{a \rightarrow d} \cdot \phi_a + k_{da} \cdot (\phi_d - \phi_a) \\ \frac{\partial \phi_d}{\partial t} &= k_{a \rightarrow d} \cdot \phi_a - k_{da} \cdot \phi_d \end{cases} \quad (1.4)$$

где ϕ_f , ϕ_a и ϕ_d — концентрации свободных, липких и слипшихся тромбоцитов соответственно, k_{da} — скорость дизагрегации тромбоцитов из-за внеш-

него воздействия, а $k_{f \rightarrow a}$ и $k_{a \rightarrow d}$ отвечают за скорость агрегации и слипания тромбоцитов. Концентрации ϕ_f и ϕ_a участвуют в переносе и диффузии в качестве пассивной примеси, ϕ_d же считается концентрацией строго неподвижной примеси.

Будем рассматривать случай высоких сдвиговых напряжений, когда большая часть связей между тромбоцитами опосредована фактором фон Виллебранда. Предполагая объёмную концентрацию ϕ_a постоянной (равновесной), можно аналитически решить (1.4) для зависимости ϕ_d от времени:

$$\frac{\partial \phi_d}{\partial t} = k_{a \rightarrow d} \cdot \phi_a - k_{da} \cdot \phi_d \quad \Rightarrow \quad \phi_d(t) = \phi_a \frac{k_{a \rightarrow d}}{k_{da}} - e^{-k_{da} t} \left(\phi_a \frac{k_{a \rightarrow d}}{k_{da}} - \phi_d(0) \right) \quad (1.5)$$

В работе [54] представлены данные, описывающие динамику тромбоцитов, налипших на подложку с нанесённым фактором фон Виллебранда, с течением времени и при разных сдвиговых напряжениях. В результате решения задачи наименьших квадратов для полученной экспоненциальной модели (1.5) можно сделать вывод, что k_{da} почти не зависит от сдвигового напряжения (что не так для фибрина и фибриногена) и примерно равен $3.3 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ — см. рисунок 1.2.

Из той же работы также можно получить зависимость $k_{f \rightarrow a}$ и $k_{a \rightarrow d}$ от сдвигового напряжения, которая должна быть пропорциональна предельному числу налипших на подложку тромбоцитов (см. (1.5)). Решая задачу наименьших квадратов с экспоненциальной моделью, получаем

$$k_{f \rightarrow a}, k_{a \rightarrow d} \sim 1 - a e^{-b \dot{\gamma}}, \quad a = 0.76, b = 2.85 \cdot 10^{-3} \text{ с}, \quad (1.6)$$

где $\dot{\gamma}$ — скорость сдвига. Экспериментальные данные и кривая модели приведены на рисунке 1.3.

В работе [45] предлагается считать процесс формирования тромба послойным, то есть переход $\phi_a \rightarrow \phi_d$ возможен только вблизи поверхности сосу-

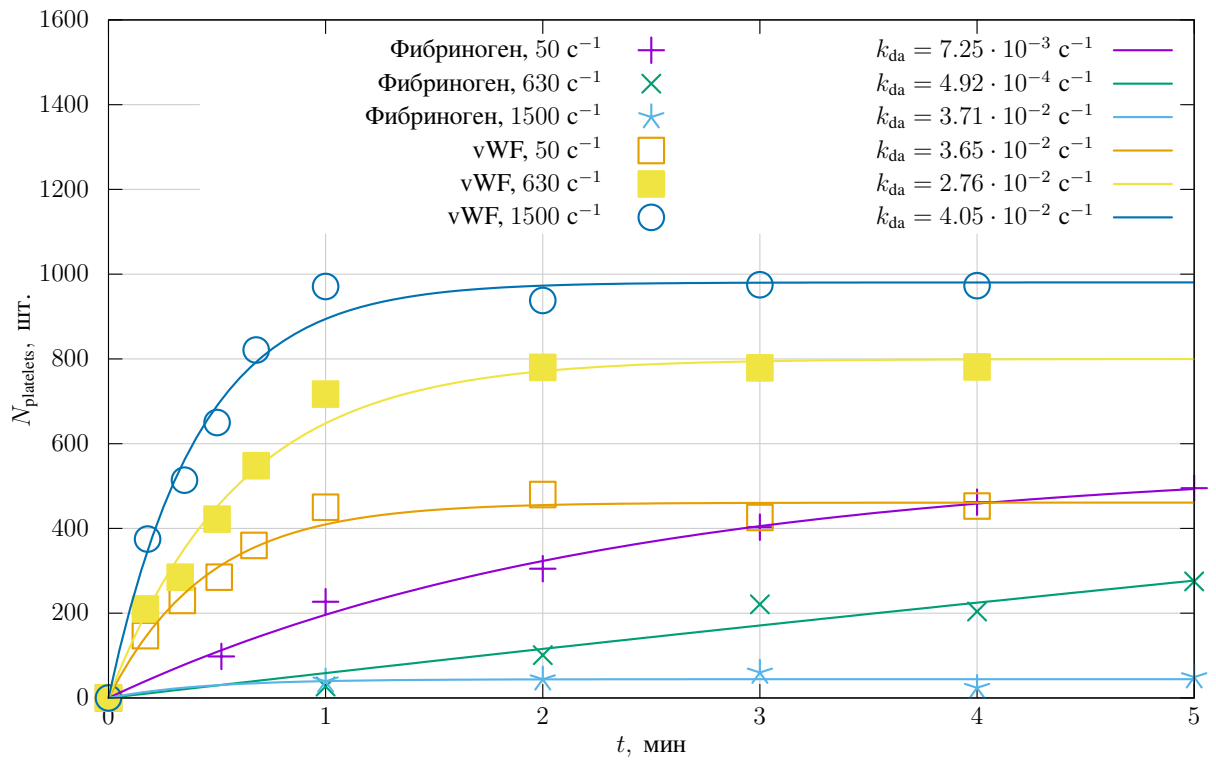


Рисунок 1.2 – Зависимость числа налипших тромбоцитов от времени при разной сдвиговой скорости в потоке у стенки [54].

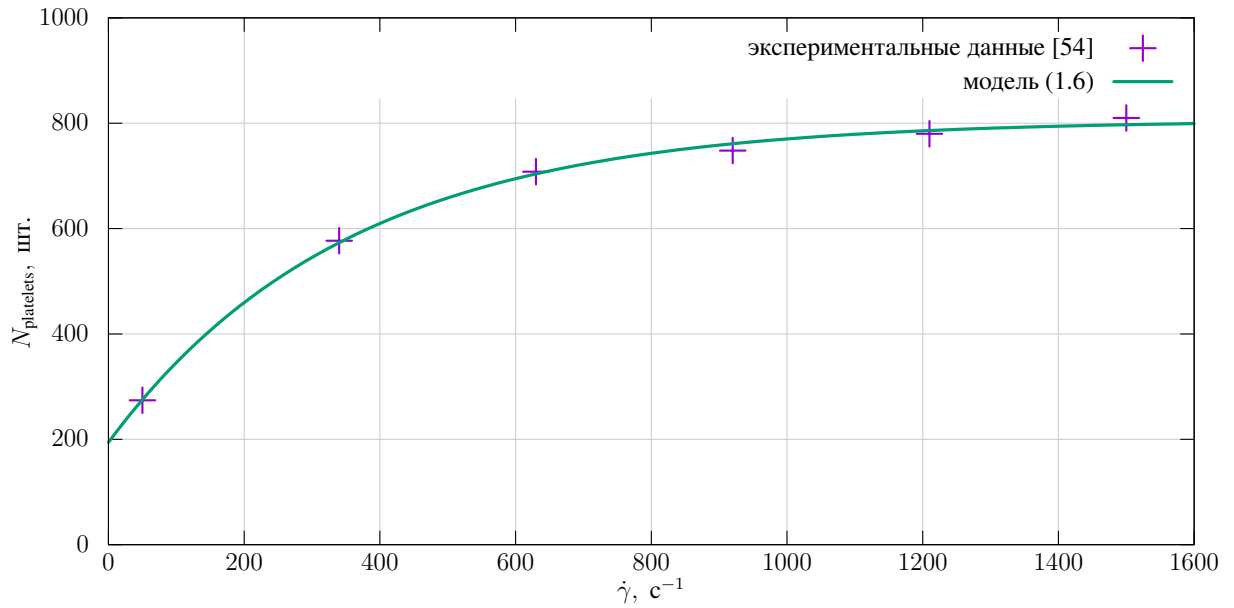


Рисунок 1.3 – Зависимость числа налипших тромбоцитов от сдвиговой скорости в потоке у стенки [54].

да или уже образовавшегося тромба. Математически данная идея формализуется посредством свёртки некоторого ядра $K(\vec{r})$, ширина которого отвечает за характерное расстояние слипания тромбоцитов, с функцией $\alpha_c \cdot \phi_d(\vec{r}) + \alpha_b \cdot \mathbb{I}_{\partial\Omega_{\text{adh}}}(\vec{r})$, где $\partial\Omega_{\text{adh}}$ обозначает границу области, на которую могут крепиться

тромбоциты, а коэффициенты α регулируют скорость налипания.

На практике расстояния, на которых формируются связи между тромбоцитами, гораздо меньше характерных размеров ячеек расчётной сетки, а потому результат свёртки будет равен $\alpha_c \cdot S_d + \alpha_b \cdot S_b$, где S_b — суммарная площадь контакта ячейки с той частью границы, на которую могут крепиться тромбоциты, а S_c — суммарная площадь контакта с соседними ячейками, в которых тромб уже сформирован. В работе [45] предлагается следующая формула для S_c :

$$S_c(c) = \sum_{f \in \text{faces}(c)} |f| \cdot (\phi_d(f)/\phi_{\max}) \cdot \mathbb{I}_{[\phi_{\text{clot}}; +\infty)}(\phi_d(f)),$$

где c — рассматриваемая ячейка, $\text{faces}(c)$ — грани ячейки c , $|f|$ — площадь грани f , $\phi_d(f)$ — концентрация ϕ_d в ячейке через грань f от c , $\phi_{\max}$ — максимально допустимая концентрация тромбоцитов (см. 1.2.1), а ϕ_{clot} — минимальная концентрация тромбоцитов в белом тромбе (определяется экспериментально).

1.3.2 Модель вязкости

В работе [66] было продемонстрировано, что белый тромб ведёт себя как вязкопластичная среда, вязкость которой растёт по мере роста концентрации за счёт образования новых связей между тромбоцитами. Пренебрегая пластичным аспектом, построим модель вязкости тромба из предположения о её пропорциональности числу связей между липкими (ϕ_a) тромбоцитами; связи между уже слипшимися и закрепившимися тромбоцитами не рассматриваются, так как последние формируют неподвижную массу, не участвующую в переносе и диффузии.

Микрофотографии, приведённые в работе [57], говорят о том, что агрегация тромбоцитов посредством фактора фон Виллебранда может наблюдаться на расстоянии до 10 — 15 мкм; обозначим данное характерное рассто-

яние за L_{vWF} . При этом можно предполагать, что сравнительно устойчивые агрегаты формируются только тогда, когда каждый тромбоцит сцеплен с тремя или более другими тромбоцитами. Тогда можно рассмотреть следующую модель вязкости:

$$\nu = \nu_0 \cdot (1 + \beta \cdot F_{r_k}(L_{\text{vWF}})),$$

где ν_0 — вязкость крови без агрегаций из тромбоцитов, F_{r_k} определена в уравнении (1.3), β — параметр влияния степени агрегации тромбоцитов на вязкость, $k \approx 4$, $L_{\text{vWF}} \approx 10$ мкм. В действительности β также зависит от скорости сдвига (нелинейная вязкость), однако данных для восстановления зависимости не хватает; в качестве начального приближения можно взять $\beta \approx 5 - 20$ [10].

1.3.3 Модель проницаемости

Вопрос о проницаемости и пористой структуре тромба подробно исследован в работе [69]. Было показано, что модель Кожены-Кармана [67] достаточно хорошо описывает зависимость проницаемости тромба от концентрации тромбоцитов:

$$k_p = \frac{\Psi_p^2 \cdot d_p^2 \cdot (1 - \phi_d)^3}{150 \cdot \phi_d^3},$$

где Ψ_p — сферичность тромбоцитов (≈ 0.7 [69]), d_p — диаметр тромбоцитов.

2 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

В настоящем разделе приведён краткий обзор классических результатов теории жёстких систем дифференциальных уравнений [35; 75]. Он необходим для понимания преимуществ неявных численных схем и экспоненциальных интеграторов — ключевых составляющих разрабатываемого в рамках данной работы семейства методов для решения жёстких систем. Также без данного обзора невозможно было бы отделить «классическую» жёсткость от «неклассической», часто наблюдаемой в случае сильно нелинейных уравнений реакций.

Первая секция данной главы посвящена линейной теории устойчивости, хорошо описывающей поведение численных методов при линейной реакции системы на возмущения численного решения. На основе линейной теории устойчивости вводится понятие «классической» линейной жёсткости. Вторая секция содержит краткое описание нелинейной теории устойчивости, обобщающей понятие «классической» жёсткости на случай нелинейной реакции системы на возмущения. В третьей секции приведены результаты, говорящие о необходимости введения нового, «неклассического» определения жёсткости для описания явлений, не связанных с жёстким характером реакции динамической системы на малые возмущения.

2.1 Регулярные функции операторного аргумента

В ходе работы часто будут встречаться выражения, с которыми проще и удобнее работать в терминах теории регулярных функций операторного аргумента. В настоящем разделе компактно приведены необходимые результаты из соответствующей области.

Определение 2.1. Пусть $\mathcal{B}$ — банахово пространство, $A \in \mathcal{L}(\mathcal{B})$ — линейный ограниченный оператор над $\mathcal{B}$, I — единичный оператор над $\mathcal{B}$. Спек-

тром оператора A называется $\sigma(A) = \{\lambda \mid A - \lambda I \text{ необратим}\}$.

Определение 2.2 ([63], утверждение 2.7). Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве B над $\mathbb{C}$, $\sigma(A)$ — спектр оператора A , а $f: U \rightarrow \mathbb{C}$ — регулярная в области $U \supset \sigma(A)$ функция. Тогда можно определить

$$f(A) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(\xi) (\xi I - A)^{-1} d\xi, \quad (2.1)$$

где Γ — произвольный гладкий контур в U такой, что $\sigma(A)$ целиком находится по левую сторону при положительном обходе Γ .

Для численных методов часто бывает важным понять, переводит ли некоторая регулярная функция вещественные матрицы в вещественные. В связи с этим полезны следующие результаты:

Замечание 2.3 (Производная Виртингера регулярной функции). Условие $\frac{\partial f(z)}{\partial z^*} = 0$ эквивалентно условиям Коши-Римана, а потому выполнено для всех регулярных функций.

Лемма 2.4. Если $f(z): U \rightarrow \mathbb{C}$ регулярна в симметричной относительно действительной оси области U , то $(f(z^*))^*$ регулярна в той же области.

Доказательство. $\frac{\partial (f(z^*))^*}{\partial z^*} = \left(\frac{\partial f(z^*)}{\partial z} \right)^* = \left(\frac{\partial f(z)}{\partial z^*} \right)^* = 0^* = 0.$ □

Следствие 2.5. Пусть f — регулярная функция, удовлетворяющая условиям леммы 2.4. Тогда $f(z) - (f(z^*))^* = \text{const.}$

Доказательство. Согласно лемме 2.4, $g(z) \triangleq f(z) - (f(z^*))^*$ регулярна в той же области, что и $f(z)$. При этом

$$\frac{\partial g}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{\partial (f(z^*))^*}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial z} - \left(\frac{\partial f(z^*)}{\partial z} \right)^* = \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{\partial f}{\partial z} = 0$$

Следовательно, $g(z) = \text{const.}$ □

Следствие 2.6. Пусть f — регулярная функция, удовлетворяющая условиям леммы 2.4 и $f(\mathbb{R}) \subseteq \mathbb{R}$ (f переводит вещественные числа в вещественные). Тогда $f(z^*) = (f(z))^*$

Доказательство. Достаточно заметить, что $f(x^*) = (f(x))^*$ для любого действительного числа x из области определения $f(z)$, и воспользоваться следствием 2.5. □

Теорема 2.7. Пусть $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ и $f: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ удовлетворяют определению 2.2. Пусть также $f(\mathbb{R}) \subseteq \mathbb{R}$. Тогда $f(M) \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Доказательство. Поскольку матрица M вещественная, характеристический многочлен имеет вещественные коэффициенты. По теореме о корнях многочлена с вещественными коэффициентами $\sigma(A)$ симметричен относительно вещественной прямой. Из условия тогда следует, что можно сузить $f(z)$ на симметричную относительно действительной оси область, содержащую $\sigma(A)$. Тогда, согласно следствию 2.6 получаем $f(z^*) = (f(z))^*$.

Рассмотрим симметричный относительно вещественной прямой контур, удовлетворяющий 2.2. Разобьём его на три части: $\Gamma = \Gamma^+ \sqcup \Gamma^- \sqcup \Gamma^0$, где $\Gamma^+ \triangleq \{z \in \Gamma \mid \operatorname{Im} z > 0\}$, $\Gamma^0 = \Gamma \cap \mathbb{R}$. Тогда выражение (2.1) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} f(A) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^+} f(\xi) (\xi I - A)^{-1} d\xi + \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^-} f(\xi) (\xi I - A)^{-1} d\xi + \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^0} f(\xi) (\xi I - A)^{-1} d\xi, \end{aligned}$$

где последнее слагаемое даёт ноль (гладкий симметричный относительно вещественной прямой контур не может иметь пересечение с $\mathbb{R}$ ненулевой дли-

ны). Покажем, что оставшиеся слагаемые комплексно сопряжены:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^+} f(\xi) (\xi \mathbf{I} - A)^{-1} d\xi &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^-} f(\xi^*) (\xi^* \mathbf{I} - A)^{-1} d\xi = \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^-} \left[f(\xi) (\xi \mathbf{I} - A)^{-1} \right]^{*T} d\xi = \left[\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^-} f(\xi) (\xi \mathbf{I} - A)^{-1} d\xi \right]^{*T}, \end{aligned}$$

где было использовано $A^{*T} \triangleq (A^*)^T = A$ и $f(z^*) = (f(z))^*$. Отсюда следует, что итоговая сумма является матрицей с вещественными элементами. $\square$

2.2 Линейная теория устойчивости

При численном решении систем дифференциальных уравнений неизбежны возмущения, вызванные дискретизацией, а также неточностью машинной арифметики. Поведение систем и численных методов под действием возмущений во многом определяет объёмы вычислительных ресурсов, необходимых для получения точного численного решения. Линейная теория устойчивости численных методов позволяет проанализировать устойчивость аналитического и численного решения к малым возмущениям в линейном приближении. Линейный анализ особенно удобен тем, что позволяет выводить необходимые и достаточные условия устойчивости из спектральных свойств возникающих линейных операторов.

Рассмотрим задачу Коши

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x}) \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \end{cases} \quad \mathbf{x}: [0; T] \rightarrow \mathcal{B}, \quad f: [0; T] \times D \rightarrow \mathcal{B},$$

где $D \subseteq \mathcal{B}$, а $\mathcal{B}$ — банахово. Для простоты анализа и без ограничения общности считаем систему автономной; это эквивалентно добавлению дополни-

тельной компоненты (времени) с производной, тождественно равной единице.

