

Комбинированный алгоритм третьего порядка для решения жестких задач*

А. Е. НОВИКОВ¹, Е. А. НОВИКОВ²

¹*Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*

²*Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, Россия*

e-mail: aenovikov@bk.ru, novikov@icm.krasn.ru

Построены явная трехстадийная схема типа Рунге—Кутты и L -устойчивый $(3,2)$ -метод третьего порядка точности для решения жестких задач. Разработан алгоритм интегрирования переменного шага, в котором выбор эффективной численной схемы осуществляется на каждом шаге с применением неравенства для контроля устойчивости. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность предложенного алгоритма.

Ключевые слова: жесткая задача, явный метод, (m,k) -метод, L -устойчивость, контроль точности и устойчивости.

Введение

Во многих важных приложениях возникает проблема численного решения задачи Коши для жестких дифференциальных уравнений [1]. Основные тенденции при построении численных методов связаны с расширением их возможностей для решения систем все более высокой размерности. Для решения жестких задач обычно применяются L -устойчивые методы, при реализации которых возникает необходимость решения линейных систем алгебраических уравнений. Это выполняется с применением LU -разложения некоторой матрицы размерностью, совпадающей с размерностью исходной системы. Декомпозиция матрицы осуществляется с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице. В случае большой размерности исходной задачи время декомпозиции фактически полностью определяет общие вычислительные затраты. Для повышения эффективности расчетов в ряде алгоритмов используется замораживание матрицы Якоби, т.е. применение одной матрицы на нескольких шагах интегрирования [2, 3]. Наиболее успешно данный подход реализуется в алгоритмах интегрирования на основе численных схем, где стадии вычисляются с участием матрицы Якоби в некотором итерационном процессе. В этом случае матрица Якоби не влияет на порядок точности численной схемы, а определяет только сходимость итераций, и поэтому необходимость в ее пересчете возникает при значительном замедлении скорости сходимости итерационного процесса.

В алгоритмах интегрирования на основе известных безытерационных методов, к которым относятся методы типа метода Розенброка [4] и их различные модификации [1], матрица Якоби влияет на порядок точности численной схемы, в связи с чем возникают трудности с ее замораживанием. Если вопрос об использовании одной матрицы на

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 11-01-00106 и 11-01-00224).

нескольких шагах интегрирования оставить не решенным, то заведомо нужно ограничиться задачами небольшой размерности. В работах [5, 6] доказано, что максимальный порядок точности методов типа метода Розенброка равен двум, если в алгоритме интегрирования одна матрица Якоби применяется на нескольких шагах интегрирования. Некоторым аналогом замораживания матрицы Якоби является применение в расчетах алгоритмов интегрирования на основе явных и L -устойчивых методов с автоматическим выбором численной схемы. В этом случае эффективность алгоритма может быть повышена за счет расчета переходного участка, соответствующего максимальному собственному числу матрицы Якоби, явным методом. В качестве критерия выбора эффективной численной формулы естественно применять неравенство для контроля устойчивости [7, 8].

В настоящей работе на основе явного метода типа Рунге—Кутты и L -устойчивого $(3,2)$ -метода третьего порядка точности построен комбинированный алгоритм переменного шага, в котором выбор эффективной численной формулы осуществляется по устойчивости. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность предложенного алгоритма интегрирования.

1. Класс (m, k) -методов решения жестких задач

Рассмотрим задачу Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

где y и f — вещественные N -мерные вектор-функции, t — независимая переменная. Изучение автономной системы (1) не снижает общности. В случае неавтономной задачи введением дополнительной переменной ее всегда можно привести к автономному виду.

В методах типа метода Розенброка матрица Якоби введена в численную формулу, что приводит на каждом шаге к необходимости решения линейных систем алгебраических уравнений. Это существенно упрощает программную реализацию алгоритмов интегрирования, но возникают проблемы с использованием одной матрицы Якоби на нескольких шагах интегрирования. Заметим, что в неявных и полуявных методах типа метода Рунге—Кутты необходим итерационный процесс типа ньютоновского, что приводит к более сложному алгоритму интегрирования. Прежде чем описывать класс (m, k) -методов, рассмотрим одностадийный метод типа метода Розенброка

$$y_{n+1} = y_n + pk_1, \quad D_n k_1 = hf(y_n), \quad D_n = E + ahf'_n, \quad (2)$$

где E — единичная матрица, $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ — матрица Якоби системы (1), k_1 — стадия метода, a и p_1 — коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (2). Разлагая стадию k_1 в ряд Тейлора и подставляя в первую формулу (2), получим представление приближенного решения y_{n+1} в виде ряда Тейлора по степеням h . Разложение точного решения $y(t_{n+1})$ в ряд Тейлора в окрестности точки t_n до членов с h^4 включительно имеет вид

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) = & y(t_n) + hf + \frac{1}{2}h^2 f' f + \frac{1}{6}h^3 (f'^2 f + f'' f^2) + \\ & + \frac{1}{24}h^4 (f'^3 f + f' f'' f^2 + 3f'' f' f^2 + f''' f^3) + O(h^5), \end{aligned} \quad (3)$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$. При условии $y_n = y(t_n)$, сравнивая полученное представление приближенного решения y_{n+1} с рядом Тейлора для точного решения $y(t_{n+1})$, получим, что схема (2) будет иметь второй порядок точности, если выполнены соотношения $p_1 = 1$ и $ap_1 = 0.5$ или $p_1 = 1$ и $a = 0.5$. Применяя (2) для решения тестовой задачи $y' = \lambda y$, $y(0) = y_0$, $t \geq 0$, получим $y_{n+1} = Q(z)y_n$, где $z = h\lambda$, а функция устойчивости $Q(z)$ имеет вид $Q(z) = [1 + (p_1 - a)z]/(1 - az)$. Отсюда с учетом условий порядка следует, что одностадийный метод типа метода Розенброка второго порядка точности является A -устойчивым. Требование L -устойчивости приводит к соотношению $p_1 = a$, которое противоречит второму порядку. Обычно от второго порядка отказываются в пользу L -устойчивости.