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}), \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \end{cases}$$

Пусть f дифференцируема в окрестности $\mathbf{x}_0$. Рассмотрим соответствующую линеаризованную систему:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = f_0 + F_0 \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \end{cases} \quad (2.2)$$

где $f_0 \triangleq f(\mathbf{x}_0)$, а $\left. \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}_0} = F(\mathbf{x}_0) \triangleq F_0$ — матрица Якоби правой части уравнения в точке $\mathbf{x}_0$. Для линеаризованной задачи известно точное решение:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + (\exp(tF_0) - I)F_0^{-1} \cdot f_0 \quad (2.3)$$

Несмотря на потенциальную вырожденность F_0 , аппарат функционального анализа позволяет определить (2.3) для всех F_0 .

Замечание 2.8. Следующая функция является регулярной во всём $\mathbb{C}$:

$$\varphi_1(z) = \begin{cases} \frac{e^z - 1}{z}, & z \neq 0 \\ 1, & z = 0 \end{cases}$$

Замечание 2.9. Решение (2.3) представимо в виде $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + \varphi_1(tF_0) \cdot t f_0$.

Линеаризованная система (2.2) и соответствующее аналитическое решение (2.3) могут быть использованы для анализа устойчивости системы к малым возмущениям. Фактически, линеаризация означает разложение системы на две составляющие: общий нелинейный тренд, задающий динамику невозмущённого решения, и линейную часть, отвечающую за реакцию системы на небольшие возмущения. Предполагая малый вклад нелинейных членов, а так-

же невырожденность F_0 , можно сделать замену $\mathbf{x} := \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 + F_0^{-1} \cdot f_0$ (ноль становится положением равновесия) и свести задачу к линейному проверочному уравнению Даламбера [23]:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = F_0 \cdot \mathbf{x}, \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \end{cases} \iff \mathbf{x}(t) = \exp(tF_0) \cdot \mathbf{x}_0 \quad (2.4)$$

Для линейных (возможно, многошаговых) численных схем правая часть вида $F_0 \cdot \mathbf{x}$ также позволяет записать переход от текущего к новому шагу численного интегрирования через действие некоторого линейного оператора:

$$\mathbf{x}^{n+1} = R(\Delta t \cdot F_0) \cdot \mathbf{x}^n, \quad (2.5)$$

где $R(z)$ — функция устойчивости, а $R(\Delta t \cdot F_0)$ — матрица перехода. Для большинства схем можно рассматривать $R(z)$ как функцию комплексного переменного, естественным образом продолженную на матричный аргумент (см. 2.2). Однако есть и исключения: например, у линейных схем с матричными (не скалярными) весами функция $R(z)$ изначально может быть определена только для матричного аргумента. В классической линейной теории устойчивости такие схемы не рассматриваются.

Приведём несколько примеров линейных численных схем и соответствующих функций устойчивости. Эти примеры понадобятся при дальнейшем анализе, а также будут периодически фигурировать в различных сравнениях.

$$\text{Явный метод Эйлера: } \frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} = f(\mathbf{x}^n) \quad R(z) = 1 + z$$

$$\text{Неявный метод Эйлера: } \frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} = f(\mathbf{x}^{n+1}) \quad R(z) = \frac{1}{1 - z}$$

$$\text{Метод трапеций: } \frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}f(\mathbf{x}^n) + \frac{1}{2}f(\mathbf{x}^{n+1}) \quad R(z) = \frac{2 + z}{2 - z}$$

Общий случай двухшаговой одностадийной схемы:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} &= (1 - \Theta)f(\mathbf{x}^n) + \Theta f(\mathbf{x}^{n+1}) \\ R(z) &= (\mathbf{I} - z\Theta)^{-1}(\mathbf{I} + z(\mathbf{I} - \Theta)) \end{aligned} \quad (2.6)$$

где Θ , вообще говоря, может быть произвольным обратимым линейным оператором (в таком случае $R(\cdot)$ следует изначально рассматривать как функцию операторного аргумента, не имеющую прототипа среди функций комплексного переменного. Если же Θ — число, то данная схема называется θ -методом (в этом случае используется обозначение $\Theta = \theta$).

2.2.1 Асимптотический анализ

Рассмотрим формально вопросы затухания возмущений аналитического и численного решения с течением времени. Нас интересуют условия, при которых численное решение сходится к положению равновесия системы дифференциальных уравнений независимо от начальных возмущений. Спектральная теория операторов позволяет довольно легко получить необходимые результаты в терминах асимптотической устойчивости.

Определение 2.10. Пусть $\sigma(A) \subseteq \mathbb{C}$ — спектр линейного оператора A . Число $r(A) = \sup\{|\lambda| \mid \lambda \in \sigma(A)\}$ называется спектральным радиусом линейного оператора A , а $s(A) = \sup\{\operatorname{Re} \lambda \mid \lambda \in \sigma(A)\}$ — спектральной границей.

Теорема 2.11 (об отображении спектра; [63], утверждение 2.8). Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве

$\mathcal{B}$ над $\mathbb{C}$, f — регулярная в области $U \supset \sigma(A)$ функция. Тогда

$$\sigma(f(A)) = f(\sigma(A))$$

Здесь и далее под нормой оператора будет подразумеваться норма, подчинённая норме линейного пространства, в котором действует оператор: $\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|$.

Теорема 2.12 (формула Бёрлинга-Гельфанда). Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве $\mathcal{B}$ над $\mathbb{C}$. Тогда $r(A) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|A^n\|^{\frac{1}{n}} = \inf_{n \in \mathbb{N}} \|A^n\|^{\frac{1}{n}}$.

Следствие 2.13. Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве $\mathcal{B}$ над $\mathbb{C}$. Тогда

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0 \quad (r(A))^n \leq \|A^n\| < (r(A) + \varepsilon)^n$$

Доказательство. По теореме 2.12

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0 \quad \left| \|A^n\|^{\frac{1}{n}} - r(A) \right| < \varepsilon,$$

причём $\forall n \in \mathbb{N} \quad (r(A))^n = r(A^n) \leq \|A^n\|$. Тогда

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0 \quad r(A) \leq \|A^n\|^{\frac{1}{n}} < r(A) + \varepsilon,$$

откуда получаем искомое неравенство. □

Лемма 2.14. Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве $\mathcal{B}$ над $\mathbb{C}$. Тогда

$$s(A) = \inf \left\{ \omega \in \mathbb{R} : \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-\omega t} \cdot \|\exp(t \cdot A)\| = 0 \right\}$$

Доказательство. Обозначим $T(t) = \exp(t \cdot A)$. Тогда

$$T(t) = \exp((n\Delta t + \tau) \cdot A) = (T(\Delta t))^n \cdot T(\tau),$$

где $\Delta t > 0$, $n = \lfloor t/\Delta t \rfloor$, $\tau = t - n\Delta t \in [0; \Delta t)$. В силу ограниченности A имеем $\|T(t)\| \leq e^{t \cdot \|A\|}$. Согласно теореме 2.11, $\sigma(T(t)) = \exp(t \cdot \sigma(A))$, из чего следует $r(T(t)) = e^{t \cdot s(A)}$ (так как $|e^z| = e^{\operatorname{Re} z}$, а экспонента — монотонно возрастающая на $\mathbb{R}$ функция). Применяя следствие 2.13 и учитывая, что

$$C^{-1} = e^{-\Delta t \cdot \|A\|} \leq \|T(-\tau)\|^{-1} = \|T(\tau)^{-1}\|^{-1} \leq \|T(\tau)\| \leq e^{\Delta t \cdot \|A\|} = C,$$

получаем, что $\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0$

$$C^{-1} \cdot e^{n\Delta t \cdot s(A)} \leq \|T(t)\| \leq C \cdot e^{n\Delta t \cdot (s(A) + \varepsilon)}$$

Наконец, так как $n\Delta t = t - \tau$, $\forall \varepsilon > 0 \quad \exists t_0 > 0 : \forall t > t_0$

$$K^{-1} \cdot e^{t \cdot s(A)} \leq \|T(t)\| \leq K \cdot e^{t \cdot (s(A) + \varepsilon)},$$

где $K = C \cdot e^{\Delta t \cdot |s(A)|} = e^{\Delta t \cdot (\|A\| + |s(A)|)} > 0$. Из этого следует, что $\forall \varepsilon > 0$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-t \cdot s(A)} \cdot \|T(t)\| \geq K^{-1} > 0,$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-t \cdot (s(A) + \varepsilon)} \cdot \|T(t)\| \leq \lim_{t \rightarrow +\infty} K \cdot e^{-t \cdot \varepsilon/2} = 0$$

Отсюда по определению точной верхней грани получаем доказываемое утверждение. □

Следствие 2.13 позволяет по спектру линейного оператора A оценить асимптотику $\|A^n\|$, а лемма 2.14 — $\|\exp(t \cdot A)\|$.

Вернёмся к проверочному уравнению Далквиста (2.4). Нас интересуют равномерные оценки на норму численного решения, получаемого заданным

методом при заданном постоянном шаге интегрирования. Для этого введём следующее определение и утверждение:

Определение 2.15. Множество $\mathbf{R} = \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| < 1\}$ называется областью абсолютной устойчивости численного метода, обладающего функцией устойчивости $R(z)$. Множество $\overline{\mathbf{R}} = \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| \leq 1\}$ — замыкание области абсолютной устойчивости.¹

Утверждение 2.16. Пусть численное решение уравнения (2.4) ищется интегрированием с постоянным шагом Δt при помощи метода, обладающего функцией устойчивости $R(z)$ и соответствующей областью абсолютной устойчивости $\mathbf{R}$. Пусть также $R(z)$ регулярна в области $U \supset \Delta t \cdot \sigma(F_0)$. Тогда $\mathbf{x}^n = (R(\Delta t \cdot F_0))^n \cdot \mathbf{x}_0$, и

$$\begin{aligned} \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbf{R} & \iff \| (R(\Delta t \cdot F_0))^n \| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \\ \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C} \setminus \overline{\mathbf{R}} & \implies \| (R(\Delta t \cdot F_0))^n \| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty \end{aligned}$$

Доказательство. В силу (2.5) имеем первое утверждение: $\mathbf{x}^n = (R(\Delta t \cdot F_0))^n \cdot \mathbf{x}_0$. Далее заметим, что по теореме 2.11

$$\sigma(R(\Delta t \cdot F_0)) = R(\Delta t \cdot \sigma(F_0))$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbf{R} & \iff r(R(\Delta t \cdot F_0)) < 1 \\ \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C} \setminus \overline{\mathbf{R}} & \iff r(R(\Delta t \cdot F_0)) > 1 \end{aligned}$$

Наконец, применяя следствие 2.13, завершаем доказательство утверждения. □

¹Здесь неявно предполагается непрерывность $R(z)$. Можно обойтись без этого условия, однако тогда некорректно называть $\overline{\mathbf{R}}$ замыканием $\mathbf{R}$.

В теории линейной устойчивости важная роль отводится *A-устойчивости* — свойству численного решения проверочного уравнения Далквиста асимптотически не возрастать по норме, если асимптотически не возрастает норма истинного решения. Если к тому же при увеличении шага интегрирования норма численного решения на следующей итерации (или, быть может, через некоторое заранее известное число итераций) также стремится к нулю, то говорят об *L-устойчивости*. Дадим формальное определение.

Определение 2.17. Численный метод называется *A-устойчивым* в случае, если $\mathbb{C}^- \triangleq \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re} z < 0\} \subseteq \mathbf{R}$.

Определение 2.18. Численный метод называется *L-устойчивым* в случае, если он *A-устойчив* и выполнено $\lim_{\operatorname{Re} z \rightarrow -\infty} R(z) = 0$.

Утверждение 2.19. Пусть $R(z)$ регулярна в $\mathbb{C}^-$. Соответствующий численный метод *A-устойчив* тогда и только тогда, когда $\forall F_0$ выполнено

$$\|\exp(t \cdot F_0)\| \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0 \quad \implies \quad \forall \Delta t > 0 \quad \|(R(\Delta t \cdot F_0))^n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

Доказательство. В силу леммы 2.14 импликацию из утверждения можно переписать в виде

$$\sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C}^- \quad \implies \quad \forall \Delta t > 0 \quad \|(R(\Delta t \cdot F_0))^n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

Если также воспользоваться 2.16, получаем

$$\sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C}^- \quad \implies \quad \forall \Delta t > 0 \quad \Delta t \cdot \sigma(F_0) \subseteq \mathbf{R},$$

что при произвольном F_0 равносильно $\mathbb{C}^- \subseteq \mathbf{R}$. Это даёт определение 2.17. □

Утверждение 2.20. Пусть $R(z)$ регулярна в $\mathbb{C}^-$. Если соответствующий

численный метод L -устойчив, то $\forall F_0$ выполнено

$$\|\exp(t \cdot F_0)\| \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0 \quad \Rightarrow \quad r(R(\Delta t \cdot F_0)) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow +\infty} 0$$

Доказательство. Аналогично доказательству утверждения 2.19 перепишем импликацию в виде

$$\sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C}^- \quad \Rightarrow \quad r(R(\Delta t \cdot F_0)) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow +\infty} 0$$

В силу теоремы 2.11 это эквивалентно

$$\sigma(F_0) \subseteq \mathbb{C}^- \quad \Rightarrow \quad \sup\{|\lambda| \mid \lambda \in R(\Delta t \cdot \sigma(F_0))\} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow +\infty} 0,$$

что при произвольном F_0 равносильно $\forall z \in \mathbb{C}^- \quad |R(\Delta t \cdot z)| \xrightarrow{\Delta t \rightarrow +\infty} 0$. Это верно для L -устойчивых методов по определению 2.18. $\square$

Стоит отметить, что утверждение 2.20, в отличие от 2.19, сформулировано в форме признака, а не критерия. Также в нём получено лишь утверждение о пределе спектрального радиуса, а не нормы. На деле это означает, что получаемая для L -устойчивого метода матрица перехода с увеличением размера шага становится «почти нильпотентной». Если F_0 диагонализуемая, то из стремления к нулю спектрального радиуса матрицы перехода будет автоматически следовать и стремление к нулю её нормы.

На рисунках 2.1, 2.2 проиллюстрировано поведение явного метода Эйлера (не A -устойчивый), метода трапеций (A -устойчивый, но не L -устойчивый) и неявного метода Эйлера (L -устойчивый) при разных значениях $\Delta t \cdot F_0$ в одномерной задаче Далквиста (на втором графике явный метод Эйлера расходится).

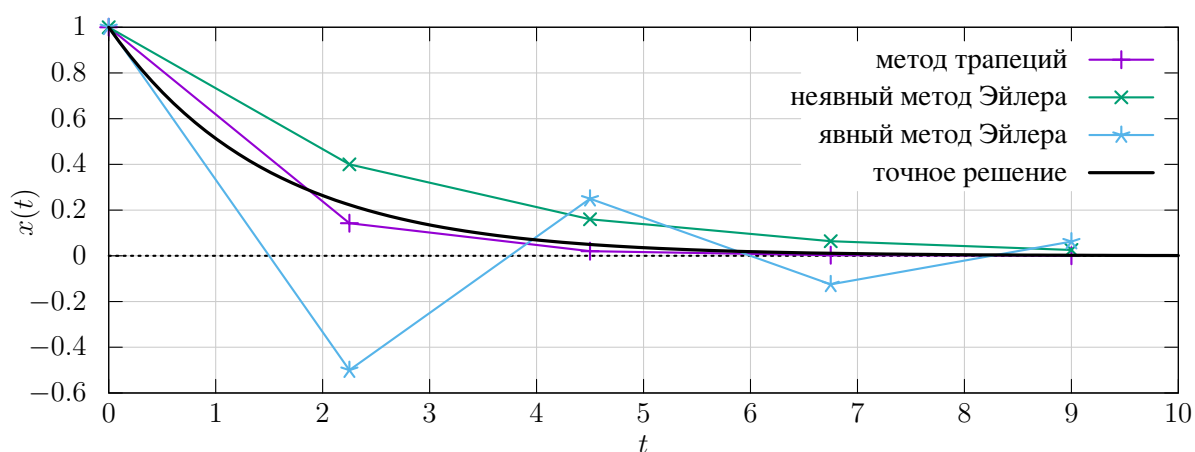


Рисунок 2.1 – Поведение простейших численных методов при решении одномерного уравнения Далквиста ($\Delta t \cdot F_0 = -1.5$).

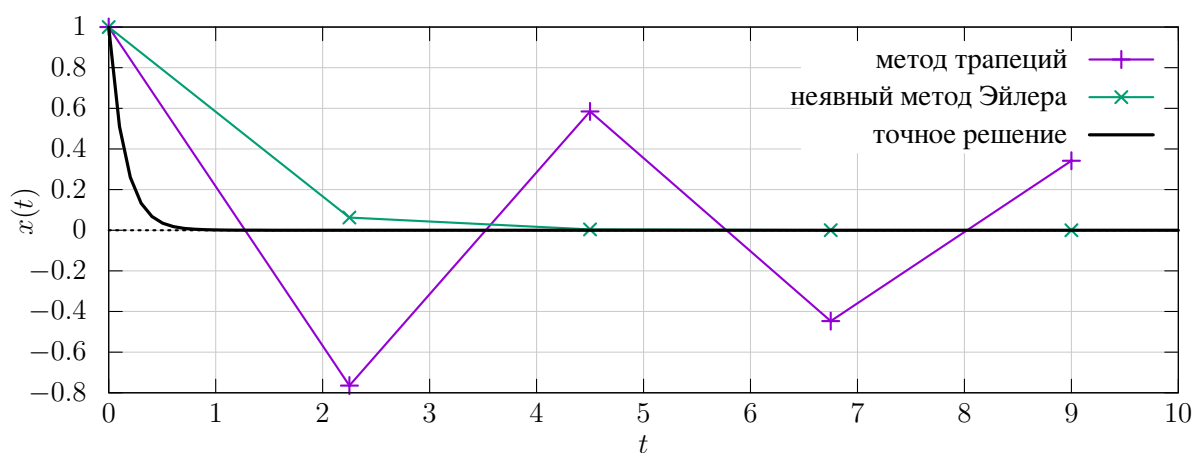


Рисунок 2.2 – Поведение простейших численных методов при решении одномерного уравнения Далквиста ($\Delta t \cdot F_0 = -15$).

2.2.2 Неасимптотический анализ

В предыдущем разделе были приведены основные результаты асимптотической линейной теории устойчивости. Все они в значительной степени опираются на спектральный анализ. С одной стороны, это облегчает исследование свойств численных методов, так как теорема об отображении спектра позволяет определить асимптотические свойства матрицы перехода по функции устойчивости метода. С другой стороны, спектральный анализ не позволяет получить оценки, справедливые в течение всего рассматриваемого времени, включая начальный этап эволюции линейной системы.

Для вывода более строгих в указанном смысле оценок вводится *лога-*

рифмическая норма:

Определение 2.21. Пусть A — линейный ограниченный оператор, действующий в банаховом пространстве $\mathcal{B}$ над $\mathbb{C}$. Число

$$\mu[A] = \lim_{h \rightarrow +0} \frac{\|I + h \cdot A\| - 1}{h}$$

называется логарифмической нормой оператора A .

Далее приведём без доказательства несколько утверждений, связывающих логарифмическую норму с теорией линейной устойчивости. Все утверждения взяты из работ [35; 60].

Утверждение 2.22. Пусть A, B — линейные операторы, действующие в конечномерном банаховом пространстве $\mathcal{B}$ над $\mathbb{C}$. Тогда верно следующее:

1. $\mu[A]$ определена;
2. $\mu[A] \leq \|A\|$;
3. $\mu[\gamma \cdot A] = \gamma \cdot \mu[A]$ для любого $\gamma > 0$;
4. $\mu[A + z \cdot I] = \mu[A] + \operatorname{Re} z$;
5. $\mu[A + B] \leq \mu[A] + \mu[B]$;
6. $s(A) \leq \mu[A]$;
7. $\|\exp(t \cdot A)\| \leq e^{t \cdot \mu[A]}$ для любого $t \geq 0$.