Теперь рассмотрим численную формулу следующего вида:

$$y_{n+1} = y_n + b_1 k_1 + b_2 k_2, \quad D_n k_1 = hf(y_n), \quad D_n k_2 = k_1. \quad (4)$$

Разлагая k_1 и k_2 в ряды Тейлора и подставляя в первую формулу (4), получим

$$y_{n+1} = y_n + (b_1 + b_2)hf_n + a(b_1 + 2b_2)h^2 f'_n f_n + O(h^3).$$

Нетрудно видеть, что схема (4) будет иметь второй порядок точности, если $b_1 + b_2 = 1$ и $a(b_1 + 2b_2) = 0.5$, где параметр a удовлетворяет условию L -устойчивости $b_1 = a$, которое с учетом условий порядка переписывается в виде $a^2 - 2a + 0.5 = 0$. В результате имеем коэффициенты $b_1 = a$ и $b_2 = 1 - a$, при которых схема (4) имеет второй порядок точности и является L -устойчивой. Уравнение $a^2 - 2a + 0.5 = 0$ имеет два корня: $a_1 = 1 - 0.5\sqrt{2}$ и $a_2 = 1 + 0.5\sqrt{2}$. В расчетах обычно применяется параметр $a = a_1$, так как в этом случае величина коэффициента в локальной ошибке меньше.

При большой размерности исходной задачи (1) основные вычислительные затраты приходятся на декомпозицию матрицы D_n (порядка N^3 арифметических операций). На фоне декомпозиции обратный ход в методе Гаусса (порядка N^2 арифметических операций) и время вычисления функции f оказываются незначительными. Метод (4) по вычислительным затратам отличается от (2) на один дополнительный обратный ход метода Гаусса. В то же время схема (4) обладает L -устойчивостью и в отличие от численной формулы (2) имеет второй порядок. По этой причине она эффективнее (2). Более того, для метода (4) легко построить неравенство для контроля точности вычислений, которое имеет вид $\|k_2 - k_1\| \leq \varepsilon$ [9], где ε — требуемая точность интегрирования, $\|\cdot\|$ — некоторая норма в R^N .

Рассмотрение стадий вида $D_n k_2 = k_1$ привело к идеи (m, k) -методов [10], которые определяются следующим образом. Пусть Z есть множество целых чисел и заданы $m, k \in Z$, $k \leq m$. Обозначим через M_m множество чисел $i \in Z$, $1 \leq i \leq m$, а через M_k и J_i , $1 < i \leq m$ — подмножества из M_m вида $M_k = \{m_i \in M_m | 1 = m_1 < m_2 < \dots < m_k \leq m\}$ и $J_i = \{m_{j-1} \in M_m | j > 1, m_j \in M_k, m_j \leq i\}$. Рассмотрим следующие численные схемы:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^m p_i b_i, \\ D_n b_i &= hf \left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} b_j \right) + \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} b_j + h f'_n \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} b_j, \quad i \in M_k, \\ D_n b_i &= b_{i-1} + \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} b_j + h f'_n \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} b_j, \quad i \in M_{m-k}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $M_{m-k} = M_m \setminus M_k$, b_i , $1 \leq i \leq m$, — стадии метода; a , p_i , β_{ij} , α_{ij} и c_{ij} — постоянные коэффициенты; h — шаг интегрирования; E — единичная матрица; $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ — матрица Якоби системы (1); k — количество вычислений функции f на шаге; m — число стадий или количество обратных ходов в методе Гаусса. На каждом шаге интегрирования осуществляются одно вычисление матрицы Якоби и одна декомпозиция матрицы D_n . Допускается аппроксимация матрицы Якоби f'_n матрицей A_n вида $A_n = f'_n + hB_n + O(h^2)$, где матрица B_n не зависит от величины шага интегрирования. Так как k и m полностью определяют затраты на шаг, а набор чисел m_1, \dots, m_k из множества M_k только распределяет их внутри шага, то методы типа (5) названы (m, k) -методами. Отметим, что при $k = m$ и $\alpha_{ij} = c_{ij} = 0$ методы (5) совпадают со схемами типа схемы Розенброка [4], а при $k = m$ и $\alpha_{ij} = 0$ — с ROW-методами [1]. В отличие от ROW-методов в схемах (5) более точно определены затраты на шаг интегрирования и более правильно описана область определения коэффициентов численных формул, что упрощает их исследование и делает предпочтительнее.

При рассмотрении методов такого типа в основном рассматривался случай $k = m$, когда число стадий и количество вычислений правой части задачи (1) совпадают. В случае схем (5) при $m > k$ можно построить численные схемы более высокого порядка точности [11]. Основное отличие приведенных здесь методов (5) от существующих численных формул заключается в том, что в них стадия метода не связывается с обязательным вычислением правой части исходной задачи (1), за счет чего свойства данных методов могут быть улучшены.