Пункт 6 связывает логарифмическую норму со спектральными свойствами A . Пункт 7 даёт справедливую в течение всего неотрицательного времени оценку на оператор эволюции, соответствующий оператору A ; однако в силу пункта 6, а также леммы 2.14, данная оценка может не являться асимптотически оптимальной.

Для иллюстрации различий между $s(A)$, $\mu[A]$ и $\|\exp(t \cdot A)\|$ можно рас-

смотреть пространство $\mathbb{R}^2$ с l_1 -нормой и оператор

$$A = \begin{pmatrix} -1 & \alpha \\ 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad \exp(t \cdot A) = \begin{pmatrix} e^{-t} & \alpha e^{-t}(1 - e^{-t}) \\ 0 & e^{-2t} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Нетрудно получить

$$s(A) = -1, \quad \mu[A] = \begin{cases} -1, & |\alpha| < 1 \\ |\alpha| - 2, & |\alpha| \geq 1 \end{cases},$$

$$\|\exp(t \cdot A)\|_1 = \begin{cases} e^{-1}, & |\alpha| < 1 \\ |\alpha|e^{-t}(1 - e^{-t}) + e^{-2t}, & |\alpha| \geq 1 \end{cases}$$

Видно, что при $|\alpha| > 1$ оценка $|\alpha| \exp(t \cdot s(A))$ асимптотически оптимальна, но в окрестности нуля отличается от $\|\exp(t \cdot A)\|$ в $|\alpha|$ раз; с другой стороны, оценка $\exp(t \cdot \mu[A])$ точна в нуле, но отличается от $\|\exp(t \cdot A)\|$ асимптотически. Разница становится еще более существенной в случае Жордановой клетки:

$$A = \begin{pmatrix} -1 & \alpha \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \exp(t \cdot A) = \begin{pmatrix} e^{-t} & \alpha t e^{-t} \\ 0 & e^{-t} \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

$$s(A) = -1, \quad \mu[A] = |\alpha| - 1, \quad \|\exp(t \cdot A)\|_1 = e^{-t}(1 + |\alpha|t)$$

Здесь при $\alpha \neq 0$ выражение $C \cdot \exp(t \cdot s(A))$ не является оценкой сверху на $\|\exp(t \cdot A)\|$ для любого $t \geq 0$ ни при каких $C \in \mathbb{R}$. Также в обоих случаях $\exp(t \cdot \mu[A])$ может монотонно возрастать при определённых значениях α , хотя норма оператора эволюции всегда стремится к нулю при $t \rightarrow +\infty$. Графики оценок для обоих примеров при $\alpha = 3/2$ приведены на рис 2.3.

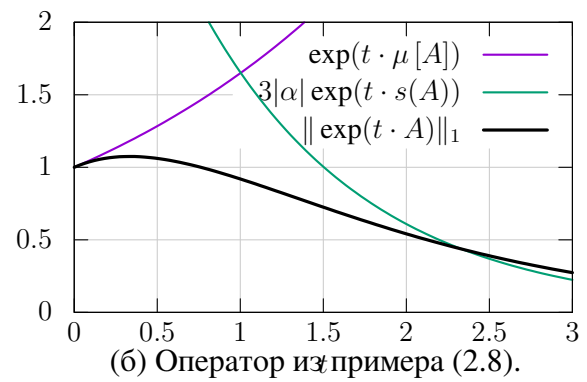
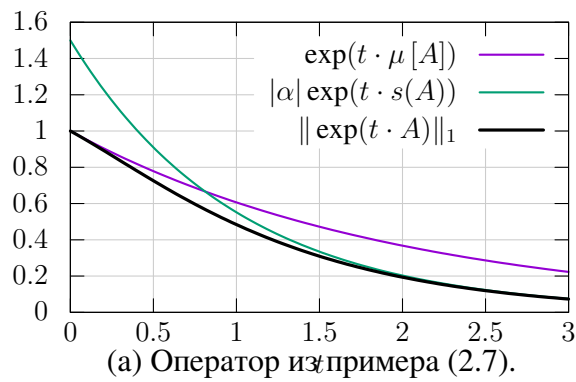


Рисунок 2.3 – Графики l_1 -норм операторов эволюции из уравнений (2.7) и (2.8), а также соответствующих оценок; $\alpha = 3/2$.

2.3 Нелинейная теория устойчивости

Линейная теория устойчивости является удобным инструментом для получения достаточных признаков устойчивости численного решения. Однако используемое при анализе линейное приближение правой части системы имеет вполне определённые границы применимости:

1. Линейный анализ устойчивости некорректно применять при наличии возмущений, величина или характер которых ставит под сомнение точность линеаризации системы.

2. Линейный анализ устойчивости некорректно применять, если характерное время линейной реакции на малые возмущения не является пренебрежимо малым в сравнении с характерными масштабами времени, на которых меняется матрица Якоби правой части системы.

В главе 7 работы [35] даны примеры систем, применение линейного анализа к которым даёт некорректные результаты (по крайней мере, если ограничиваться лишь спектральными признаками и не использовать оценки, приведённые в разделе 2.2.2).

Результаты линейной теории устойчивости, однако, можно обобщить на произвольные системы, в том числе и на не поддающиеся линеаризации. Для этого следует вспомнить, что уравнение Далквиста (2.4) используется для

описания реакции системы на малые возмущения. Убывание решений уравнения Далквиста соответствует сближению возмущённого и невозмущенного решения исходного уравнения с течением времени — *сжиманию*. Сжатие можно обобщить на решения произвольной системы, а не только линеаризованной:

Определение 2.23. Пусть $\mathbf{x}(t)$ и $\mathbf{y}(t)$ — решения системы $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$. Данные решения называются сжимающимися на отрезке $[a; b]$ в случае

$$\forall t_1, t_2 : a \leq t_1 \leq t_2 \leq b \quad \|\mathbf{x}(t_2) - \mathbf{y}(t_2)\| \leq \|\mathbf{x}(t_1) - \mathbf{y}(t_1)\|$$

Аналогичное определение можно ввести и для численных решений (и, вообще говоря, для любых последовательностей):

Определение 2.24. Пусть $\{\mathbf{x}_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ и $\{\mathbf{y}_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ — последовательности элементов некоторого линейного нормированного пространства. Данные последовательности называются сжимающимися на отрезке $[a; b]$ в случае

$$\forall n_1, n_2 : a \leq n_1 \leq n_2 \leq b \quad \|\mathbf{x}_{n_2} - \mathbf{y}_{n_2}\| \leq \|\mathbf{x}_{n_1} - \mathbf{y}_{n_1}\|$$

Сжатие решений говорит об устойчивости системы к возмущениям. Сжатие численных решений — об устойчивости численного метода. Для систем вида $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$ известно достаточное условие сжимаемости точных решений [7; 8].

Определение 2.25. Пусть $\mathcal{H}$ — гильбертово пространство над $\mathbb{C}$. Функция $f(t, \mathbf{x}) = f : \mathbb{R} \times D \rightarrow \mathcal{H}$ (где $D \subseteq \mathcal{H}$ — выпуклая область) и система $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$ называются односторонне липшицевыми на отрезке $[a; b]$ в случае

$$\exists \nu(t) : \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D, \forall t \in [a, b] \quad \operatorname{Re} \langle f(t, \mathbf{x}) - f(t, \mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \leq \nu(t) \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$$

Определение 2.26. Пусть в определении 2.25 $\nu(t) \leq 0$. Тогда функция $f(t, \mathbf{x})$ и система $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$ называются диссипативными.

Утверждение 2.27 (достаточный признак сжимаемости). Пусть система $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$ диссипативна на $[a; b]$. Тогда все её решения являются сжимающимися на $[a; b]$.

Замечание 2.28. Линейная функция $f(t, \mathbf{x}) = A(t) \cdot \mathbf{x} + f_0(t)$ односторонне липшицева на всей области определения $A(t)$ с наименьшим возможным коэффициентом $\nu(t) = \mu[A(t)]$.

Замечание 2.28 позволяет связать линейную теорию устойчивости с нелинейной (см. раздел 2.2.2). Его естественным продолжением является следующая теорема:

Теорема 2.29 (Далквист, 1959). Пусть $\mathcal{H}$ — гильбертово пространство над $\mathbb{C}$. Пусть $f(t, \mathbf{x}) = f : \mathbb{R} \times D \rightarrow \mathcal{H}$, где $D \subseteq \mathcal{H}$ — выпуклая область. Пусть также существуют $a, b \in \mathbb{R}$ и $\nu(t)$ — такая кусочно-непрерывная функция, что

$$\forall t \in [a; b], \forall \mathbf{x} \in D \quad \mu \left[\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}(t, \mathbf{x}) \right] \leq \nu(t)$$

Тогда, если $\mathbf{x}(t)$ и $\mathbf{y}(t)$ — два решения системы $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$, то для любых $t_1, t_2 \in \mathbb{R} : a \leq t_1 \leq t_2 \leq b$ выполнено

$$\|\mathbf{x}(t_2) - \mathbf{y}(t_2)\| \leq \exp \left(\int_{t_1}^{t_2} \nu(s) ds \right) \|\mathbf{x}(t_1) - \mathbf{y}(t_1)\|$$

Наконец, приведём достаточное условие сжимаемости численных решений, позволяющее распространить анализ устойчивости численных методов на нелинейные системы.

Теорема 2.30 (Далквист, 1978). Пусть рассматривается конечномерное гильбертово пространство над $\mathbb{R}$. Если численный метод A -устойчивый, то су-

существует норма (называемая G-нормой), в которой любые два численных решения диссипативной на $[a; b]$ системы будут сжимающимися на $[a; b]$.

Сразу отметим, что известны и другие признаки сжимаемости численных решений, среди которых есть и не требующие введение другой нормы. Однако для общего анализа их включение в данную работу не является необходимым.

Приведённые теоремы позволяет обосновать линейный анализ устойчивости даже для нелинейных систем. Стоит, однако, отметить, что это возможно исключительно благодаря ослаблению утверждений до формы достаточных условий, а также благодаря использованию логарифмической нормы вместо спектральной границы. Напомним, что первая даёт справедливую в течение всего времени оценку на норму оператора эволюции линейной системы, а вторая — только асимптотическую, пусть и, зачастую, более строгую.

2.4 Жесткие системы дифференциальных уравнений

На практике часто встречаются задачи, численное решение которых возможно только с малым шагом интегрирования, либо с использованием сложных и дорогих численных методов. Такие задачи традиционно называются *жесткими*. Как указано в [35; 75], существует несколько определений жесткости, каждое из которых обладает своими достоинствами и недостатками. Приведём здесь одно из них:

Определение 2.31. Система вида $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$ называется жесткой в том случае, если для получения корректного (то есть в заданной степени близкого к точному решению) численного решения необходимо использовать шаг интегрирования, много меньший характерных масштабов времени, на которых меняется точное решение.

Данное определение слишком общее и не отвечает на вопросы о природе ограничений на шаг интегрирования. На основе всего вышеизложенного

анализа мы дадим более узкое, но в некоторой степени и более информативное определение жёсткости.

2.4.1 Классическая жёсткость

Как видно из приведённого обзора классических результатов теории устойчивости, спектр матрицы Якоби правой части $F \triangleq \frac{\partial f}{\partial x}$ может задавать определённые ограничения на шаг интегрирования. Действительно, если $\mu[F] < 0$, но численный метод не А-устойчив, полученное с его помощью решение может вести себя некорректно при некоторых F и Δt . В частности, если $\Delta t \cdot \sigma(F) \not\subseteq \mathbf{R}$, то небольшие возмущения численного решения могут неограниченно усиляться, в то время как возмущения точного решения будут, наоборот, затухать. Зачастую область устойчивости не А-устойчивых методов ограничена (в частности, это верно для всех явных линейных численных методов) или содержит лишь некоторый подсектор $\mathbb{C}^-$, поэтому ограничение на шаг интегрирования оказывается ограничением сверху. Таким образом, спектральные свойства F обуславливают максимально допустимый шаг численного интегрирования.

Использование А-устойчивых методов позволяет избежать указанных проблем. Однако А-устойчивость не гарантирует, что возмущения численного решения будут затухать с той же скоростью, что и возмущения точного; возможен даже случай $\lim_{\operatorname{Re} z \rightarrow -\infty} |R(z)| = 1$, соответствующий слабо затухающим осцилляциям численного решения там, где точное решение обладает сильным эффектом демпфирования (см. рисунок 2.2). Если требуется адекватно воспроизводить сильное затухание за конечное число шагов при увеличении Δt , следует пользоваться L-устойчивыми методами.

Поскольку любой линейный А-устойчивый метод является неявным [35], платой за повышенную устойчивость численного решения является необходимость на каждом шаге интегрирования решать (в общем случае нелинейное) уравнение на корни невязки. Ситуацию осложняет следующая теорема,

требующая в случае одностадийных схем делать выбор между устойчивостью, высоким порядком аппроксимации и линейностью схемы:

Теорема 2.32 (второй барьер Далквиста). *Не существует A -устойчивых линейных многошаговых одностадийных схем с порядком аппроксимации выше второго.*

Многостадийные неявные методы требуют решения уже нескольких алгебраических уравнений на каждом шаге интегрирования, что еще более увеличивает их вычислительную сложность.

Приведённые выше рассуждения показывают, что определённые системы дифференциальных уравнений могут обладать свойствами, вынуждающими либо использовать малый шаг интегрирования, либо задействовать дорогостоящие неявные численные методы, устойчивые в смысле определений 2.17 и 2.18. Это позволяет конкретизировать определение жёсткости 2.31, используя классические результаты теории устойчивости.

Определение 2.33. *Обозначим характерное время изменения $F = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}(t))$ как $\tau_{\text{нелин}}$, а $1/r(F)$ — характерное время реакции линеаризованной системы на небольшие возмущения — как $\tau_{\text{лин}}$.*

Рассмотрим случай $\tau_{\text{лин}} \ll \tau_{\text{нелин}}$, позволяющий применять линейный анализ устойчивости.

Определение 2.34. *Система вида $\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x})$ называется линейно жёсткой в том случае, если характерное время реакции линеаризованной системы на небольшие возмущения $\tau_{\text{лин}}$ много меньше характерных масштабов времени, на которых ищется решение.*

Зачастую численное решение ищется на интервалах, сопоставимых с характерными временными масштабами наиболее медленно протекающих процессов, описываемых системой (это действительно так, если в численном решении требуется полноценно отобразить всю динамику системы). Также для

численных методов с ограниченной областью устойчивости условие $\Delta t \cdot \sigma(F) \subseteq \mathbf{R}$ влечет $\Delta t \sim \tau_{\text{лин}}$. Тогда определение 2.34 оказывается частным случаем определения 2.31, причём необходимость выбора малого шага оказывается обусловленной «жёстким» линейным поведением системы в окрестности истинных решений.

Стоит также отметить, что в случае линейных или слабо нелинейных (то есть линеаризацию которых можно долго считать достаточно точной) систем характерные масштабы времени наиболее медленно протекающих процессов задаются наименьшими по модулю элементами спектра матрицы F . Тогда для линейно жёстких систем спектр F распадается на две части: *ведущую* и *паразитическую*.

Определение 2.35. Будем называть спектр оператора A распадающимся на ведущую и паразитическую части, если существует расщепление $\sigma(A) = \sigma_d(A) \sqcup \sigma_p(A)$ такое, что

$$r_d(A) \triangleq \sup\{|\lambda| \mid \lambda \in \sigma_d(A)\} \ll \inf\{|\lambda| \mid \lambda \in \sigma_p(A)\} \triangleq b_p(A)$$

Более того, в случае седловых задач доля паразитического спектра может иметь положительную действительную часть. Это может вызывать «взрывное» поведение даже A -устойчивых методов, ведь в таком случае попадание $\Delta t \cdot \sigma(F)$ в область устойчивости не гарантируется. В задачах, где известно, что такое поведение точного решения нефизично и отсутствует в виду выбора правильных начальных условий, данное свойство численного решения является нежелательным.

Нелинейный анализ устойчивости позволяет обобщить определение 2.34 на случай, когда $\tau_{\text{нелин}} \not\ll \tau_{\text{лин}}$. Для этого требуется рассмотреть характерное время затухания возмущений в диссипативных системах и сравнить его с характерным временем эволюции невозмущённого решения.

Определение 2.36. Обозначим $1/\nu(t)$ — характерное время релаксации возмущений в диссипативной системе $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$ — как $\tau_{\text{дисс}}$.

Определение 2.37. Диссипативная система вида $\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x})$ называется (классически) жёсткой в том случае, если характерное время реакции системы на небольшие возмущения $\tau_{\text{дисс}}$ много меньше характерных масштабов времени, на которых ищется решение.

Стоит отметить, что определения 2.34 и 2.37 фактически связывают жёсткость с сильно диссипативным характером системы, вынуждающим либо уменьшать шаг интегрирования, чтобы последний несколько раз укладывался в характерное время диссипации, либо использовать неявные устойчивые методы, которые численно воспроизводят эффект диссипации даже в случае больших шагов. Для недиссипативных систем формальное определение жёсткости ввести труднее, так как нет возможности достоверно отделить неустойчивое поведение численного метода от неустойчивого поведения исходной системы.

2.4.2 Экспоненциальные интеграторы

Линейный и нелинейный анализ устойчивости достаточно глубоко проработан. Как следствие, в литературе предложено множество численных методов, успешно справляющихся с эффектами классической жёсткости [7; 22; 23; 35; 40; 75]. В основном это различные многошаговые или многостадийные линейные схемы, обладающие теми или иными свойствами линейной устойчивости: неявные методы Рунге-Кутты, методы Гира, формулы дифференцирования назад и прочее. Обладая достаточной устойчивостью, они одновременно могут иметь высокий порядок аппроксимации. Тем не менее, неявный характер данных методов может нивелировать все преимущества увеличенного шага интегрирования.

В настоящем разделе предлагается отойти от стандартных линейных

схем с постоянными коэффициентами и обратить внимание на численные методы, утилизирующие информацию о матрице Якоби правой части дифференциального уравнения. Понимание локального поведения системы может позволить частично или полностью устранить эффекты линейной жёсткости. Более того, так как при решении жёстких систем обычно используются неявные методы, и возникающие при этом алгебраические уравнения зачастую решаются методом Ньютона, матрица Якоби правой части вычисляется в любом случае. Поэтому её использование для модификации численной схемы не приносит дополнительной вычислительной сложности (кроме, быть может, последующих операций с матрицей).

Методы, использующие матрицу Якоби правой части интегрируемой системы, называются *адаптивными*. Среди них можно перечислить методы Розенброка, Обрешкова, а также *экспоненциальные интеграторы*. В данной работе основное внимание будет уделено именно последним.

Определение 2.38. *Экспоненциальным интегратором называется численный метод, дающий применительно к линейной задаче (2.2) точное решение.*

Замечание 2.39. *Любой экспоненциальный интегратор обладает функцией устойчивости $R(z) = e^z$. Он также является L -устойчивым.*

Из определения и замечания видно, что экспоненциальный интегратор точно интегрирует линейную часть системы. Это позволяет исключить влияние линейной жёсткости на решение; при этом численная схема вполне может быть полностью явной, позволяя избавиться от необходимости решать алгебраические уравнения на каждом шаге интегрирования. Преимуществом экспоненциальных интеграторов также является полное отсутствие численной (то есть обусловленной исключительно методом, а не задачей) диссипации в линейных системах. В некоторых задачах, близких к линейным, это каче-

ственно отличает данные методы от стандартных А-устойчивых схем с большими областями устойчивости (пример можно увидеть в разделе 4.1).