2. L-устойчивый (3,2)-метод

Рассмотрим (5) при $m = 3$, т. е. численную формулу вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ D_n k_1 &= h f(y_n), \quad D_n k_2 = k_1, \\ D_n k_3 &= h f(y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2) + \alpha_{32} k_2, \end{aligned} \tag{6}$$

где матрица D_n определена в (5). Разложим стадии k_i , $1 \leq i \leq 3$, в ряды Тейлора по степеням h и подставим в первую формулу (6). В результате получим следующее соотношение:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + [p_1 + p_2 + (1 + \alpha_{32})p_3]h^2 h f_n + \\ &+ [ap_1 + 2ap_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32})p_3]h^2 f'_n f_n + \\ &+ [a^2 p_1 + 3a^2 p_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32})p_3]h^3 f'^2_n f_n + \\ &+ \frac{1}{2}(\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3 h^3 f''_n f_n^2 + \frac{1}{6}[(\beta_{31} + \beta_{32})^3 p_3]h^4 f'''_n f_n^3 + \\ &+ a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})p_3 h^4 f''_n f'_n f_n^2 + \\ &+ [a^3 p_1 + 4a^3 p_2 + (a^3 + 3a^2\beta_{31} + 6a^2\beta_{32} + 10a^3\alpha_{32})p_3]h^4 f'^3_n f_n + \\ &+ \frac{1}{2}a(\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3 h^4 f'_n f''_n f_n^2 + O(h^5). \end{aligned} \tag{7}$$

Ряд Тейлора для точного решения $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n имеет вид (3). Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая ряды для точного и приближенного решений до членов с h^3 включительно, найдем условия третьего порядка точности схемы (6):

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + (1 + \alpha_{32})p_3 &= 1, \\ ap_1 + 2ap_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32})p_3 &= \frac{1}{2}, \\ a^2p_1 + 3a^2p_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32})p_3 &= \frac{1}{6}, \\ (\beta_{31} + \beta_{32})^2p_3 &= \frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (8)$$

Положим в системе (8) коэффициенты a , β_{31} и β_{32} свободными, и исследуем ее на совместность. Значение p_3 выразим из последнего уравнения (8). Умножим первое соотношение (8) на $-a$ и сложим со вторым. Затем умножим первое уравнение на $-a^2$ и сложим с третьим. В результате имеем

$$\begin{aligned} ap_2 + 2a\alpha_{32}p_3 &= \frac{1}{2} - a - \beta p_3, \\ 2a^2p_2 + 5a^2\alpha_{32}p_3 &= \frac{1}{6} - a^2 - a(2\beta_{31} + 3\beta_{32})p_3, \end{aligned}$$

где $\beta = \beta_{31} + \beta_{32}$. Разрешая данную линейную систему относительно p_2 и α_{32} , значение p_1 определим из первого соотношения (8). В результате можно записать

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{\beta^2(18a^2 - 9a + 1) + 2a(\beta_{31} - a)}{6a^2\beta^2}, \\ p_2 &= \frac{\beta^2(-18a^2 + 15a - 2) + 2a(\beta_{32} - \beta_{31})}{6a^2\beta^2}, \\ p_3 &= \frac{1}{3\beta^2}, \quad \alpha_{32} = \frac{\beta^2(6a^2 - 6a + 1) - 2a\beta_{32}}{2a^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Исследуем устойчивость схемы (6) на линейном скалярном уравнении $y' = \lambda y$. Применив (6) для решения данного уравнения, получим $y_{n+1} = Q(z)y_n$, где $z = h\lambda$, а функция устойчивости $Q(z)$ записывается в виде

$$\begin{aligned} Q(z) &= \frac{(-a^3 + a^2p_1 + a^2p_3 - a\beta_{31}p_3)z^3}{(1 - az)^3} + \\ &+ \frac{[3a^2 - 2ap_1 - ap_2 + (\beta_{31} + \beta_{32} - 2a)p_3]z^2}{(1 - az)^3} + \\ &+ \frac{[-3a + p_1 + p_2 + (1 + \alpha_{32})p_3]z + 1}{(1 - az)^3}. \end{aligned}$$

Из вида $Q(z)$ следует, что для L -устойчивости схемы (6) необходимо выполнение соотношения $a^2 - a(p_1 + p_3) + \beta_{31}p_3 = 0$. Подставляя сюда коэффициенты (9), получим кубическое уравнение относительно параметра a

$$6a^3 - 18a^2 + 9a - 1 = 0. \quad (10)$$

Сравнивая представление приближенного и точного решений до членов с h^4 включительно, видим, что локальная ошибка будет минимальной, если

$$(\beta_{31} + \beta_{32})^3 p_3 = \frac{1}{4}, \quad a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})p_3 = \frac{1}{24}.$$

Теперь отсюда и (9) получим набор коэффициентов

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{130a^2 - 33a + 6}{54a^2}, & p_2 &= \frac{-54a^2 + 21a - 4}{18a^2}, & p_3 &= \frac{16}{27}, \\ \beta_{31} &= \frac{48a - 3}{32a}, & \beta_{32} &= \frac{3 - 24a}{32a}, & \alpha_{32} &= \frac{54a^2 - 30a + 6}{32a^2}, \end{aligned}$$

при которых локальная ошибка $\delta_{n,3}$ схемы (6) имеет вид

$$\delta_{n,3} = \frac{1 - 12a + 36a^2 - 24a^3}{24} h^4 f'^3 f + \frac{1 - 4a}{24} h^4 f' f'' f^2 + O(h^5), \quad (11)$$

где значение a определяется из условия L -устойчивости (10). Уравнение (10) имеет три вещественных корня:

$$a_1 = 2.40514957850286, \quad a_2 = 0.158983899988677, \quad a_3 = 0.435866521508459.$$

Согласно [12] схема (6) будет A -устойчивой, если параметр a удовлетворяет неравенству $1/3 \leq a \leq 1.0685790$, поэтому выбираем корень $a = a_3$. В результате имеем следующий комплект коэффициентов:

$$\begin{aligned} a &= +0.43586652150846, & p_1 &= 0.15902052285216 \cdot 10^1, \\ p_2 &= -0.14930556622438 \cdot 10^1, & p_3 &= 0.59259259259259, \\ \beta_{31} &= 0.12849112162238 \cdot 10^1, & \beta_{32} &= -0.53491121622384, \\ \alpha_{32} &= 0.52356010690630. \end{aligned}$$

Обычно расчеты жестких задач осуществляются с двойной точностью, поэтому данные параметры приведены с четырнадцатью значащими цифрами.

В жестких задачах поведение ошибки определяется элементарным дифференциалом $f'^3 f$. В силу этого согласно [13] при построении оценки аналога глобальной ошибки будем учитывать только первое слагаемое в (11). Для контроля точности вычислений и автоматического выбора величины шага интегрирования используем идею вложенных методов, для чего рассмотрим двухстадийный метод (4) в виде $y_{n+1,1} = y_n + b_1 k_1 + b_2 k_2$, где приближение y_n вычислено по формуле (6). Отметим, что в данной численной формуле применяются стадии метода (6), и поэтому ее применение практически не приводит к увеличению вычислительных затрат. С использованием (3) и (7) нетрудно видеть, что при значениях коэффициентов $b_1 = 0.5(4a - 1)/a$ и $b_2 = 0.5(1 - 2a)/a$ данная схема имеет второй порядок точности, а ее локальная ошибка $\delta_{n,2}$ имеет вид

$$\delta_{n,2} = \frac{6a^2 - 6a + 1}{6} h^3 f'^2 f + O(h^4).$$

Тогда в неравенстве для контроля точности можно применять оценку ошибки ε_n вида

$$\varepsilon_n = \frac{1 - 12a + 36a^2 - 24a^3}{4(6a^2 - 6a + 1)} (y_{n+1} - y_{n+1,1}).$$

Подчеркнем особенность построенной оценки ошибки. Из вида функции устойчивости $Q(z)$ схемы (6) следует, что при $z \rightarrow -\infty$ выполняется соотношение $Q(z) \rightarrow 0$. Для точного решения $y(t_{n+1}) = \exp(z)y(t_n)$ задачи $y' = \lambda y$ выполняется аналогичное свойство. Тогда естественным будет требование стремления к нулю оценки ошибки ε_n при $z \rightarrow -\infty$. Однако для построенной оценки имеет место $\varepsilon_n = O(1)$, так как оценивается только главный член ошибки. Для исправления асимптотического поведения вместо ε_n рассмотрим оценки $\varepsilon_n(j_n)$, $1 \leq j_n \leq 2$, вида [8]

$$\varepsilon_n(j_n) = \frac{1 - 12a + 36a^2 - 24a^3}{4(6a^2 - 6a + 1)} D_n^{1-j_n} (y_{n+1} - y_{n+1,1}).$$

При $j_n = 1$ оценка $\varepsilon_n(j_n)$ совпадает с ε_n и будет A -устойчивой, а при $j_n = 2$ — L -устойчивой. Теперь неравенство для контроля точности имеет вид

$$\|D_n^{1-j_n}(y_{n+1} - y_{n+1,1})\| \leq c\varepsilon, \quad (12)$$

где $c = 4 \cdot |6a^2 - 6a + 1| / |1 - 12a + 36a^2 - 24a^3| \approx 3$, ε — требуемая точность интегрирования, а значение параметра j_n выбирается наименьшим, при котором выполняется неравенство (12). Заметим, что в смысле главного члена оценки $\varepsilon_n(1)$ и $\varepsilon_n(2)$ совпадают. Кроме того, неравенство (12) при $j_n = 2$ проверяется редко, в основном при резком увеличении шага интегрирования. Поэтому применение $\varepsilon_n(j_n)$ вместо ε_n не приводит к значительному росту вычислительных затрат. Более того, за счет применения $\varepsilon_n(j_n)$ вместо ε_n эффективность расчетов повышается примерно на $10 \div 15\%$. Это связано с устранением некоторых повторных вычислений решения, возникающих за счет неправильных свойств оценки ε_n . Норма $\|\xi\|$ в левой части неравенства (12) вычисляется по формуле $\|\xi\| = \max_{1 \leq i \leq N} |\xi_i| / (|y_n^i| + v)$. При выполнении неравенства $|y_n^i| < v$ по i -й компоненте решения контролируется абсолютная ошибка $v\varepsilon$, в противном случае контролируется относительная ошибка ε .

Сделаем некоторые замечания по выбору шага численного дифференцирования. При численном вычислении матрицы Якоби данный шаг r_i , $1 \leq i \leq N$, выбирается по формуле $r_j = \max[r_{\min}, r_{\min}^0 |y_n^j|]$, $1 \leq j \leq N$, где r_{\min} — минимальный шаг численного дифференцирования, зависит от разрядности ЭВМ. При расчетах с двойной точностью величина r_{\min} полагалась равной 10^{-14} . Тогда j -й столбец a_n^j численной матрицы вычисляется по формуле $a_n^j = f(y_1, \dots, y_j + r_j, \dots, y_N) - f(y_1, \dots, y_j, \dots, y_N) / r_j$, т. е. для задания матрицы требуется N вычислений правой части системы уравнений (1).