Некоторые авторы также расширяют определение экспоненциальных интеграторов на все методы, использующие экспоненту матрицы Якоби правой части системы. Обзор существующих экспоненциальных интеграторов можно найти, например, в работах [30; 31; 43]. Мы же остановимся только на простейших из них, необходимых для дальнейшего анализа.

Рассмотрим явный и неявный экспоненциальные методы Эйлера:

$$\text{Явный:} \quad \mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n = \varphi_1(\Delta t \cdot F) \cdot \Delta t f(\mathbf{x}^n), \quad (2.9)$$

$$\text{Неявный:} \quad \mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n = -\varphi_1(-\Delta t \cdot F) \cdot \Delta t f(\mathbf{x}^{n+1}), \quad (2.10)$$

где $\varphi_1(z)$ определена в замечании 2.8, а $F = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}$ — матрица Якоби правой части системы. При этом точка, в которой вычисляются производные, может варьироваться. Для линейных систем это не важно, но для нелинейных является определённой степенью свободы, заложенной в методе. На самом деле, возможно даже использование приближённого значения матрицы, но при этом экспоненциальный интегратор не будет давать точного решения на тестовой задаче Далквиста.

Несложно проверить, что при рассмотрении линеаризованной задачи $f(\mathbf{x}) = f_0 + F_0 \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ оба метода дают точное решение (2.3). Следует отметить, что коэффициент при $f(\cdot)$ в обоих методах может расти экспоненциально с увеличением Δt . В таком случае с увеличением шага численное решение может быстро выйти за пределы окрестности, в которой применима линеаризация правой части. Это следует отнести к недостаткам данных методов, так как такое поведение потенциально может являться источником неустойчивости в случае сильной нелинейности правой части. В качестве одного из результатов работы также будет приведён двухточечный экспоненциальный интегратор, построенный по аналогии с (2.9) и (2.10), но лишённый

упомянутого недостатка.

2.4.3 Нелинейная жёсткость

В предыдущих разделах было показано, что с классической жёсткостью успешно справляются устойчивые неявные методы, а также экспоненциальные интеграторы, точно интегрирующие жёсткую часть системы в линейном приближении. Практика, однако, показывает, что при решении систем с сильно нелинейной в том или ином смысле правой частью могут возникать различные нежелательные эффекты неустойчивости, даже если используются А-устойчивые, L-устойчивые или адаптивные методы. Данные эффекты также вынуждают ограничивать величину шага. Таким образом, система проявляет свойства, которые невозможно объяснить в рамках классического понимания жёсткости.

Для примера рассмотрим задачу Коши

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \cos\left(\frac{\pi}{2} \cdot x\right) \\ x(0) = x_0 = 0 \end{cases} \quad F(x) = \frac{\partial f}{\partial x}(x) = -\frac{\pi}{2} \sin\left(\frac{\pi}{2} \cdot x\right), \quad (2.11)$$

имеющую точное решение

$$x(t) = \frac{2}{\pi} \arcsin\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2}t\right)\right)$$

Рассматриваемая система является автономной и имеет множество положений равновесия $x = 2k + 1$, $k \in \mathbb{Z}$. Из них устойчивые только $x = 4k + 1$, $k \in \mathbb{Z}$. В окрестности каждого из положений равновесия система достаточно хорошо линеаризуема (с кубической точностью). Более того, в любой точке функция $f(x)$ отличается от своей линеаризации в ближайшем положении равновесия не более, чем на $|\cos(\pi/2) - \pi/2| \approx 1.58 \approx 1.58 \cdot \max |f(x)|$. Наконец, в любой момент времени точное решение находится в промежут-

ке $[0; 1)$, с экспоненциальной скоростью стремясь к положению равновесия $x = 1$. Для $x \in [0; 1)$ имеем $-\pi/2 < F(x) \leq 0$, то есть $F(x) \in \mathbb{C}^-$. Исходя из этого можно выдвинуть предположение, что численное решение данной системы при помощи А-устойчивого метода не вызовет никаких проблем, даже если взять шаг интегрирования, сравнимый с $\min(1/|F|) = 2/\pi \sim \tau_{\text{лин}}$.

Результаты интегрирования рассматриваемой системы различными численными методами приведены на рисунке 2.4. Использовался шаг по времени $\Delta t = 2$. В случае неявных схем возникающие при интегрировании нелинейные уравнения решались методом Ньютона с начальным приближением в текущей точке. Для сравнения также приведён график точного решения.

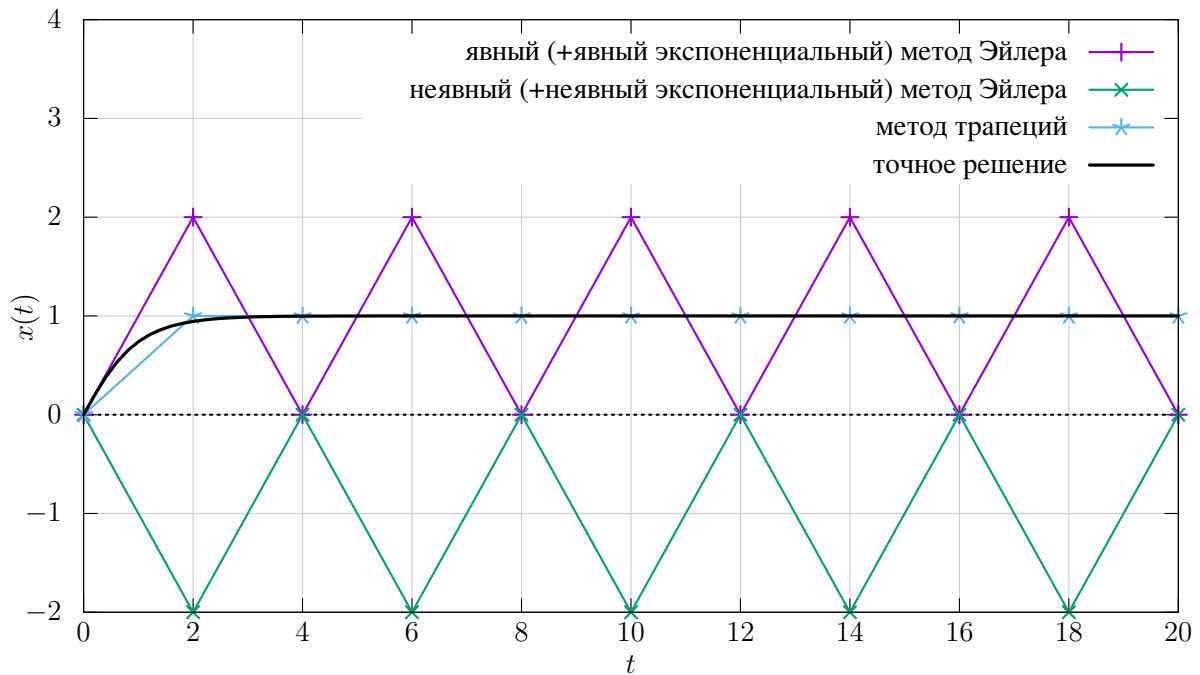


Рисунок 2.4 – Поведение простейших экспоненциальных интеграторов при решении уравнения (2.11)

Как можно видеть, при использовании явного метода Эйлера наблюдаются незатухающие осцилляции численного решения вокруг устойчивого положения равновесия $x = 1$, что говорит о необходимости использования устойчивых методов. Однако L-устойчивый неявный метод Эйлера даёт совершенно некорректное решение, уходящее в противоположную от аналитического решения сторону и осциллирующее вокруг положения неустойчивого

равновесия $x = -1$. Использование экспоненциальных интеграторов из раздела 2.4.2 даёт идентичные результаты, так как в точках $x = 2k$, $k \in \mathbb{Z}$ производная правой части вырождается. Это означает, что наблюдаемое явление не объясняется только классической жёсткостью, эффекты которой должны устраняться неявным методом Эйлера и экспоненциальными интеграторами. С другой стороны, использование метода трапеций позволяет получить корректное и довольно точное численное решение.

Данный пример показывает, что явление жёсткости не ограничивается только классическими определениями 2.34 и 2.37, но также связано с нелинейностью правой части, «транслируемой» неявными методами на дискретное уравнение. Чтобы лучше проиллюстрировать это, выпишем невязку и соответствующую матрицу Якоби тета-метода, частными случаями которого являются рассмотренные явный и неявный методы Эйлера и метод трапеций:

$$\mathcal{R}(t^{n+1}, \mathbf{x}^{n+1}) = \mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n - \Delta t \cdot [\theta f(t^{n+1}, \mathbf{x}^{n+1}) + (1 - \theta)f(t^n, \mathbf{x}^n)] \quad (2.12)$$

$$\mathcal{J}(t^{n+1}, \mathbf{x}^{n+1}) = \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \mathbf{x}}(t^{n+1}, \mathbf{x}^{n+1}) = \mathbf{I} - \Delta t \cdot \theta F(t^{n+1}, \mathbf{x}^{n+1})$$

В нашем случае $f(x)$ и $F(x)$ имеют целое семейство корней. Поэтому при достаточно большом Δt и $\theta \neq 0$ несколько корней также имеет $\mathcal{R}(x)$, а $\mathcal{J}(x)$ перестаёт быть отделимым от нуля. На рисунке 2.5 показан график $\mathcal{R}(x)$ для $\Delta t = 2$ и $\theta \in \{0, 1/2, 1\}$; также указано положение точного решения в момент времени $t = \Delta t$.

Видно, что $\theta = 0$ приводит к промаху мимо положения равновесия (неустойчивое поведение явного метода Эйлера), $\theta = 1$ порождает два дополнительных паразитических корня (неявный метод Эйлера «транслирует» нелинейность $f(x)$ на дискретизованную задачу), а $\theta = 1/2$ позволяет добиться хорошего баланса между устойчивостью метода и линейностью уравнения $\mathcal{R}(x) = 0$.

Теорема Канторовича [34; 47] даёт достаточные условия сходимости

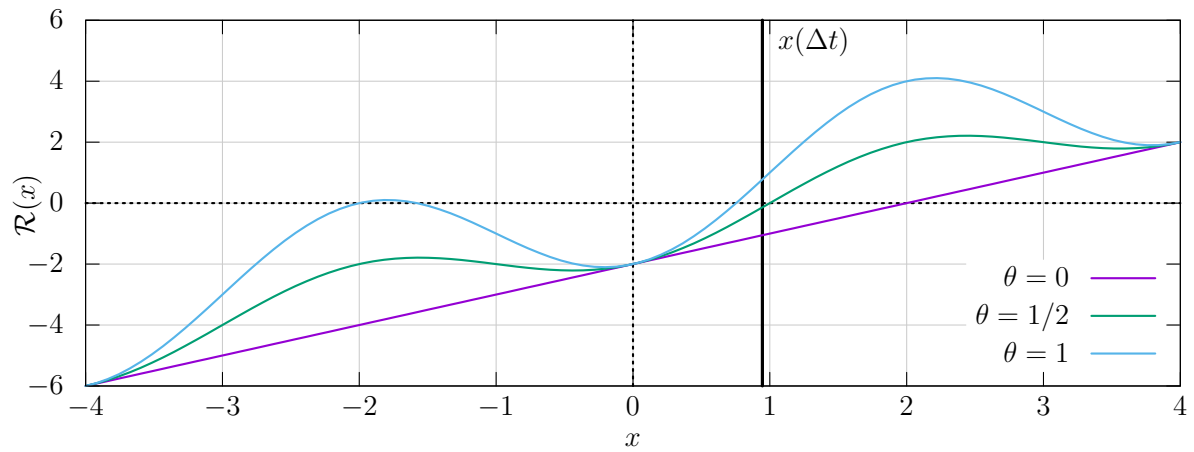


Рисунок 2.5 – График невязки (2.12) при численном интегрировании системы (2.11) с шагом $\Delta t = 2$.

метода Ньютона к корню уравнения. Одним из условий как раз является отделимость матрицы Якоби от нуля. Таким образом, из-за нелинейности правой части и большого шага интегрирования, с одной стороны, теряются достаточные условия сходимости метода Ньютона, и, с другой стороны, появляются некорректные корни невязки. Приведённый пример показывает, что это может оказаться достаточным для того, чтобы метод выдавал некорректные решения. Как показано в [35], более устойчивый метод простой итерации для поиска корней также может расходиться в случае жёстких систем и большого шага интегрирования. Можно предположить, что это универсальное свойство некоторых систем, заставляющее делать выбор между величиной шага и сложностью алгоритма поиска корней нелинейной невязки.

Таким образом, мы приходим к новому определению жёсткости системы, связанному теперь с её нелинейным характером.

Определение 2.40. Система вида $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$ называется нелинейно жёсткой в том случае, если нелинейные свойства правой части существенно влияют на

- допустимую величину шага интегрирования для заданного алгоритма поиска корней невязки выбранной численной схемы;
- допустимую степень невязности используемой численной схемы для

заданного шага интегрирования и алгоритма поиска корней невязки;

- *сложность алгоритма поиска корней невязки для заданной численной схемы и шага интегрирования,*

при которых возникающая на каждом шаге по времени нелинейная система алгебраических уравнений решается корректно.

Иначе говоря, нелинейная жёсткость проявляется в необходимости выбирать между неявностью численной схемы, большим шагом по времени и простотой метода решения нелинейных уравнений.

Таким образом, борьба с нелинейной жёсткостью переводится в плоскость методов оптимизации. Среди способов улучшения сходимости метода Ньютона можно перечислить линейный поиск [6; 68], метод доверительных областей [61] и различного рода ускорения [5; 13; 46]. Линейный поиск минимизирует невязку вдоль выбранного направления путём подбора оптимального шага. Метод доверительных областей изменяют направление шага, используя информацию о производных высшего порядка. Ускоренные методы используют историю шагов при решении задачи оптимизации. Возможна также комбинация упомянутых методов [18]. Квазиньютоновские методы активно используются для решения уравнений, возникающих при интегрировании жёстких систем [4; 12; 44; 55]. Данная группа методов решает задачу оптимизации или поиска корней уравнения, используя аппроксимации производных, а не их точные значения. Особо жёсткие задачи могут потребовать применения крайне медленных и непрактичных алгоритмов полного поиска корней [27]. Все эти методы отличаются необходимым количеством вычислений невязки, якобиана или гессиана в ходе поиска решения.

3 МЕТОД АДАПТАЦИИ ЧИСЛЕННЫХ СХЕМ

В прошлой главе был приведён краткий обзор существующих методов оценки устойчивости динамических систем и численных схем. Введены основные элементы линейного и нелинейного анализа устойчивости. Введено понятие жёсткости системы, разделённое в дальнейшем на классическую и нелинейную жёсткость. Было показано, что с классической жёсткостью эффективно справляются А-устойчивые и L-устойчивые методы, в том числе и экспоненциальные интеграторы, интегрирующие линейную часть системы точно. Наконец, обозначена невозможность решения проблем нелинейной жёсткости в рамках линейной теории устойчивости.

Данная глава полностью посвящена разработке новых методов численного решения дифференциальных уравнений, совмещающих преимущества устойчивых неявных схем и экспоненциальных интеграторов. Первый раздел посвящен общему подходу к построению новых методов численного интегрирования: предлагается адаптивно варьировать коэффициенты существующих разностных схем для достижения новых свойств при сохранении преимуществ исходного численного метода. Во втором разделе демонстрируется применение разработанного подхода к нескольким выбранным задачам малой размерности. Наконец, в третьем разделе предложенный подход применяется для получения нового семейства экспоненциальных интеграторов в случае задач произвольной размерности.

3.1 Общее описание метода

Суть предлагаемого метода заключается в подборе коэффициентов некоторой численной схемы с целью получения более точного (в идеале, совпадающего с аналитическим) численного решения для выбранного класса задач (например, для линейных или хорошо линеаризуемых динамических систем).

Формальное описание метода начнём с рассмотрения семейства динамических систем, задаваемых уравнением $\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x})$, где $f \in \mathcal{F}_{\text{RHS}}$, $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$, и $\mathcal{B}$ — банахово. Предполагаем, что для всех $f \in \mathcal{F}_{\text{RHS}}$ и $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{B}_0(f)$ решение соответствующей задачи Коши на отрезке $[0; T]$ существует и единственно:

$$\forall f \in \mathcal{F}_{\text{RHS}} \quad \exists! \mathbf{x}_f: [0; T] \times \mathcal{B}_0(f) \rightarrow \mathcal{B} : \quad \begin{cases} \frac{\partial \mathbf{x}_f}{\partial t} = f(t, \mathbf{x}_f) \\ \mathbf{x}_f(0; \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0 \end{cases}$$

Далее рассмотрим семейство методов численного интегрирования $\mathcal{F}_{\text{NM}}$.¹ Обозначим за $\{\mathbf{x}_M^n(\mathbf{x}_0)\}_{n=0}^N$ набор численных решений, полученных на фиксированной сетке $\{t_n\}_{n=0}^N$ согласно методу $M \in \mathcal{F}_{\text{NM}}$.

Пусть Φ — функционал качества численного решения (например, l_2 -норма отклонения от точного решения на узлах сетки). Тогда выберем из $\mathcal{F}_{\text{NM}}$ схему, достигающую наименьшего значения функционала для всех допустимых правых частей f и начальных условий $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{B}_0(f)$:

Определение 3.1. Адаптацией семейства численных методов $\mathcal{F}_{\text{NM}}$ к семейству задач Коши $\{\dot{\mathbf{x}} = f(t, \mathbf{x}), \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \mid f \in \mathcal{F}_{\text{RHS}}, \mathbf{x}_0 \in \mathcal{B}_0(f)\}$ на сетке $\{t_n\}_{n=0}^N$ с функционалом качества Φ назовём

$$M^* = \arg \min_{M \in \mathcal{F}_{\text{NM}}} \sup_{f \in \mathcal{F}_{\text{RHS}}} \sup_{\mathbf{x}_0 \in \mathcal{B}_0(f)} \Phi(\{\mathbf{x}_M^n(\mathbf{x}_0)\}_{n=0}^N, \mathbf{x}_f(\cdot; \mathbf{x}_0))$$

Предложенная процедура адаптации расширяет подход, рассмотренный в более ранних работах, где для семейства линейных систем $\dot{\mathbf{x}} = A \cdot \mathbf{x}$, $A \in \mathcal{L}(\mathcal{B})$ производился поиск оптимального значения параметра $\theta \in \mathbb{R}$ тета-схемы как в случае фиксированного A [9; 35; 39], так и в случае $A \in \{\lambda I \mid \lambda \in \mathbb{R}\}$ [33; 38]. Можно также показать, что общая процедура экспоненциальной подгонки, рассматриваемая, например, в [31], является частным случаем адаптации: требование точного воспроизведения полиномиальных и экспо-

¹ На практике семейство обычно задаётся множеством параметров, конкретные значения которых определяет конкретную численную схему (например, таблица Бутчера параметризует методы Рунге-Кутты).

ненциальных решений можно сформулировать в терминах минимизации разницы между численным и точным решением некоторой задачи Коши.

Важно отметить, что адаптацию можно проводить по одной системе, но результат применять к другой. Например, интересующую нас задачу можно аппроксимировать более простой, для которой известно аналитическое решение, и уже по этому решению подобрать оптимальную схему, которая в дальнейшем будет использована для интегрирования исходного уравнения. Более того, адаптацию имеет смысл проводить динамически, на каждом шаге интегрирования, так как аппроксимация исходной системы может сильно меняться с течением времени. Наконец, адаптация может быть использована для нахождения оптимального баланса между устойчивостью численного метода и простотой поиска корней невязки, что должно улучшить поведение численного решения при интегрировании жёстких во всех смыслах систем.

Приведём несколько дополнительных замечаний, подробнее раскрывающих особенности описанного метода:

1. Результат адаптации всё ещё лежит в исходном семействе схем: $M^* \in \mathcal{F}_{\text{NM}}$. Следовательно, грамотный выбор $\mathcal{F}_{\text{NM}}$ гарантирует хорошее поведение M^* на широком классе задач, несмотря на адаптацию к конкретному семейству задач Коши.

2. Частным случаем является подбор численной схемы, дающей точное решение для выбранного множества задач: достаточно в качестве Φ взять норму разности численного решения и проекции истинного решения на сетку. Тогда, если минимум достигается и равен нулю, численные решения, получаемые при помощи M^* , совпадают с точными на узлах выбранной сетки. Такие методы будем называть *точно адаптированными*.

Таким образом, предложенный подход обобщает идею, стоящую за экспоненциальными интеграторами и экспоненциальной адаптацией [31; 35; 39].

3. Если схема одношаговая, можно ограничиться $N = 1$, то есть под-

бирать схему для оптимизации качества на одном шаге интегрирования. В случае точной адаптации это полностью эквивалентно общему подходу.

3.2 Примеры использования в задачах малой размерности

В данном разделе предложенный метод будет применён к набору динамических систем малой размерности, имеющих аналитическое решение либо всегда, либо при определённых условиях. Будет рассмотрена линейная динамическая система, уравнение логистического роста и движение материальной точки по круговой орбите. Все три примера являются аппроксимациями более сложных систем, что оправдывает их использование для подбора численной схемы.

3.2.1 Одномерная линейная динамическая система

Пусть $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ дифференцируема в некоторой окрестности x_0 . Тогда динамическую систему, заданную уравнением $\dot{x} = f(x)$, можно линеаризовать: $\dot{x} \approx f(x_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_0) \cdot (x - x_0)$. Линеаризованный вариант уравнения далее можно использовать для адаптации некоторого выбранного семейства численных схем. Результат адаптации потенциально может вести себя устойчивее и давать более точные численные решения, так как линейная часть исходной системы будет интегрироваться с меньшей ошибкой.

Рассмотрим систему $\dot{x} = ax + b$, $a \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, эквивалентную линеаризованной. Аналитическое решение соответствующей задачи Коши — $x(t) = e^{at}x_0 + (e^{at} - 1)b/a$. В качестве семейства численных методов возьмём тета-схему (2.6). Подберём θ таким образом, чтобы численное решение за один шаг Δt совпадало с аналитическим. Так как схема одношаговая, а система автономная, это гарантирует совпадение численного и аналитического

решения на произвольном числе шагов. Обозначив $z = a\Delta t$, имеем

$$\begin{aligned}\frac{e^{a\Delta t}x_0 + (e^{a\Delta t} - 1)b/a - x_0}{\Delta t} &= \theta a \cdot [e^{a\Delta t}x_0 + (e^{a\Delta t} - 1)b/a] + (1 - \theta)a \cdot x_0 + b \\ (e^z - 1)(x_0 + b/a) &= \theta \cdot z(e^z - 1)(x_0 + b/a) + z \cdot x_0 + b\Delta t \\ (e^z - 1) &= \theta \cdot z(e^z - 1) + z \\ \theta^*(z) &= \frac{1}{z} - \frac{1}{e^z - 1}\end{aligned}\tag{3.1}$$

Видно, что (3.1) не зависит от b ; это можно было бы учесть ранее, сделав замену $x' = x - b/a$, допустимую в рассматриваемом одномерном случае. Тот же самый результат можно получить, приравняв функцию устойчивости тета-метода к экспоненте:

$$e^z = R_\theta(z) \triangleq \frac{1 + (1 - \theta)z}{1 - \theta z}$$

Полученное выражение совпадает с формулой, приведённой в более ранних работах по экспоненциальной подгонке тета-схемы [9; 35; 39]; мы подробнее проанализируем его в секции 3.3, где будет рассматриваться аналогичная, но многомерная задача.

Если правая часть дифференциального уравнения не является линейной, значение a можно оценить либо по нескольким последовательным шагам численного интегрирования [9] (неявная линеаризация), либо через дифференцирование правой части уравнения (явная линеаризация).

Вместо точной подгонки под фиксированное значение $a\Delta t$ можно также рассмотреть семейство линейных правых частей, соответствующих множеству $a\Delta t \in [\underline{z}; \bar{z}] \subseteq \mathbb{R}$. Без ограничения общности будем считать $b = 0$. Также считаем $\theta \in [0; 1]$. В качестве функционала качества рассмотрим абсо-

лютную ошибку за один шаг интегрирования, поделённую на $|x_0|$:

$$\Phi(\{x_M^n\}_{n=0}^1; x(\cdot; x_0)) = |x_M^1 - x(\Delta t; x_0)|/|x_0| = |R_M(a\Delta t) - e^{a\Delta t}|$$

$$\theta^*(\underline{z}, \bar{z}) = \arg \min_{\theta \in [0; 1]} \max_{z \in [\underline{z}; \bar{z}]} |R_\theta(a\Delta t) - e^{a\Delta t}| \quad (3.2)$$

Максимум $|R_\theta(z) - e^z|$ на отрезке $[\underline{z}; \bar{z}]$ достигается либо в концах отрезка, либо в стационарных точках, либо в точке разрыва.

Стационарные точки:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z}(R_\theta(z) - e^z) &= \frac{1}{(\theta z - 1)^2} - e^z = 0 \quad \Rightarrow \\ &\Rightarrow z_1 = 0, \quad z_{2,3} = 2W_n \left(\mp \frac{e^{-1/(2\theta)}}{2\theta} \right) + \frac{1}{\theta}, \end{aligned}$$

где W_n — W -функция Ламберта, $n \in \{-1, 0\}$. Точка разрыва второго рода (соответствует бесконечной ошибке численного решения): $z_4 = 1/\theta$.

Поскольку все численные решения при $z > z_4$ меняют знак, имеет смысл рассматривать только $\theta \leq \max\{1, 1/\bar{z}\}$. Отсюда следует, что не требуется исследовать и точку z_3 , так как при указанном ограничении на θ имеем $z_3 > z_4 > \bar{z}$. Не требуется рассматривать и z_1 , в которой ошибка равна нулю.

Заметим, что стационарная точка также характеризуется равенством $\theta = (1 \mp e^{-z/2})/z$, где минус соответствует z_2 . Отсюда получаем значение ошибки в точке z_2 :

$$|R_\theta(z_2) - e^{z_2}| = |1 + z_2 e^{z_2/2} - e^{z_2}| = \left| 1 + \frac{z_2}{1 - \theta z_2} - \frac{1}{(1 - \theta z_2)^2} \right|$$

Итоговое оптимальное значение $\theta^*(\underline{z}, \bar{z})$ минимизирует максимальную из ошибок в $\underline{z}$, $\bar{z}$ и z_2 , если последняя лежит в $[\underline{z}, \bar{z}]$. В частности, если $\bar{z} = 0$ и

$\underline{z} \rightarrow -\infty$ (случай жёсткого спектра),

$$\arg \min_{\theta} \max_{-\infty < z < 0} |e^z - R_{\theta}(z)| \approx 0.878 = \theta^*(-\infty, 0),$$

что совпадает со значением, полученным в работе [38].

Значения $\theta^*(-\infty, \bar{z})$ для различных $\bar{z}$ приведены на рис. 3.1. Из данного графика видно, что оптимальные θ для линейных систем с быстро убывающими решениями тяготеют к единице; в то же время, появление положительной части спектра почти сразу опускает оптимум ниже $1/2$. Также интересно наличие небольшой «полочки» в районе нуля, на которой $\theta^*(-\infty; \bar{z}) = \theta^*(-\infty; 0)$.

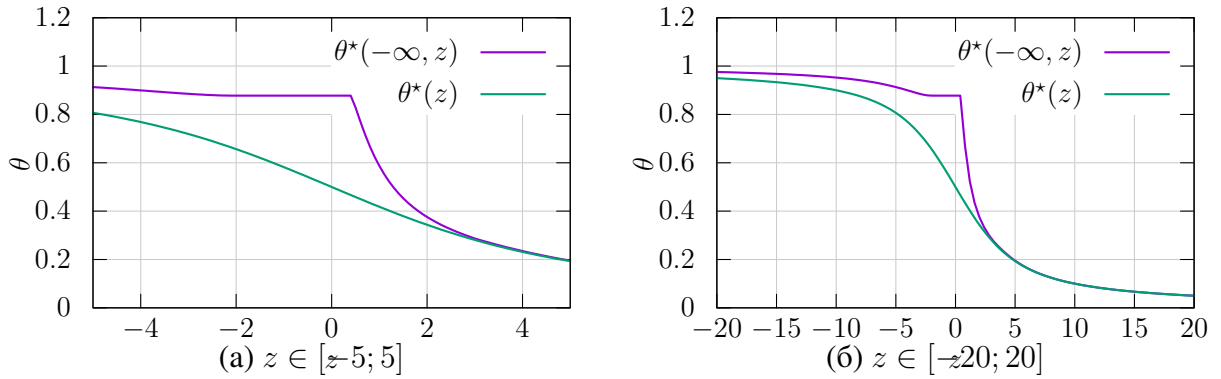


Рисунок 3.1 – Зависимость оптимального значения $\theta^*(\underline{z}; \bar{z})$ (3.2) от $\bar{z}$ при $\underline{z} \rightarrow -\infty$. Для сравнения также приведён график $\theta^*(z)$ из уравнения (3.1).

На рисунках 3.2 и 3.3 показано поведение адаптированной к отрицательному спектру тета-схемы ($\theta = \theta^*(-\infty; 0)$) в случае одномерного уравнения Далквиста. Из графиком можно сделать вывод, что результат адаптации является компромиссом между осциллирующим методом трапеций и «инертным» неявным методом Эйлера.

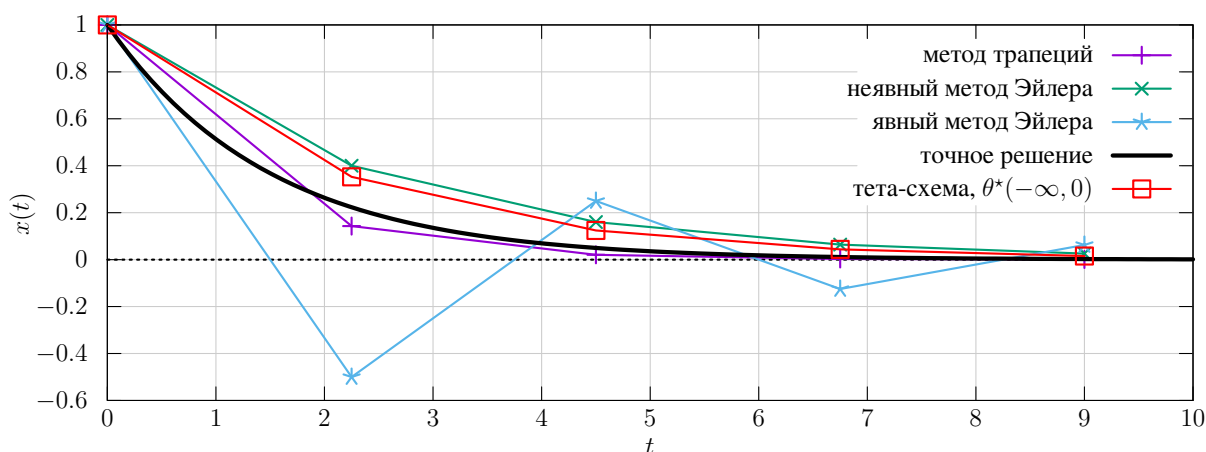


Рисунок 3.2 – Поведение тета-схемы, адаптированной к отрицательному спектру, при решении одномерного уравнения Далквиста ($z = -1.5$).

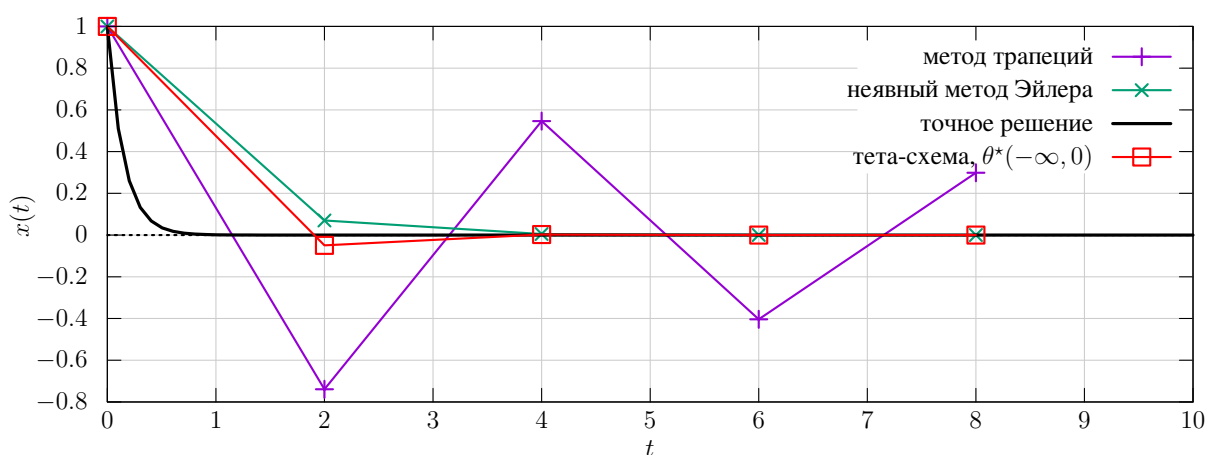


Рисунок 3.3 – Поведение тета-схемы, адаптированной к отрицательному спектру, при решении одномерного уравнения Далквиста ($z = -15.0$).

3.2.2 Логистическое уравнение

Рассмотрим логистическое уравнение или *уравнение Ферхюльста* [21; 65]:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = a \cdot x(1 - x/K), \quad (3.3)$$

где a — параметр роста, K — параметр насыщения. Данное уравнение моделирует геометрический рост в условиях ограниченных ресурсов, а потому часто возникает в качестве предельного или частного случая в химических, биологических, экологических и экономических моделях. Адаптация численного метода к логистическому уравнению потенциально может повысить точность интегрирования систем, в которых наблюдается взрывной рост, сменя-

емый насыщением.

Аналитическим решением (3.3) является логистическая функция, также известная как сигмоида:

$$x(t) = \frac{x_0 K e^{at}}{K + x_0(e^{at} - 1)}$$

Аналогично предыдущему разделу, точно адаптируем тета-метод (2.6) к данной задаче для конкретных значений x_0 , a и K . Один шаг тета-метода:

$$x(\Delta t) - x_0 = \Delta t \cdot [\theta \cdot ax(\Delta t)(1 - x(\Delta t)/K) + (1 - \theta) \cdot ax_0(1 - x_0/K)]$$

Заметим, что

$$x(t)(1 - x(t)/K) = x_0(1 - x_0/K) \frac{K^2 e^{at}}{(K + x_0(e^{at} - 1))^2} = e^{-at} x_0(1 - x_0/K) \frac{(x(t))^2}{x_0^2},$$

$$x(t) - x_0 = \frac{x_0(1 - x_0/K)K(e^{at} - 1)}{K + x_0(e^{at} - 1)} = (1 - e^{-at})x_0(1 - x_0/K) \frac{x(t)}{x_0}$$

откуда

$$(1 - e^{a\Delta t}) \frac{x(\Delta t)}{x_0} = a\Delta t \left[\theta \cdot \left(e^{-a\Delta t} \frac{(x(\Delta t))^2}{x_0^2} - 1 \right) + 1 \right]$$

Обозначим $z = a\Delta t$, $\beta = x(\Delta t)/x_0$. Тогда

$$\theta^*(z, \beta) = \frac{\beta(1 - e^{-z})/z - 1}{\beta^2 e^{-z} - 1}, \quad \beta(z, x_0/K) = \left[e^{-z} + \frac{x_0}{K}(1 - e^{-z}) \right]^{-1}$$

На практике параметр K обычно не известен, а значение a возможно оценить через линеаризацию правой части только на начальном (экспоненциальный рост) и на конечном (насыщение) этапе. Хорошим приближением β может являться отношение численного решения на новом шаге к решению на текущем: $\beta = x^{n+1}/x^n$. Также отметим, что в предельном случае $a\Delta t \rightarrow 0$

зависимостью θ^* от z можно пренебречь:

$$\lim_{z \rightarrow 0} \theta^*(z, \beta) = \frac{\beta - 1}{\beta^2 - 1} = \frac{1}{\beta + 1} \approx \frac{x^n}{x^{n+1} + x^n}$$

Альтернативно, параметры a и K можно находить через подгонку логистической кривой под значения численного решения на прошлых итерациях.

3.2.3 Движение материальной точки по окружности

В задачах небесной механики конические сечения часто служат хорошей аппроксимацией траекторий движения небесных тел [71]. Адаптация численных методов для точного воспроизведения эллиптических, параболических и гиперболических траекторий может позволить существенно увеличить шаг интегрирования систем, точные решения которых слабо отклоняются от конических сечений.

В данном разделе будет рассмотрена существенно упрощенная задача адаптации. Конкретно, общее семейство двухшаговых одностадийных схем, определённое в уравнении (2.6), будет адаптировано под задачу движения материальной точки по окружности в поле центральной силы.

Уравнение, задающее рассматриваемую систему:

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}, \\ \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{a}, \end{cases} \quad \vec{a} = -a(r) \cdot \vec{r}/r, \quad \frac{v(0)}{r^2(0)} = a(r(0)),$$

где $r = |\vec{r}|$, $v = |\vec{v}|$ и начальные условия выбраны так, чтобы движение происходило по окружности ($r(t) = \text{const}$). Так как траектория является плоской кривой, без ограничения общности считаем задачу двумерной. Точное решение:

$$\vec{r}(t) = W(\omega t) \cdot \vec{r}(0), \quad \vec{v}(t) = W(\omega t) \cdot \vec{v}(0), \quad \omega = a(r)/v$$

$$W(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix} \quad (\text{матрица поворота на угол } \varphi)$$

Рассмотрим сначала динамику $\vec{v}(t)$. Приравнивая численное решение за один шаг к точному, получаем уравнение

$$\begin{aligned} (W(\omega\Delta t) - \mathbf{I}) \cdot \vec{v}^n &= \Delta t [\Theta \cdot \vec{a}^{n+1} + (\mathbf{I} - \Theta) \cdot \vec{a}^n] \\ &= \Delta t [\Theta W(\omega\Delta t) + (\mathbf{I} - \Theta)] \cdot \vec{a}^n \\ &= \Delta t [\Theta(W(\omega\Delta t) - \mathbf{I}) + \mathbf{I}] \cdot \frac{a(r)}{v} W(\pi/2) \cdot \vec{v}^n, \end{aligned}$$

где было использовано равенство $\vec{v}/v = W(\pi/2) \cdot \vec{a}/a(r)$. Обозначив $\Delta\varphi = \Delta t \cdot a(r)/v$ и $B = W(-\pi/2)$, получаем

$$\Theta = [\mathbf{I} + (B\Delta\varphi)^{-1}(\mathbf{I} - W(\Delta\varphi))] (\mathbf{I} - W(\Delta\varphi))^{-1} = (\mathbf{I} - W(\Delta\varphi))^{-1} + (B\Delta\varphi)^{-1}$$

Несложно заметить, что

$$B^{-1} = -B = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{I} - W(\Delta\varphi))^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cot(\Delta\varphi/2) \\ -\cot(\Delta\varphi/2) & 1 \end{pmatrix}$$

Тогда оптимальная весовая матрица задаётся уравнением

$$\Theta^*(\Delta\varphi) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \cot(\frac{\Delta\varphi}{2}) - \frac{1}{\Delta\varphi} \\ \frac{1}{\Delta\varphi} - \frac{1}{2} \cot(\frac{\Delta\varphi}{2}) & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Замечание 3.2. Разрыв весовой функции в $\Delta\varphi = 0$ устраним, причём пределом является матрица, соответствующая методу трапеций:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{2} \cot\left(\frac{x}{2}\right) - \frac{1}{x} = 0, \quad \lim_{\Delta\varphi \rightarrow 0} \Theta^*(\Delta\varphi) = \frac{1}{2} \mathbf{I}$$

Несложно показать, что та же самая матрица является оптимальной для интегрирования $\dot{\vec{r}} = \vec{v}$, так как $\vec{r}(t)$ также вращается по окружности с угловой скоростью $\omega = a(r)/v$.