Оценку максимального собственного числа $w_{n,0} = h\lambda_{n,\max}$ матрицы Якоби системы (1), необходимую для перехода к явной формуле, найдем через ее норму $w_{n,0}$ в виде

$$w_{n,0} = h \left\| \frac{\partial f}{\partial y} \right\| = h \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{\partial f_i(y_n)}{\partial y_j} \right|.$$

Ниже данная оценка будет применяться для автоматического выбора численной схемы.

3. Явный метод третьего порядка

Для численного решения задачи (1) рассмотрим явный трехстадийный метод типа метода Рунге—Кутты вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ k_1 &= hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + \beta_{21} k_1), \\ k_3 &= hf(y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2), \end{aligned} \quad (13)$$

где k_1 , k_2 и k_3 — стадии метода, $p_1, p_2, p_3, \beta_{21}, \beta_{31}, \beta_{32}$ — числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (13). В случае неавтономной системы

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k,$$

схема (13) записывается в виде

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ k_1 &= hf(t_n, y_n), \quad k_2 = hf(t_n + \beta_{21} h, y_n + \beta_{21} k_1), \\ k_3 &= hf(t_n + [\beta_{31} + \beta_{32}] h, y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2). \end{aligned}$$

Ниже для сокращения выкладок будем рассматривать задачу (1). Однако построенные методы можно применять для решения неавтономных задач. Получим соотношения на коэффициенты метода (13) третьего порядка точности. Для этого разложим стадии k_1 , k_2 и k_3 в ряды Тейлора до членов с h^4 включительно. Подставим полученные разложения в первую формулу (13). В результате получим

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + (p_1 + p_2 + p_3)hf_n + [\beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3]h^2f'_n + \\ &\quad + h^3[\beta_{21}\beta_{32}p_3f_n'^2 + \frac{1}{2}(\beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2p_3)f_n''f_n^2] + \\ &\quad + h^4\left[\frac{1}{2}\beta_{21}^2\beta_{32}p_3f_n'f_n''f_n^2 + \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3f_n''f_n'f_n^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{6}(\beta_{31} + \beta_{32})^3p_3f_n'''f_n^3\right] + O(h^5). \end{aligned}$$

Здесь элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n . Точное решение $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n имеет вид (3). Сравнивая полученные ряды для точного и приближенного решений до членов с h^3 включительно при условии $y_n = y(t_n)$, запишем условия третьего порядка точности схемы (13):

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + p_3 &= 1, \\ \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 &= \frac{1}{2}, \\ \beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2p_3 &= \frac{1}{3}, \\ \beta_{21}\beta_{32}p_3 &= \frac{1}{6}. \end{aligned} \quad (14)$$

Локальную ошибку δ_n численной задачи (13) можно вычислить по формуле $\delta_n = y(t_{n+1}) - y_{n+1}$. Учитывая представления $y(t_{n+1})$ и y_{n+1} в виде рядов Тейлора, получим

$$\begin{aligned} \delta_n = h^4 & \left\{ \frac{1}{24} f'^3 f + \left[\frac{1}{24} - \frac{1}{2} \beta_{21}^2 \beta_{32} p_3 \right] f' f'' f^2 + \left[\frac{1}{8} - \beta_{21} (\beta_{31} + \beta_{32}) \beta_{32} p_3 \right] f'' f' f^2 + \right. \\ & \left. + \left[\frac{1}{24} - \frac{1}{6} \beta_{21}^3 p_2 - \frac{1}{6} (\beta_{31} + \beta_{32})^3 p_3 \right] f''' f^3 \right\} + O(h^5). \end{aligned} \quad (15)$$

В нелинейной системе алгебраических уравнений (14) имеются два свободных коэффициента. Исследуем три варианта.

Вариант 1. Положим $\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ и $\beta_{31} = \beta_{32}$. Это означает, что приращения k_2 и k_3 будут вычислены в одной и той же точке $t_n + \beta_{21}h$, причем вклад k_1 и k_2 при определении k_3 учитывается одинаково. Тогда нелинейную систему (14) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} 1) \quad p_1 + p_2 + p_3 &= 1, \quad 2) \quad \beta_{21}(p_2 + p_3) = \frac{1}{2}, \\ 3) \quad \beta_{21}^2(p_2 + p_3) &= \frac{1}{3}, \quad 4) \quad \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

Из второго и третьего уравнений данной системы имеем $\beta_{21} = 2/3$. Из соотношений $\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ и $\beta_{31} = \beta_{32}$ запишем $\beta_{31} = \beta_{32} = 1/3$. Из четвертого уравнения системы получим $p_3 = 3/4$. Из равенства $p_2 + p_3 = 3/4$ имеем $p_2 = 0$. Наконец, из первого соотношения системы получим $p_1 = 1/4$. В результате коэффициенты схемы (13) определяются однозначно:

$$\beta_{21} = \frac{2}{3}, \quad \beta_{31} = \beta_{32} = \frac{1}{3}, \quad p_1 = \frac{1}{4}, \quad p_2 = 0, \quad p_3 = \frac{3}{4}. \quad (16)$$

При данных соотношениях локальная ошибка δ_n схемы (13) имеет вид

$$\delta_n = \frac{1}{216} h^4 (9f'^3 f + f''' f^3 - 3f' f'' f^2 + 3f'' f' f^2) + O(h^5).$$