3.3 Многомерная экспоненциальная адаптация

В предыдущем разделе рассматривались примеры адаптации семейства двухшаговых одностадийных схем к различным задачам малой размерности. В настоящем разделе будет исследована точная адаптация к линейной системе произвольной размерности, также называемая *экспоненциальной адаптацией* [31]. В первом подразделе будет описан общий алгоритм экспоненциальной адаптации семейств линейных схем. В последующих подразделах он будет применён к нескольким выбранным семействам методов Рунге-Кутты.

3.3.1 Общий алгоритм экспоненциальной адаптации

Можно показать, что точная адаптация к системе $\dot{\mathbf{x}} = A \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}$ эквивалентна точной адаптации к системе $\dot{\mathbf{x}} = A \cdot \mathbf{x}$. В случае невырожденного A это доказывается заменой $\mathbf{x} := \mathbf{x} + A^{-1} \cdot \mathbf{b}$. Однако данный результат справедлив и в общем случае.

Теорема 3.3. Пусть $\mathcal{B}$ — банахово, $A \in \mathcal{L}(\mathcal{B})$. Если линейный численный метод точно интегрирует систему $\dot{\mathbf{x}} = A \cdot \mathbf{x}$ и семейство систем $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{b}$ для любых $\mathbf{b} \in \mathcal{B}$ и с любыми начальными условиями, то он точно интегрирует неоднородную систему $\dot{\mathbf{x}} = A \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}$ с любыми начальными условиями.

Доказательство. Рассмотрим задачу Коши

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = A \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \end{cases}$$

Пусть $\mathcal{X} = \text{range } A$. Разложим линейное пространство в прямую сумму: $\mathcal{B} =$

$\mathcal{X} \oplus \mathcal{Y}$. Пусть $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}^x(t) + \mathbf{x}^y(t)$ и $\mathbf{b} = \mathbf{b}^x + \mathbf{b}^y$, где $\mathbf{x}^x(t)$, $\mathbf{b}^x \in \mathcal{X}$. Тогда $\dot{\mathbf{x}}^x = 0 + \mathbf{b}^x$, что может быть точно проинтегрировано численным методом по условию. Рассмотрим произвольный вектор $\mathbf{a}$: $A \cdot \mathbf{a} = \mathbf{b}^y$ (существует по определению $\mathbf{b}^y$). Определим $\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}^y(t) + \mathbf{a}$. Тогда $\dot{\mathbf{y}}(t) = A \cdot \mathbf{y}$, что может быть точно проинтегрировано численным методом по условию.

Поскольку используется линейный численный метод, и для разложения исходной задачи на две использовались только аффинные преобразования (проекции на $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$, замена переменных $\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}^y(t) + \mathbf{a}$), численное решение никак не изменится, если интегрировать исходную задачу напрямую. Отсюда следует, что рассматриваемая задача Коши будет проинтегрирована точно. $\square$

Следует отметить, что требование точно интегрировать уравнение $\dot{\mathbf{x}} = \text{const}$ является довольно слабым, и ему изначально удовлетворяет большинство численных методов.

Теорема 3.3 позволяет проводить экспоненциальную адаптацию, используя только проверочное уравнение Далквиста. Как следствие, достаточным признаком точного интегрирования линейных неоднородных систем является попросту равенство экспоненте функции устойчивости и способность метода точно интегрировать константную правую часть.

Следствие 3.4. Численный метод с функцией устойчивости $R(z)$ точно адаптирован к семейству задач Коши $\{\dot{\mathbf{x}} = A \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}, \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \mid \mathbf{x}_0, \mathbf{b} \in \mathcal{B}\}$ для фиксированного $A \in \mathcal{L}(\mathcal{B})$ на сетке $\{0, \Delta t\}$, если он точно адаптирован к семейству задач Коши $\{\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{b}, \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \mid \mathbf{x}_0, \mathbf{b} \in \mathcal{B}\}$ на той же сетке и $R(\Delta t \cdot A) = \exp(\Delta t \cdot A)$.

Следствие 3.4 особенно удобно тем, что для большинства семейств численных методов функция устойчивости известна. В частности, для методов

Рунге-Кутты, задаваемых таблицей Бутчера,

$$R(z) = 1 + zb^T(I - zA)^{-1}e = \frac{\det(I - zA + zeb^T)}{\det(I - zA)},$$

где A, b — соответствующие части таблицы Бутчера, а e — вектор, состоящий из единиц.

3.3.2 Взвешенный метод Эйлера

Произведём экспоненциальную адаптацию двухшаговой одностадийной схемы (2.6). Нетрудно проверить, что схема точно интегрирует константную правую часть при любых Θ . Воспользуемся следствием 3.4. Для краткости обозначим $\Delta t \cdot A = z$.

$$(I - z\Theta)^{-1}(I + z(I - \Theta)) = \exp(z)$$

Поскольку в уравнении помимо Θ фигурируют только регулярные функции от z , его можно решать в комплексных переменных (см. определение 2.2).

$$(1 + z) - z\Theta = e^z(1 - z\Theta)$$

$$\Theta^*(z) = \frac{1}{z} - \frac{1}{e^z - 1}, \quad (3.4)$$

Полученное выражение функционально совпадает с оптимальным значением $\theta^*(z)$ из раздела 3.2.1 (формула (3.1)). Основное отличие: z теперь может быть матрицей.

Замечание 3.5. Функция $\Theta^*(z)$, заданная уравнением (3.4) обладает следующими свойствами:

1. $\Theta^*(z)$ регулярна в $\mathbb{C} \setminus \{2\pi i \cdot k \mid k \in \mathbb{Z}, k \neq 0\}$;
2. $\Theta^*(z) = \frac{1}{2} - \frac{z}{12} + \frac{z^3}{720} + \mathcal{O}(z^4)$ в окрестности $z = 0$;

3. $\Theta^*(\mathbb{R}) \subseteq (0; 1) \subseteq \mathbb{R}$. Как следствие, $\Theta^*(\Delta t \cdot A) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ для $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (теорема 2.7).

На практике в качестве z следует брать $\Delta t \cdot F(x)$, где F — матрица Якоби правой части интегрируемой системы или её аппроксимация. Для простоты вычислений $\Theta^*(z)$ также можно брать только диагональ матрицы Якоби или усредненный спектр (след матрицы, делённый на размерность).

3.3.3 Дважды взвешенный метод Эйлера

Рассмотрим следующее семейство двухстадийных методов Рунге-Кутты, заданное таблицей Бутчера

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 - \alpha & \alpha \\ \hline & 1 - \beta & \beta \end{array} \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}$$

Функция устойчивости:

$$R(z) = \frac{1 + (1 - \alpha)z - (\alpha - \beta)z^2}{1 - \alpha z}$$

Поскольку параметра теперь два, можно осуществить двойную экспоненциальную адаптацию: $R(z) = \exp(z)$, $R(x) = \exp(x)$. Рассмотрим случай коммутирующих z и x , позволяющий решить уравнение в комплексных переменных:

$$\begin{aligned} \alpha^*(x, z) &= \frac{z^2(e^x - 1 - x) - x^2(e^z - 1 - z)}{xz(z(e^x - 1) - x(e^z - 1))} \\ \beta^*(x, z) &= \frac{(x - z)(e^z - 1 - z)(e^x - 1 - x)}{xz(z(e^x - 1) - x(e^z - 1))} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Замечание 3.6. Функции $\alpha^*(x, z)$ и $\beta^*(x, z)$, заданные уравнениями (3.5) обладают следующими свойствами:

1. $\alpha^*(x, z) = \frac{1}{3} - \frac{x + z}{36} + \mathcal{O}(|x|^2 + |z|^2)$ и $\beta^*(x, z) = \frac{1}{2} + \frac{x + z}{6} + \mathcal{O}(|x|^2 + |z|^2)$ в окрестности $x = 0, z = 0$;

2. $\lim_{x \rightarrow -\infty} \alpha^*(x, z) = \lim_{x \rightarrow -\infty} \beta^*(x, z) = \Theta_{(3.4)}^*(z)$, что делает схему, полученную в разделе 3.3.2, частным случаем данного метода.

3.3.4 Адаптированный двухстадийный SDIRK-метод

Рассмотрим следующее семейство двухстадийных SDIRK-методов Рунге-Кутты [28], заданное таблицей Бутчера

$$\begin{array}{c|cc} \alpha & \alpha & 0 \\ 1 & 1 - \alpha & \alpha \\ \hline & 1 - \alpha & \alpha \end{array} \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

Функция устойчивости:

$$R(z) = \frac{1 + (1 - 2\alpha)z}{(1 - \alpha z)^2}$$

Оптимальное значение параметра:

$$\alpha^*(z) = \frac{1 - e^{-z}}{z} \pm e^{-z} \sqrt{\frac{1}{z^2} (e^z(z - 1) + 1)}$$

Полученная функция очень проблемная, так как требует вычисления матричного корня, в общем случае не определённого однозначно. Однако можно показать, что $\alpha^*(z)$ регулярна в окрестности нуля, и довольно точно аппроксимируется первыми двумя членами ряда Тейлора:

$$\alpha^*(z) \approx 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} + \left(\frac{\sqrt{2}}{3} - \frac{1}{2} \right) \cdot z$$

Стоит отметить, что при $\alpha = 1 - \sqrt{2}/2$ исходная численная схема является L-устойчивой.

3.4 Модифицированный метод Ньютона

Как уже было сказано, одним из преимуществ адаптивных методов является баланс между устойчивостью и простотой поиска корней невязки дискретизованного уравнения. В некоторых задачах, однако, требуется повышенная численная устойчивость, соответствующая наиболее неявным методам. Как было указано в разделе 2.4.3, использование таких методов напрямую может быть затруднено из-за паразитических корней. Интересным кажется подход, использующий информацию о корнях невязки адаптированной схемы для поиска корней невязки исходного, неадаптированного метода.

Часто корни невязки дискретизованного уравнения $\mathcal{R}(\mathbf{x})$ с матрицей Якоби $\mathcal{J}(\mathbf{x})$ ищутся методом Ньютона:

$$\mathbf{x}_{m+1}^{n+1} = \mathbf{x}_m^{n+1} - \mathcal{J}^{-1}(\mathbf{x}_m^{n+1}) \cdot \mathcal{R}(\mathbf{x}_m^{n+1}),$$

где m — номер нелинейной итерации метода. Если вместо точного значения матрицы Якоби используется аппроксимация или модифицированное значение, метод называется *квазиньютоновским*.

Руководствуясь соображениями о характере нелинейной жёсткости, можно построить квазиньютоновский метод, оптимизирующий невязку исходной, неадаптированной численной схемы через итерации метода Ньютона с матрицей Якоби невязки адаптированного метода. Неформально, такой выбор матрицы Якоби будет «подталкивать» итерации метода Ньютона в сторону корней менее неявной схемы, то есть в сторону от паразитических корней.

4 ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

В данной главе приведены результаты численных экспериментов, целью которых является проверка работы предложенных методов на примере жёстких систем дифференциальных уравнений. Невязка и матрица Якоби вычисляются при помощи систем автодифференцирования. Решение систем линейных алгебраических уравнений производится при помощи библиотеки INMOST [48]. Диагонализация матрицы производится при помощи библиотеки Eigen [26]. В этой секции референсным решением будет называться численное решение, полученное методом трапеций при использовании малого шага по времени (10^5 точек). Допустимая погрешность в методе Ньютона: $\varepsilon_{\text{абс}} = 10^{-7}$ и $\varepsilon_{\text{отн}} = 10^{-9}$. Максимальное допустимое число ньютоновских итераций: $N = 200$.

4.1 Система Лотки-Вольтерры

Система Лотки-Вольтерры [41] имеет вид

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = (a - by)x \\ \frac{dy}{dt} = (-c + dx)y \end{cases}$$

Для численных экспериментов будут использованы параметры $a = 0.3$, $b = 0.01$, $c = 0.3$, $d = 0.3$, и начальные условия $x_0 = 5$, $y_0 = 5$. Время моделирования — $T = 100$. Численное решение искалось для величины шага $\Delta t = 1$ и $\Delta t = 2$. Графики численных решений, а также зависимость числа потребовавшихся итераций метода Ньютона от номера шага приведены на рисунке 4.1.

Неявный метод Эйлера при использовании стандартного метода Ньютона расходится при $\Delta t \geq 1$ из-за отрицательного значения переменной после

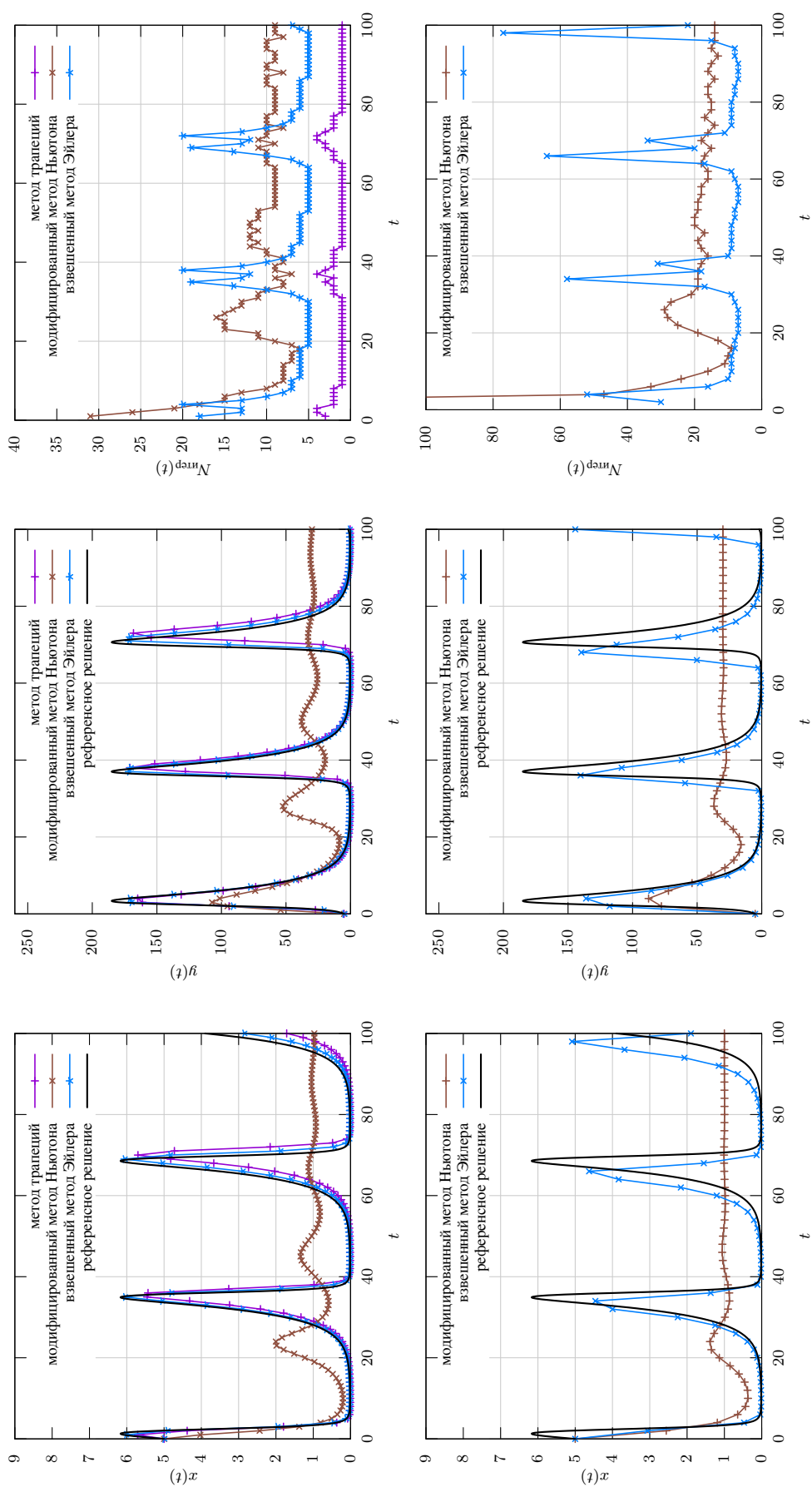


Рисунок 4.1 – Сравнение методов на примере интегрирования системы Лотки-Вольтерры для шага по времени $\Delta t = 1$ (сверху) и $\Delta t = 2$ (снизу).

некоторой итерации. Метод трапеций также расходится при $\Delta t \geq 2$ по той же причине. Модифицированный метод Ньютона позволяет убрать проблему сходимости для данных шагов, однако требует для этого значительно большее число итераций. Так как модифицированный метод Ньютона использует ту же невязку, что и численно диссипативный неявный метод Эйлера, решение, полученное с его помощью, сильно затухает и является излишне диссипативным. Взвешенный метод Эйлера позволяет добиться точности, сравнимой с методом трапеций при $\Delta t = 1$, но за счёт заметно возросшего числа нелинейных итераций; при этом он также решает задачу при $\Delta t = 2$.

На рисунке 4.2 приведены графики нормы невязки для метода трапеций, модифицированного метода Ньютона и взвешенного метода Эйлера, возникающие при решении нелинейных систем на некоторых пяти последовательных шагах численного интегрирования системы Лотки-Вольтерры. Хорошо видна седловая структура задачи, которая успешно устраняется взвешенным методом Эйлера.

4.2 Осциллятор Ван дер Поля

Жёсткая система, соответствующая уравнению Ван дер Поля [4], имеет вид

$$\varepsilon \frac{dx}{dt} = y - \left(\frac{1}{3}x^3 - x \right), \quad \frac{dy}{dt} = -x$$

Параметр ε регулирует жёсткость уравнения. В данном эксперименте он положен равным 10^{-2} . Начальные условия: $x_0 = 0.2, y_0 = 0$. Графики численных решений, а также зависимость числа потребовавшихся итераций метода Ньютона от номера шага приведены на рисунке 4.3.

Данная система является значительно жёсткой как в линейном, так и в нелинейном смысле. Неявный метод Эйлера, формула дифференцирования назад второго порядка, а также метод трапеций на некоторой итерации сошлись к физически некорректному корню. Это является признаком нели-

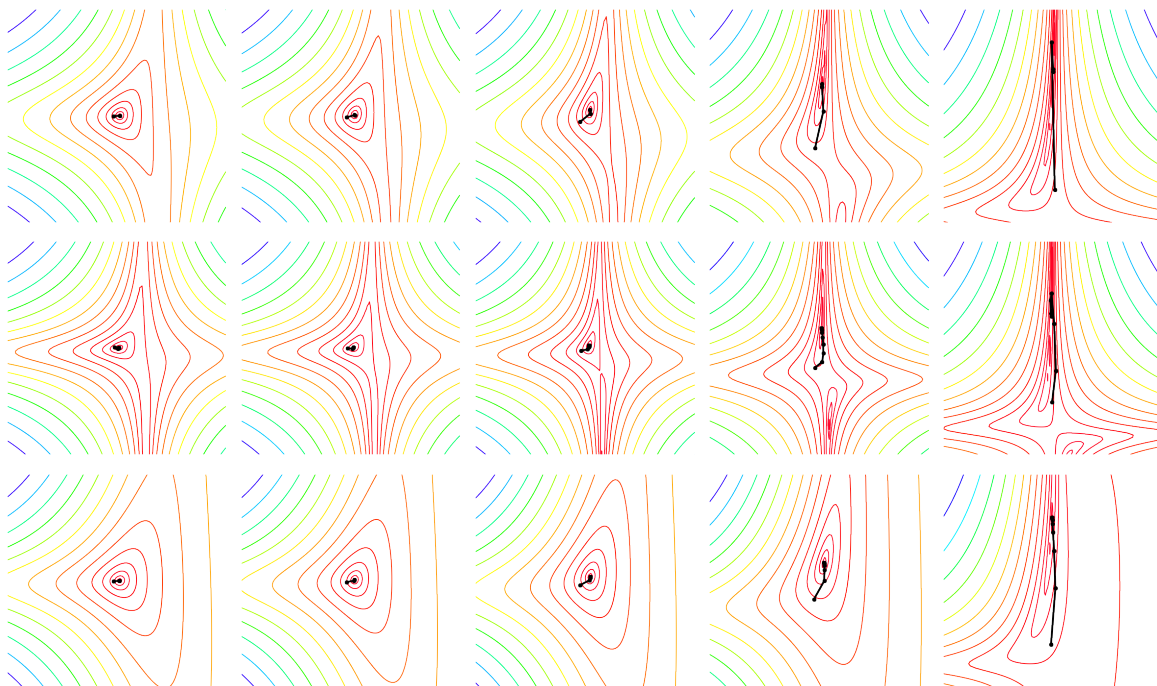


Рисунок 4.2 – Контуры 2-нормы невязки в зависимости от $x \in [x^* - 15, x^* + 15]$ по горизонтали и $y \in [y^* - 15, y^* + 15]$ по вертикали (где (x^*, y^*) — центр траектории ньютоновских итераций) для метода трапеций (верхний ряд), Эйлера (модифицированный метод Ньютона) (средний ряд) и взвешенного метода Эйлера (нижний ряд) для пяти последовательных шагов по времени ($\Delta t = 1$), система Лотки-Вольтерры. Черная траектория соответствует итерациям Ньютона.

нейной жёсткости. Также метод трапеций регулярно показывал сильно осциллирующее поведение, что говорит о значительной линейной жёсткости. Оба предложенных метода в то же время дают корректные решения, повторяющие динамику референсного решения, причём без нефизичных осцилляций. Взвешенный метод Эйлера воспроизводит референсное решение без дисперсионной ошибки, в то время как модифицированный метод Ньютона даёт несколько запаздывающие колебания. Видно, однако, что модифицированный метод Ньютона почти всегда досрочно завершается из-за достижения предельного числа итераций. Взвешенный метод Эйлера также в этом смысле сравнительно затратен, но задачу решает.

В сравнение также были включены *L-устойчивый метод Парески-Руссо* [49] и *метод Кина-Жанга* [42] — два A-устойчивых диагонально-неявных

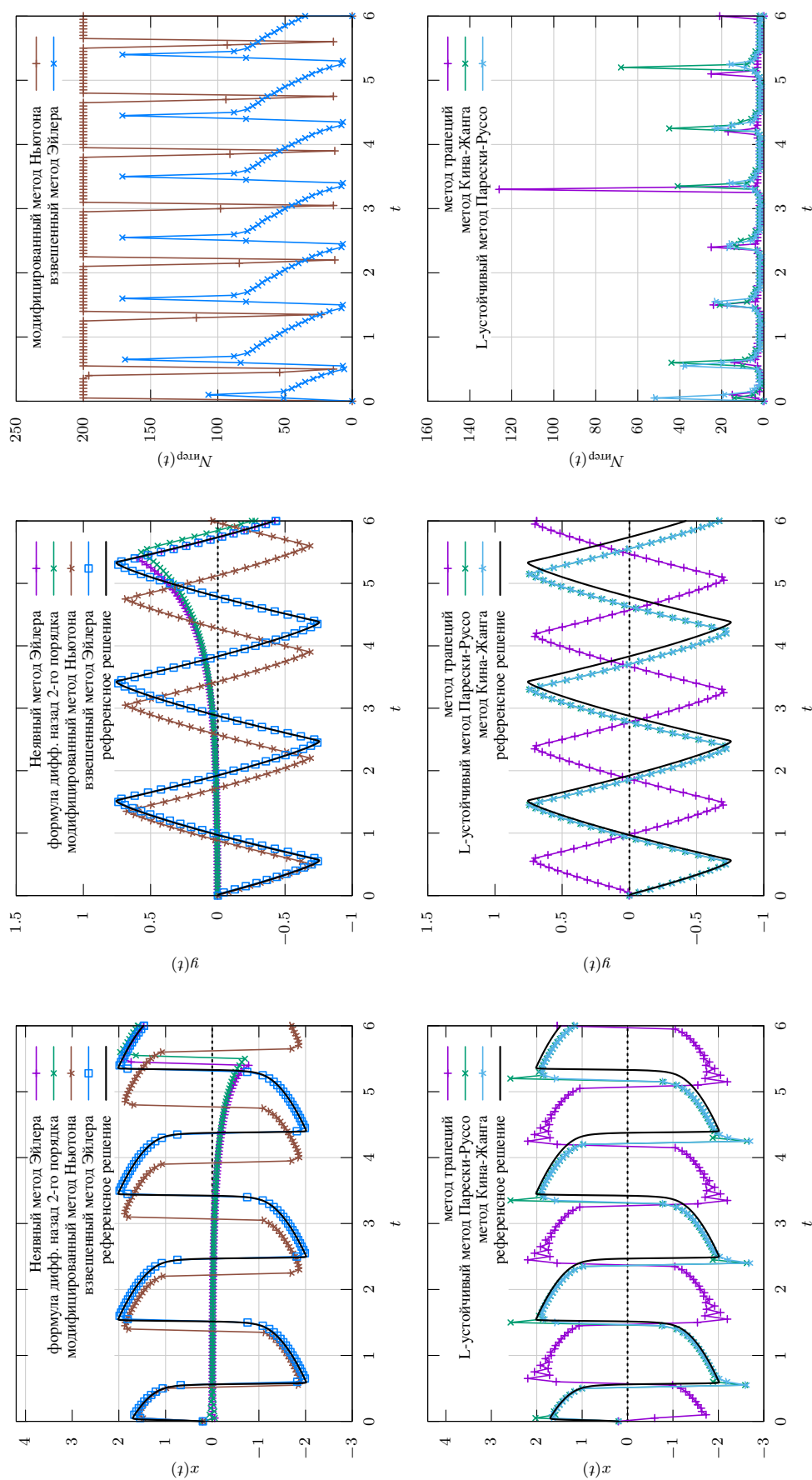


Рисунок 4.3 – Сравнение методов на примере интегрирования системы Ван дер Поля для шага по времени $\Delta t = 0.05$.

двухстадийных метода Рунге-Кутты второго порядка аппроксимации, задаваемых следующими таблицами Бутчера соответственно:

$$\begin{array}{c|cc}
 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} & 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\
 \frac{\sqrt{2}}{2} & \sqrt{2} - 1 & 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \\
 \hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{c|cc}
 1/4 & 1/4 & 0 \\
 3/4 & 1/2 & 1/4 \\
 \hline
 & 1/2 & 1/2
 \end{array}$$

На графиках видно, что численные решения, полученные при помощи данных методов, имеют нефизичные пики в окрестности резких перепадов референсного решения.

На рисунке 4.4 приведены графики нормы невязки для метода трапеций, модифицированного метода Ньютона и взвешенного метода Эйлера, возникающие при решении нелинейных систем на некоторых пяти последовательных шагах численного интегрирования системы Ван дер Поля. Снова хорошо видна седловая структура задачи. В случае метода трапеций и модифицированного метода Ньютона путь, образуемый ньютоновскими итерациями, осциллирует между минимумами (см. третий столбец). С другой стороны, взвешенный метод Эйлера избегает этой проблемы.

4.3 Каскад свёртывания крови

Перейдём, наконец, к системе каскада свёртывания крови. Данная система взята из [2; 48] и является упрощённой моделью более подробного каскада свёртывания крови [72; 73]. Уравнения модели приведены в (4.1), на-

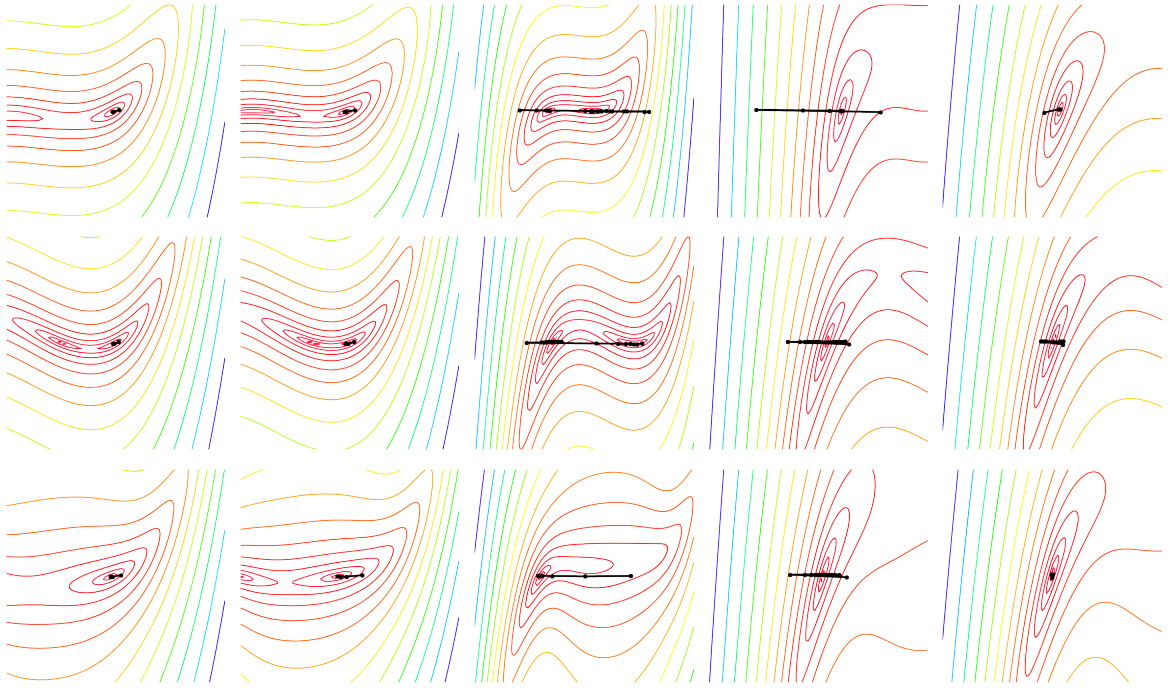


Рисунок 4.4 – Контуры 2-нормы невязки в зависимости от $x \in [x^* - 1.5, x^* + 1.5]$ по горизонтали и $y \in [y^* - 1.5, y^* + 1.5]$ по вертикали (где (x^*, y^*) — центр траектории ньютоновских итераций) для метода трапеций (верхний ряд), Эйлера (модифицированный метод Ньютона) (средний ряд) и взвешенного метода Эйлера (нижний ряд) для пяти последовательных шагов по времени ($\Delta t = 0.1$), осциллятор Ван дер Поля. Черная траектория соответствует итерациям Ньютона.

чальные условия и параметры — в таблице 4.1.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial P}{\partial t} &= -(k_1\phi_c + k_2B_\alpha + k_3T + k_4T^2 + k_5T^3)P, \\
 \frac{\partial T}{\partial t} &= (k_1\phi_c + k_2B_\alpha + k_3T + k_4T^2 + k_5T^3)P - k_6AT, \\
 \frac{\partial B_\alpha}{\partial t} &= (k_7\phi_c + k_8T)(B^0 - B_\alpha) - k_9AB_\alpha, \quad \frac{\partial A}{\partial t} = -k_6AT - k_9AB_\alpha, \quad (4.1) \\
 \frac{\partial F_g}{\partial t} &= -\frac{k_{10}TF_g}{K_{10} + F_g}, \quad \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{k_{10}TF_g}{K_{10} + F_g} - k_{11}F, \quad \frac{\partial F_p}{\partial t} = k_{11}F, \\
 \frac{\partial \phi_c}{\partial t} &= -(k_{12}T - k_{13}\phi_c)\phi_f, \quad \frac{\partial \phi_f}{\partial t} = (k_{12}T - k_{13}\phi_c)\phi_f.
 \end{aligned}$$

Результаты численного эксперимента можно найти в таблице 4.2. Время моделирования — $T = 100$. Ошибка метода $\mathcal{E}_x$ для переменной $x(t)$ относи-

Таблица 4.1 – Начальные условия и параметры модели (каскад свёртывания крови).

P	T	B_α	A	F_g	F	F_p	ϕ_c
1400	0	10	3400	7000	0	0	299
ϕ_f	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	k_7
1	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$7.5 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-6}$	10^{-10}	$4.817 \cdot 10^{-6}$	10^{-9}
k_8	k_9	k_{10}	K_{10}	k_{11}	k_{12}	k_{13}	B^0
$5.2173 \cdot 10^{-5}$	$2.223 \cdot 10^{-9}$	0.005	3160	0.1	0.002	$4 \cdot 10^{-9}$	200

тельно референсного решения $x_{ref}(t)$ вычислялась по формуле

$$\mathcal{E}_x = \sqrt{T \int_{t \in [0, T]} (x(t) - x_{ref}(t))^2 dt} / \int_{t \in [0, T]} |x_{ref}(t)| dt .$$

Полная ошибка метода вычислялась как среднеквадратическая ошибка по всем переменным. В таблице также приведено полное $N_{итер}^{общ}$, среднее $N_{итер}^{сред}$, минимальное $N_{итер}^{мин}$ и максимальное $N_{итер}^{макс}$ число потребовавшихся ньютоновских итераций. Дополнительно указано число ньютоновских итераций, на которых решение оказывалось в отрицательной области — $N_{итер}^{отриц}$.

Таблица 4.2 – Результаты для модели каскада свёртывания крови.

Метод	Δt	$N_{итер}^{общ}$	$N_{итер}^{сред}$	$N_{итер}^{мин}$	$N_{итер}^{макс}$	$\mathcal{E}$	$N_{итер}^{отриц}$
Неявный Эйлера	10^{-2}	10812	1.0812	1	3	$1.7 \cdot 10^{-2}$	0
Неявный Эйлера	10^{-1}	2032	2.032	2	5	0.17	0
Неявный Эйлера	1	233	2.33	2	19	0.79	10
Мод. Ньютона	10^{-2}	22071	2.20	2	7	$1.7 \cdot 10^{-2}$	0
Мод. Ньютона	10^{-1}	3740	3.74	3	20	0.17	0
Мод. Ньютона	1	768	7.68	4	53	0.79	10
Мод. Ньютона	2	502	10.0	5	82	1.14	12
Мод. Ньютона	5	240	12.0	9	26	1.19	13
Мод. Ньютона	10	164	16.4	11	20	1.17	6
Трапеций	10^{-2}	10701	1.0701	1	3	$1.6 \cdot 10^{-3}$	0
Трапеций	10^{-1}	2023	2.023	2	4	$3.8 \cdot 10^{-2}$	0
Взвешенный Эйлера	10^{-2}	10716	1.0716	1	3	$1.6 \cdot 10^{-3}$	0
Взвешенный Эйлера	10^{-1}	2052	2.052	2	7	$3.3 \cdot 10^{-2}$	0
Взвешенный Эйлера	$2.5 \cdot 10^{-1}$	861	2.1525	2	15	$8.2 \cdot 10^{-2}$	3

Применение неявного метода Эйлера напрямую ведёт к нефизичному отрицательному решению для $\Delta t \geq 2$ (рис. 4.5). В то же время, модифицированный метод Ньютона позволил получить корректное решение для шагов вплоть до $\Delta t = 10$ включительно. Использование метода трапеций с тем же шагом приводило к появлению сильно осциллирующих нефизичных осцилляций. Взвешенный метод Эйлера позволил увеличить точность для маленьких шагов по времени ($\Delta t \leq 0.25$), но при использовании больших шагов также получались решения с нефизичными осцилляциями (пусть и заметно меньшими по амплитуде, чем у метода трапеций).

Из поведения численных методов снова можно сделать вывод, что модель каскада свёртывания крови является жёсткой во всех предложенных смыслах. При этом предложенные методы позволяют кратно увеличить шаг интегрирования данной системы без потери устойчивости.