Вариант 2. Минимизируем локальную ошибку (15). Для этого, учитывая вид (15), вместо (14) рассмотрим расширенную нелинейную систему:

$$\begin{aligned} 1) \quad p_1 + p_2 + p_3 &= 1, \quad 2) \quad \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 = \frac{1}{2}, \\ 3) \quad \beta_{21}^2 p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3 &= \frac{1}{3}, \quad 4) \quad \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6}, \\ 5) \quad \beta_{21}^2\beta_{32}p_3 &= \frac{1}{12}, \quad 6) \quad \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3 = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (17)$$

При $1.5\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ два последних уравнения (17) совпадают. Из четвертого и пятого соотношений (17) имеем $\beta_{21} = 0.5$. Из второго и третьего равенств получим $p_2 = 1/3$ и $p_3 = 4/9$. Из первого уравнения (17) запишем $p_1 = 2/9$, а из четвертого имеем $\beta_{32} = 3/4$. Наконец, из соотношения $\beta_{31} + \beta_{32} = 3/4$ запишем $\beta_{31} = 0$. В результате коэффициенты метода (13) с минимальной локальной ошибкой имеют вид

$$\beta_{21} = \frac{1}{2}, \quad \beta_{31} = 0, \quad \beta_{32} = \frac{3}{4}, \quad p_1 = \frac{2}{9}, \quad p_2 = \frac{1}{3}, \quad p_3 = \frac{4}{9}. \quad (18)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_n схемы (13) можно записать следующим образом:

$$\delta_n = \frac{1}{288} h^4 (12f'^3 f - f''' f^3) + O(h^5).$$

При использовании (13) с наборами коэффициентов (16) и (18) ни одна стадия не вычисляется в точке t_{n+1} . При быстром изменении решения это приводит к понижению точности расчетов.

Вариант 3. Положим $\beta_{21} = 0.5$ и $\beta_{31} + \beta_{32} = 1$. Тогда на каждом шаге приращения k_1 , k_2 и k_3 вычисляются в точках t_n , $t_n + 0.5h$ и $t_n + h$ соответственно. В этом случае условия третьего порядка записываются в виде

$$\begin{aligned} 1) \quad p_1 + p_2 + p_3 &= 1, & 2) \quad \frac{1}{2}p_2 + p_3 &= \frac{1}{2}, \\ 3) \quad \frac{1}{4}p_2 + p_3 &= \frac{1}{3}, & 4) \quad \beta_{32}p_3 &= \frac{1}{3}. \end{aligned}$$

Из второго и третьего уравнений этой системы имеем $p_2 = 2/3$ и $p_3 = 1/6$, из первого и последнего — $p_1 = 1/6$ и $\beta_{32} = 2$. Из равенства $\beta_{31} + \beta_{32} = 1$ следует $\beta_{31} = -1$. В результате коэффициенты метода (13) имеют вид

$$\beta_{21} = \frac{1}{2}, \quad \beta_{31} = -1, \quad \beta_{32} = 2, \quad p_1 = \frac{1}{6}, \quad p_2 = \frac{2}{3}, \quad p_3 = \frac{1}{6}. \quad (19)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_n схемы (13) можно записать следующим образом:

$$\delta_n = \frac{h^4}{24} \left[f'^3 f - f'' f' f^2 - \frac{1}{3} f''' f^3 \right] + O(h^5).$$

4. Контроль точности и устойчивости

Неравенство для контроля точности вычислений метода третьего порядка построим с использованием идеи вложенных методов. Для этого рассмотрим вспомогательную схему

$$y_{n+1,1} = y_n + r_1 k_1 + r_2 k_2,$$

где k_1 и k_2 определены в (13). Потребуем, чтобы данный метод имел второй порядок точности. Разложение приближенного решения $y_{n+1,1}$ в виде ряда Тейлора по степеням h до членов с h^2 включительно имеет вид

$$y_{n+1,1} = y_n + (r_1 + r_2)h f_n + \beta_{21} r_2 h^2 f'_n f_n + O(h^3).$$

Сравнивая ряды для $y(t_{n+1})$ и $y_{n+1,1}$, видим, что требование второго порядка точности будет выполнено, если $r_1 + r_2 = 1$ и $\beta_{21} r_2 = 0.5$. Отсюда получим $r_2 = 0.5/\beta_{21}$ и $r_1 = 1 - r_2$, где значение β_{21} определено в (16), (18) или (19).

С помощью идеи вложенных методов ошибку $\varepsilon_{n,3}$ метода третьего порядка можно оценить по формуле [13]

$$\varepsilon_{n,3} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = (p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3 k_3.$$

Тогда неравенство для контроля точности вычислений запишется в виде

$$\|(p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3k_3\| \leq \varepsilon,$$

где $\|\cdot\|$ — некоторая норма в R^N , ε — требуемая точность интегрирования. В конкретных расчетах как наиболее надежный применялся метод (13) с коэффициентами (19). В этом случае неравенство для контроля точности имеет вид

$$\|k_1 - 2k_2 + k_3\| \leq 6\varepsilon.$$

Неравенство для контроля устойчивости численной формулы (13) построим предложенным в [8] способом. Запишем стадии k_1 , k_2 и k_3 применительно к задаче $y' = Ay$, где A есть матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим

$$k_1 = Xy_n, \quad k_2 = (X + \beta_{21}X^2)y_n, \quad k_3 = [X + (\beta_{31} + \beta_{32})X^2 + \beta_{21}\beta_{32}X^3]y_n,$$