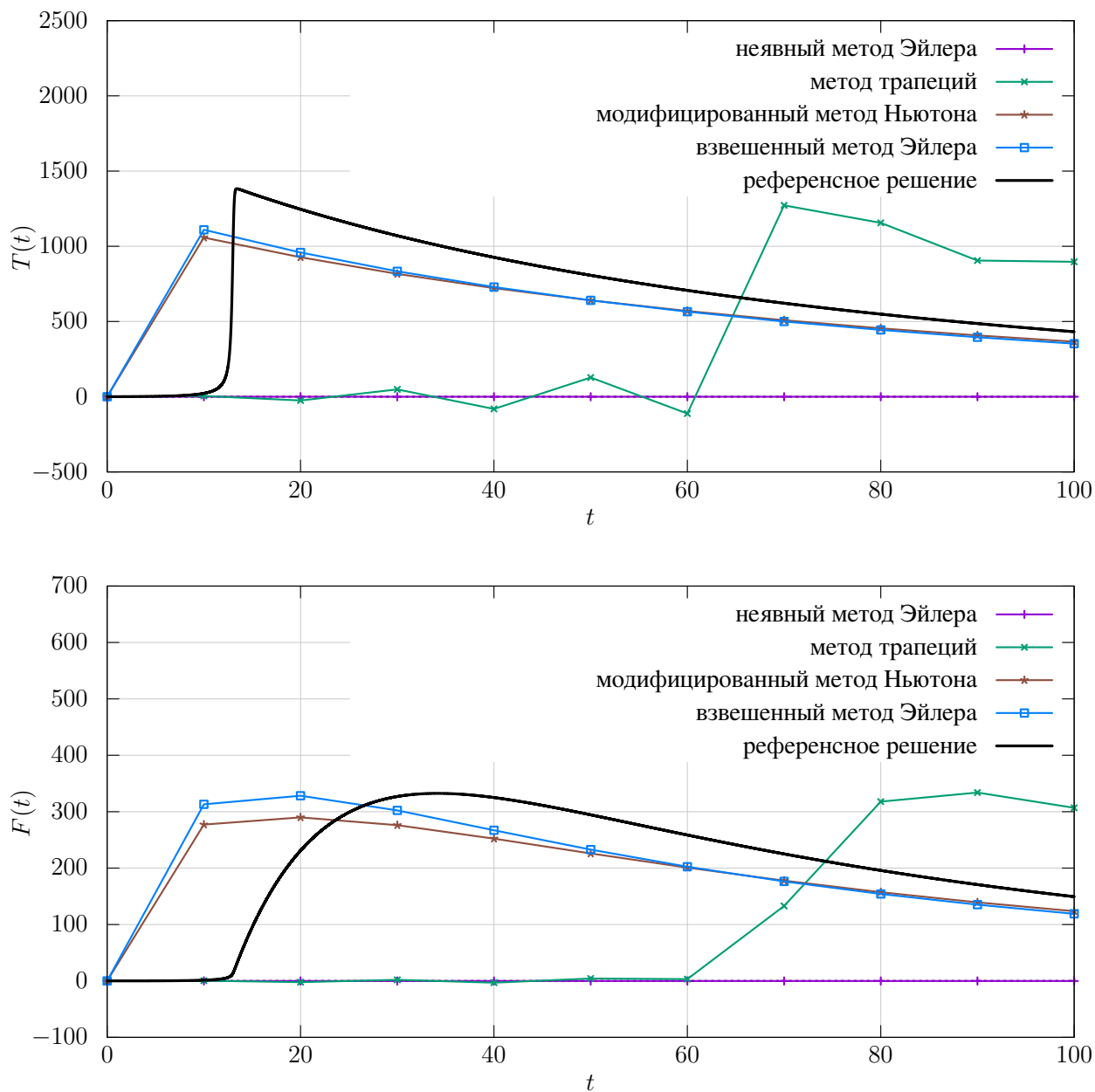


Рисунок 4.5 – Сравнение методов на примере интегрирования системы каскада свёртывания крови для шага по времени $\Delta t = 10$. Приведены графики зависимости концентрации тромбина (верх) и фибриногена (низ) от времени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Несмотря на бурное развитие теории устойчивости численных методов во второй половине прошлого века, некоторые вопросы данной области и по сей день остаются без ответа. В частности, до сих пор нет удовлетворительного определения жёстких систем, даже несмотря на то, что необходимость их решения возникает повсеместно. Например, уравнения, описывающие химические реакции, могут быть особенно жёсткими в силу разных временных масштабов протекающих процессов, седлового характера, а также в силу значительной нелинейности правой части. Возможность численно решать подобные системы в условиях ограниченных вычислительных ресурсов требует развития теории жёстких систем дифференциальных уравнений, а также соответствующих вычислительных методов.

Проведённое исследование по большей части было посвящено указанным проблемам численного анализа. Основные результаты обозначенной части работы приведены ниже:

1. Систематизированы основные положения теории устойчивости численных методов, необходимые для исследования жёсткости систем. Введены два новых понятия: *классическая* и *нелинейная жёсткость*, отражающие разную природу жёсткости различных систем.
2. Показано, что для устранения эффектов классической жёсткости достаточно использовать устойчивые в том или ином смысле численные методы.
3. Продемонстрировано, что понятие нелинейной жёсткости осмысленно и информативно: существуют жёсткие системы, которые некорректно интегрируются А-устойчивыми, L-устойчивыми методами и экспоненциальными интеграторами. Причём сложность интегрирования данных систем обусловлена нелинейностью правых частей, порождающей паразитические корни невязки дискретизованного уравнения. Более того, показано, что использо-

вание менее устойчивых численных методов может частично или полностью решить проблему нелинейной жёсткости для конкретных задач.

4. Рассмотрен новый подход к построению численных схем, обобщающий метод экспоненциальной подгонки. Предложенный способ позволяет динамически адаптировать численные схемы для получения более точных и устойчивых численных решений определённого класса задач. Данный подход также позволяет соблюдать динамический баланс между устойчивостью численной схемы и простотой поиска корней невязки дискретизованного уравнения, что полезно при интегрировании жёстких во всех смыслах систем.

5. Предложенный метод адаптации был применён ко множеству задач, встречающихся в том или ином виде в биологии, химии, экологии, экономике и небесной механике.

6. На основе предложенного метода адаптации была предложена модификация метода Ньютона, позволяющая в случае сильно неявных численных методов улучшить сходимость ньютоновских итераций.

7. Для разработанных методов проведены численные эксперименты на жёстких системах дифференциальных уравнений (в том числе и на системе каскада свёртывания крови), показывающие преимущество предложенного подхода в сравнении с другими классическими методами в вопросах борьбы с нежелательными эффектами нелинейной жёсткости.

Заключительная глава работы посвящена разработке модификации существующей модели фибринового тромба, которая должна позволить моделировать образование тромбоцитарного тромба. Основные результаты данной части работы приведены ниже:

1. Рассмотрены вопросы распределения тромбоцитов в объёме. Полученные теоретические результаты использованы для построения моделей вязкости и послойного роста тромба.

2. Предложены модификации к системе уравнений реакций, описыва-

ющие слипание и смыв тромбоцитов.

3. На основе существующих работ предложенные уравнения реакций были конкретизированы. Также был произведён начальный подбор большинства параметров модели.

В дальнейшем необходимо провести валидацию модели и точный подбор параметров на существующих экспериментах с белым тромбом. Итоговой целью является интеграция полученных уравнений в существующую модель фибринового тромба.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. A Continuum Model for the Unfolding of von Willebrand Factor / M. Zhussupbekov [и др.] // Ann. Biomed. Eng. — 2021. — Сент. — Т. 49, № 9. — С. 2646—2658.
2. A mathematical model to quantify the effects of platelet count, shear rate, and injury size on the initiation of blood coagulation under venous flow conditions / A. Bouchnita [и др.] // PloS one. — 2020. — Т. 15, № 7. — e0235392.
3. A polygenic risk score and age of diagnosis of COPD / J. Zhang [и др.] // Eur. Respir. J. — 2022. — Сент. — Т. 60, № 3. — С. 2101954.
4. *Alexander R.* The modified Newton method in the solution of stiff ordinary differential equations // mathematics of computation. — 1991. — Т. 57, № 196. — С. 673—701.
5. *Anderson D. G.* Iterative procedures for nonlinear integral equations // Journal of the ACM (JACM). — 1965. — Т. 12, № 4. — С. 547—560.
6. *Armijo L.* Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives // Pacific Journal of mathematics. — 1966. — Т. 16, № 1. — С. 1—3.
7. *Auzinger W., Frank R., Kirlinger G.* Modern convergence theory for stiff initial-value problems // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 1993. — Т. 45, № 1/2. — С. 5—16.
8. *Auzinger W., Frank R., Kirlinger G.* A note on convergence concepts for stiff problems // Computing. — 1990. — Т. 44, № 3. — С. 197—208.
9. *Berzins M., Furzeland R.* An adaptive theta method for the solution of stiff and nonstiff differential equations // Applied Numerical Mathematics. — 1992. — Т. 9, № 1. — С. 1—19.
10. Blood viscosity during coagulation at different shear rates / M. Ranucci [и др.] // Physiol. Rep. — 2014. — Июль. — Т. 2, № 7. — e12065.

11. *Bluestein D., Li Y. M., Krukenkamp I. B.* Free emboli formation in the wake of bi-leaflet mechanical heart valves and the effects of implantation techniques // *J. Biomech.* — 2002. — Дек. — Т. 35, № 12. — С. 1533—1540.
12. *Brown P. N., Hindmarsh A. C., Walker H. F.* Experiments with quasi-Newton methods in solving stiff ODE systems // *SIAM journal on scientific and statistical computing.* — 1985. — Т. 6, № 2. — С. 297—313.
13. *Brown P. N., Saad Y.* Convergence theory of nonlinear Newton–Krylov algorithms // *SIAM Journal on Optimization.* — 1994. — Т. 4, № 2. — С. 297—330.
14. *Butakov I., Terekhov K.* Two Methods for the Implicit Integration of Stiff Reaction Systems // *Computational Methods in Applied Mathematics.* — 2022. — Сент. — Т. 23.
15. *Casa L. D., Deaton D. H., Ku D. N.* Role of high shear rate in thrombosis // *Journal of Vascular Surgery.* — 2015. — Т. 61, № 4. — С. 1068—1080.
16. Characterization of the ‘White’ Appearing Clots that Cause Acute Ischemic Stroke / O. M. Mereuta [и др.] // *Journal of Stroke and Cerebrovascular Diseases.* — 2021. — Т. 30, № 12. — С. 106127.
17. Characterization of the Threshold Response of Initiation of Blood Clotting to Stimulus Patch Size / C. J. Kastrup [и др.] // *Biophysical Journal.* — 2007. — Т. 93, № 8. — С. 2969—2977.
18. Composing scalable nonlinear algebraic solvers / P. R. Brune [и др.] // *siam REVIEW.* — 2015. — Т. 57, № 4. — С. 535—565.
19. Computational model of device-induced thrombosis and thromboembolism / P. D. Goodman [и др.] // *Ann. Biomed. Eng.* — 2005. — Июнь. — Т. 33, № 6. — С. 780—797.
20. Computational simulation of platelet deposition and activation: I. Model development and properties / E. N. Sorensen [и др.] // *Ann. Biomed. Eng.* — 1999. — Июль. — Т. 27, № 4. — С. 436—448.

21. *Cramer J.* The Origins of Logistic Regression : Tinbergen Institute Discussion Papers / Tinbergen Institute. — 12.2002. — № 02—119/4.
22. *Dahlquist G.* On stability and error analysis for stiff non-linear problems PART I : тех. отч. / CM-P00069396. — 1975.
23. *Dahlquist G. G.* A special stability problem for linear multistep methods // BIT Numerical Mathematics. — 1963. — Т. 3, № 1. — С. 27—43.
24. Development of a computational model for macroscopic predictions of device-induced thrombosis / J. O. Taylor [и др.] // Biomech. Model. Mechanobiol. — 2016. — Дек. — Т. 15, № 6. — С. 1713—1731.
25. Dynamic adaptive moving mesh finite-volume method for the blood flow and coagulation modeling / K. M. Terekhov [и др.] // International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering. — 2023. — Т. 39, № 11. — e3731.
26. Eigen v3 / G. Guennebaud, B. Jacob [и др.]. — 2010. — <http://eigen.tuxfamily.org>
27. *Farrell P. E., Beentjes C. H., Birkisson Á.* The computation of disconnected bifurcation diagrams // arXiv preprint arXiv:1603.00809. — 2016.
28. *Franco J., Gómez I., Rández L.* SDIRK methods for stiff ODEs with oscillating solutions // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 1997. — Т. 81, № 2. — С. 197—209.
29. *Hales T. C.* An overview of the Kepler conjecture. — 2002.
30. *Hochbruck M., Ostermann A.* Exponential integrators // Acta Numerica. — 2010. — Т. 19. — С. 209—286.
31. *Hollevoet D.* Application of exponential fitting techniques to numerical methods for solving differential equations : дис. ... канд. / Hollevoet Davy. — 01.2013.
32. *Jackson S. P.* Arterial thrombosis—insidious, unpredictable and deadly // Nat. Med. — 2011. — Нояб. — Т. 17, № 11. — С. 1423—1436.
33. *Johnson R., Cory B., Short M.* A tunable integration method for the simulation of power system dynamics // IEEE Transactions on Power Systems. — 1988. — Т. 3, № 4. — С. 1530—1537.

34. *Kantorovich L. V.* On Newton's method // Trudy MIAN SSSR. — 1949. — T. 28. — С. 104—144.
35. *Lambert J. D.* Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem. — 1-е изд. — Wiley, 1991.
36. *Lawson J. D.* Generalized Runge-Kutta Processes for Stable Systems with Large Lipschitz Constants // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 1967. — Т. 4, № 3. — С. 372—380.
37. Leading causes of death and disability: a visual summary of global and regional trends 2000-2019. — 12.2020. — URL: <https://www.who.int/data/stories/leading-causes-of-death-and-disability-2000-2019-a-visual-summary> (дата обр. 13.06.2024).
38. *Liniger W.* Global accuracy and A-stability of one- and two-step integration formulae for stiff ordinary differential equations // Conference on the Numerical Solution of Differential Equations, Lecture Notes in Mathematics 109 / под ред. J. L. Morris. — Springer-Verlag, 1969. — С. 188—193.
39. *Liniger W., Willoughby R. A.* Efficient Integration Methods for Stiff Systems of Ordinary Differential Equations // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 1970. — Т. 7, № 1. — С. 47—66.
40. *Liu M., Zhang L., Zhang C.* Study on Banded Implicit Runge-Kutta Methods for Solving Stiff Differential Equations // Mathematical Problems in Engineering. 2019. — Т. 2019.
41. *Lotka A. J.* Elements of physical biology. — Williams & Wilkins, 1925.
42. *Meng-zhao Q., Mei-qing Z.* Symplectic Runge-Kutta algorithms for Hamiltonian systems // Journal of Computational Mathematics. — 1992. — Т. 10. — С. 205—215.
43. *Minchev B., Wright W.* A review of exponential integrators. — 2005. — ЯНВ.

44. *Moore P. K., Petzold L. R.* A stepsize control strategy for stiff systems of ordinary differential equations // *Applied numerical mathematics*. — 1994. — Т. 15, № 4. — С. 449—463.
45. Multi-constituent simulation of thrombus deposition / W.-T. Wu [и др.] // *Sci. Rep.* — 2017. — Февр. — Т. 7. — С. 42720.
46. *Nesterov Y.* A method of solving a convex programming problem with convergence rate $\mathcal{O}(1/k^2)$ // *Dokl. akad. nauk Sssr*, т. 27. — 1983. — С. 543—547.
47. *Ortega J. M., Rheinboldt W. C.* Iterative solution of nonlinear equations in several variables. — SIAM, 2000.
48. *Parallel Finite Volume Computation on General Meshes / Y. Vassilevski [и др.]*. — Springer Nature, 2020.
49. *Pareschi L., Russo G.* Implicit-Explicit Runge-Kutta Schemes and Applications to Hyperbolic Systems with Relaxation // *Journal of Scientific Computing*. — 2005. — ЯНВ. — Т. 25. — С. 129—155.
50. Platelet activation via dynamic conformational changes of von Willebrand factor under shear / D. M. Pushin [и др.] // *PLoS One*. — 2020. — ИЮНЬ. — Т. 15, № 6. — e0234501.
51. *Rahman S. M., Hlady V.* Downstream platelet adhesion and activation under highly elevated upstream shear forces // *Acta Biomater.* — 2019. — ИЮНЬ. — Т. 91. — С. 135—143.
52. *Rasche H.* Haemostasis and thrombosis: an overview // *European Heart Journal Supplements*. — 2001. — Дек. — Т. 3, suppl_Q. — Q3—Q7.
53. *Rumbaut R. E., Thiagarajan P.* Platelet-vessel wall interactions in hemostasis and thrombosis. — San Rafael, Calif. (1537 Fourth Street, San Rafael, CA 94901 USA) : Morgan & Claypool, 2010. — (Synthesis lectures on integrated systems physiology, from molecules to function, #4) ; — Includes bibliographical references (p. 45-67).

54. *Savage B., Saldívar E., Ruggeri Z. M.* Initiation of platelet adhesion by arrest onto fibrinogen or translocation on von Willebrand factor // *Cell*. — 1996. — ЯНВ. — Т. 84, № 2. — С. 289—297.
55. *Schlenkrich S., Walther A., Griewank A.* Application of AD-based quasi-Newton methods to stiff ODEs // *Automatic Differentiation: Applications, Theory, and Implementations*. — Springer, 2006. — С. 89—98.
56. Shear-induced unfolding and enzymatic cleavage of full-length VWF multimers / S. Lippok [и др.] // *Biophys. J.* — 2016. — Февр. — Т. 110, № 3. — С. 545—554.
57. Shear-induced unfolding triggers adhesion of von Willebrand factor fibers / S. W. Schneider [и др.] // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* — 2007. — Май. — Т. 104, № 19. — С. 7899—7903.
58. Shear-mediated platelet activation enhances thrombotic complications in patients with LVADs and is reversed after heart transplantation / F. Consolo [и др.] // *ASAIO J.* — 2019. — Т. 65, № 4. — e33—e35.
59. Shear-mediated platelet activation in the free flow: Perspectives on the emerging spectrum of cell mechanobiological mechanisms mediating cardiovascular implant thrombosis / M. J. Slepian [и др.] // *J. Biomech.* — 2017. — ЯНВ. — Т. 50. — С. 20—25.
60. *Söderlind G.* The logarithmic norm. History and modern theory // *BIT Numerical Mathematics*. — 2006. — Сент. — Т. 46. — С. 631—652.
61. *Sorensen D. C.* Newton's method with a model trust region modification // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. — 1982. — Т. 19, № 2. — С. 409—426.
62. Stroke / G. A. Donnan [и др.] // *The Lancet*. — 2008. — Т. 371, № 9624. — С. 1612—1623.
63. *Takesaki M.* Theory of operator algebras 1. — Springer, 2001. — (Encyclopaedia of mathematical sciences, Operator algebras and non-commutative geometry 124-125, 127, 5-6, 8).

64. Threshold response of initiation of blood coagulation by tissue factor in patterned microfluidic capillaries is controlled by shear rate / F. Shen [и др.] // *Arteriosclerosis, thrombosis, and vascular biology*. — 2008. — Т. 28, № 11. — С. 2035—2041.
65. *Verhulst P.-F.* Notice sur la loi que la population poursuit dans son accroissement 1838.
66. Visualization and analysis of biomaterial-centered thrombus formation within a defined crevice under flow / M. A. Jamiolkowski [и др.] // *Biomaterials*. — 2016. — Июль. — Т. 96. — С. 72—83.
67. *Warren L., McCabe W. L., Smith J.* Unit Operations of Chemical Engineering. — Third. — New York : Mc Graw Hill, 1976. — International Student Edition.
68. *Wolfe P.* Convergence conditions for ascent methods // *SIAM review*. — 1969. — Т. 11, № 2. — С. 226—235.
69. *Wuhsus A. R., Macera N. E., Neeves K. B.* The hydraulic permeability of blood clots as a function of fibrin and platelet density // *Biophys. J.* — 2013. — Апр. — Т. 104, № 8. — С. 1812—1823.
70. *Zlobina K. E., Guria G. T.* Platelet activation risk index as a prognostic thrombosis indicator // *Scientific Reports*. — 2016. — Июль. — Т. 6, № 1. — С. 30508.
71. *Ландау Л., Лифшиц Е.* Теоретическая физика. Том 1. Механика. — ЛитРес, 2022.
72. *Пантелеев М. А., Атауллаханов Ф. И.* Свертывание крови: биохимические основы // *Клиническая онкогематология*. — 2008. — Т. 1, вып. 1. — С. 50—62.
73. Применение проточных систем в лабораторной диагностике для интегральной оценки системы гемостаза / О. Ушакова [и др.] // *Вопросы гематологии/онкологии и иммунопатологии в педиатрии*. — 2018. — Т. 17, вып. 1. — С. 117—129.

74. Роль фактора фон Виллебранда в патологии гомеостаза / Ю. Автаева [и др.] // Атеротромбоз. — 2022. — Т. 12, № 2. — С. 76—99.

75. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений: жёсткие и дифференциально-алгебраические задачи / пер. Е. Л. Старостиной [и др.]. — 2-е изд. — Мир, 1999.