где $X = hA$. Найдем коэффициенты d_1 , d_2 и d_3 из условия выполнения равенства

$$d_1k_1 + d_2k_2 + d_3k_3 = X^3y_n.$$

Легко видеть, что данное требование выполняется при

$$d_1 = \frac{\beta_{31} + \beta_{32} - \beta_{21}}{\beta_{21}^2\beta_{32}}, \quad d_2 = -\frac{\beta_{31} + \beta_{32}}{\beta_{21}^2\beta_{32}}, \quad d_3 = \frac{1}{\beta_{21}\beta_{32}}.$$

Также видно, что

$$\frac{1}{\beta_{21}}(k_2 - k_1) = X^2y_n.$$

Тогда согласно [8] оценку максимального собственного числа $w_{n,3} = h\lambda_{n\max}$ матрицы Якоби системы (13) можно вычислить по формуле

$$w_{n,3} = \beta_{21} \max_{1 \leq i \leq N} (|d_1k_1^i + d_2k_2^i + d_3k_3^i| / |k_2^i - k_1^i|). \quad (20)$$

Интервал устойчивости численной схемы (13) приблизительно равен 2.5. Поэтому для контроля устойчивости можно применять неравенство $w_{n,3} \leq 2.5$.

Полученная оценка (20) является грубой, так как: 1) вовсе не обязательно максимальное собственное число сильно отделено от остальных, 2) в степенном методе применяется мало итераций, 3) дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (1). Поэтому здесь контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. Прогнозируемый шаг h_{n+1} будем вычислять следующим образом. Новый шаг h^{ac} по точности определим по формуле $h^{ac} = q_1h_n$, где h_n есть последний успешный шаг интегрирования, а q_1 , учитывая соотношение $\varepsilon_{n,3} = O(h_n^3)$, задается уравнением $q_1^3\|\varepsilon_{n,3}\| = \varepsilon$. Шаг h^{st} по устойчивости зададим формулой $h^{st} = q_2h_n$, где q_2 , учитывая равенство $w_{n,3} = O(h_n)$, определяется из уравнения $q_2w_{n,3} = 2.5$. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})]. \quad (21)$$

где h_n — последний успешный шаг интегрирования.

Отметим, что формула (21) применяется для прогноза величины шага интегрирования h_{n+1} после успешного вычисления решения с предыдущим шагом h_n и поэтому фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат. Если шаг по устойчивости меньше последнего успешного, то он не будет уменьшен, поскольку причиной этого может быть грубость оценки максимального собственного числа. Однако шаг не будет и увеличен, так как не исключена возможность неустойчивости численной схемы. Если шаг по устойчивости должен быть уменьшен, то в качестве следующего шага будет применяться последний успешный шаг h_n . В результате для выбора шага и предлагаются формула (21), позволяющая стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Собственно говоря, именно наличие данного участка существенно ограничивает возможности применения явных методов для решения жестких задач.

На основе построенных L -устойчивого и явного методов третьего порядков точности легко сформулировать алгоритм переменного шага и структуры. Нарушение неравенства $w_{n,3} \leq 2.5$ вызывает переход с явной численной формулы на схему (6). Передача управления с L -устойчивой схемы явному методу происходит в случае выполнения неравенства $w_{n,0} \leq 2.5$. Нижепостроенный алгоритм переменного шага с автоматическим выбором явной или L -устойчивой численной схемы будем называть MKRK3.

5. Результаты расчетов

Компьютерные вычисления проводились на Intel Core 2 Quad CPU с двойной точностью. Расчеты проводились с точностью $\varepsilon = 10^{-4}$, при которой наиболее эффективны методы третьего порядка. Ниже через ifu и ija обозначены соответственно суммарное число вычислений правой части и количество обращений (декомпозиций) матрицы Якоби задачи (1), позволяющие объективно оценить эффективность алгоритма интегрирования. В качестве первого тестового примера выбрана простейшая модель реакции Белоусова — Жаботинского [14]

$$\begin{aligned} y'_1 &= 77.27(y_2 - y_1 y_2 + y_1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1^2), \\ y'_2 &= (-y_2 - y_1 y_2 + y_3)/77.27, \\ y'_3 &= 0.161(y_1 - y_3), \\ t \in [0, 300], \quad y_1(0) &= 4, \quad y_2(0) = 1.1, \quad y_3(0) = 4, \quad h_0 = 2 \cdot 10^{-3}. \end{aligned} \quad (22)$$

Для данной задачи характерным является наличие на промежутке интегрирования трех участков, на которых решение изменяется быстро. По этой причине шаг выбирается достаточно малым, что позволяет проводить расчеты на данных участках по явной схеме. Вычисления проводились с численной матрицей Якоби. Решение данной задачи алгоритмом MKRK3 вычислено с затратами $ifu = 2518$ и $ija = 411$. При расчетах только по L -устойчивой схеме (6) $ifu = 2501$ и $ija = 701$. Фактическая точность расчетов в конце интервала интегрирования не хуже задаваемой. Из результатов расчетов следует, что по числу декомпозиций матрицы Якоби построенный алгоритм эффективнее L -устойчивого метода (6) примерно в 1.7 раза, в то время как число вычислений правой части задачи (22) для обоих алгоритмов примерно одинаково.

Решение задачи (22) было вычислено явным методом переменного шага (13) с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы с затратами $ifu = 10\,497\,424$. При расчетах без контроля устойчивости $ifu = 13\,250\,508$. Данная задача слишком

жесткая для явных методов. Результаты расчетов приведены здесь с целью демонстрации принципиальной возможности применения явных методов с контролем устойчивости для решения достаточно жестких примеров, которые на некоторых задачах большой размерности могут быть эффективнее L -устойчивых методов [9].

В качестве второго примера выбрано известное уравнение Ван дер Поля

$$\begin{aligned} y'_1 &= y_2, \quad y'_2 = 10^2[(1 - y_1^2)y_2 - y_1], \quad t \in [0, 11], \\ y_1(0) &= 2, \quad y_2(0) = 0, \quad h_0 = 10^{-6}. \end{aligned} \quad (23)$$

Для данной задачи также характерным является наличие участков с быстрым изменением решения, которые можно просчитывать по явной схеме. Расчеты проводились с численной матрицей Якоби. Решение задачи (23) алгоритмом MKRK3 вычислено с затратами $ifu = 19\,432$ и $ija = 5010$. При расчетах только по L -устойчивой схеме (6) $ifu = 18\,670$ и $ija = 5671$. Фактическая точность расчетов в конце интервала интегрирования не хуже задаваемой. Из результатов расчетов следует, что по числу декомпозиций матрицы Якоби построенный алгоритм снова эффективнее L -устойчивого метода (6), хотя преимущество не столь значительно. Число вычислений правой части задачи (23) для обоих алгоритмов примерно одинаковое. Решение задачи (23) было вычислено явным методом переменного шага (13) с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы с затратами $ifu = 22\,030\,302$. При расчетах без контроля устойчивости $ifu = 27\,350\,638$. Задача (23) также слишком жесткая для явных методов.

Заключение

Построенный алгоритм MKRK3 предназначен для расчетов с точностью 10^{-4} и ниже. В этом случае достигается его максимальная эффективность. В MKRK3 с помощью признака можно задавать различные режимы расчета: 1) явным методом с контролем или без контроля устойчивости; 2) L -устойчивым методом с аналитической или численной матрицей Якоби; 3) с автоматическим выбором численной схемы. Все это позволяет применять данный алгоритм для решения как жестких, так и нежестких задач. При расчетах с автоматическим выбором численной схемы вопрос о том, является ли задача жесткой или нет, перекладывается на алгоритм интегрирования.

Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, так как оценка максимального собственного числа матрицы Якоби системы (1) осуществляется через ранее вычисленные стадии и не приводит к росту числа вычислений функции f . Такая оценка получается грубой. Однако применение контроля устойчивости в качестве ограничителя на рост шага позволяет избежать негативных последствий грубости оценки. Более того, в некоторых случаях это приводит к нестандартно высокому повышению эффективности алгоритма. На участке установления за счет контроля устойчивости старые ошибки стремятся к нулю, а новые невелики за счет малости производных решения. В некоторых случаях вместо оценки максимального собственного числа оценивается следующее по порядку. Шаг интегрирования становится больше максимально допустимого и с таким шагом осуществляется интегрирование до тех пор, пока не нарушается неравенство для контроля точности. Как правило, число таких шагов невелико. Однако величина шага может на порядок превышать максимальный шаг по устойчивости. После нарушения неравенства для контроля точности шаг уменьшается до максимально возможного. Такой эффект может

повторяться многократно в зависимости от длины участка установления. В результате средний шаг интегрирования превышает максимально допустимый.

Список литературы

- [1] ХАЙРЕН Э., ВАННЕР Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.
- [2] BYRNE G.D., HINDMARSH A.C. ODE solvers: a review of current and coming attractions // J. Comput. Phys. 1987. No. 70. P. 1–62.
- [3] СОВРЕМЕННЫЕ численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред Дж. Холла и Дж. Уатт. М.: Мир, 1979. 312 с.
- [4] ROSENBROCK H.H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. 1963. No. 5. P. 329–330.
- [5] Новиков Е.А., Новиков В.А., Юматова Л.А. О повышении эффективности алгоритма интегрирования на основе формулы типа метода Розенброка второго порядка точности за счет замораживания матрицы Якоби. Новосибирск, 1985. (Препр. АН СССР. Сиб. отд-ние. ВЦ. № 592).
- [6] Новиков Е.А., Двинский А.Л. Замораживание матрицы Якоби в методах типа метода Розенброка // Вычисл. технологии. 2005. Т. 10. С. 108–114.
- [7] Новиков В.А., Новиков Е.А. Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // Докл. АН СССР. 1984. Т. 277, № 5. С. 1058–1062.
- [8] Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997. 197 с.
- [9] Новиков А.Е., Новиков Е.А. Численное решение жестких задач с небольшой точностью // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, № 1. С. 46–56.
- [10] Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И. Одношаговые методы решения жестких систем // Докл. АН СССР. 1988. Т. 301, № 6. С. 1310–1314.
- [11] Новиков Е.А. Исследование $(m, 2)$ -методов решения жестких систем // Вычисл. технологии. 2007. Т. 12, № 5. С. 103–115.
- [12] ДЕМИДОВ Г.В., ЮМАТОВА Л.А. Исследование некоторых аппроксимаций в связи с А-устойчивостью полуявных методов // Численные методы механики сплошной среды. 1977. Т. 8, № 3. С. 68–79.
- [13] ДЕМИДОВ Г.В., Новиков Е.А. Оценка ошибки одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // Там же. 1985. Т. 16, № 1. С. 27–42.
- [14] ENRIGHT W.H., HULL T.E. Comparing numerical methods for the solutions of systems of ODE's // BIT. 1975. Vol. 15. P. 10–48.