УДК 519.622

АЛГОРИТМ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ ЗАДАЧ

Новиков А.Е.
Научный руководитель – доцент Кнауб Л.В.

Сибирский федеральный университет

Во многих важных приложениях возникает проблема численного решения жестких задач [1]. Основные тенденции при построении численных методов связаны с расширением их возможностей для решения систем высокой размерности. Для решения жестких задач обычно применяются L-устойчивые методы. При реализации таких численных схем на каждом шаге решается линейная система алгебраических уравнений с применением LU-разложения некоторой матрицы, размерность которой совпадает с размерностью вектора решения. Решение осуществляется с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице. При большой размерности исходной задачи общие вычислительные затраты фактически полностью определяются временем декомпозиции данной матрицы. Сокращения вычислительных затрат достигают за счет замораживания, то есть применения одной матрицы на нескольких шагах интегрирования. Наиболее естественно это осуществляется в итерационных методах решения обыкновенных дифференциальных уравнений, где данная матрица не влияет на порядок точности численной схемы, а только определяет скорость сходимости итерационного процесса. Для безытерационных методов, к которым относятся методы типа Розенброка [2] и их различные модификации [3], вопрос о замораживании или какой-либо другой аппроксимации матрицы Якоби значительно более сложный. Известно, что максимальный порядок точности методов типа Розенброка с замораживанием матрицы Якоби равен двум [4]. Следует отметить, что безытерационные методы обладают хорошими свойствами точности и устойчивости, а также просты с точки зрения реализации и, как следствие, привлекательны для многих вычислителей. В [5] предложен новый класс одношаговых численных схем, которые были названы (m,k)-методами. Они столь же просты при реализации, как и методы типа Розенброка. Однако (m,k)-методы обладают более хорошими свойствами точности, и, что более существенно, достаточно просто реализуются с замораживанием матрицы Якоби [6].

Здесь построен L-устойчивый (3,2)-метод третьего порядка точности для решения жестких задач. Получено неравенство для контроля точности вычислений, основанное на оценке аналога глобальной ошибки. Оценка осуществляется с привлечением ранее вычисленных стадий, что позволяет выбирать величину шага интегрирования фактически без увеличения вычислительных затрат. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность алгоритмов интегрирования.

Рассмотрим задачу Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$y' = f(y),\ \ y(t_0) = y_0,\ \ t_0 \le t \le t_k, \qquad (1)$$

где y и f – вещественные N-мерные вектор-функции, t – независимая переменная. Рассмотрение автономной системы (1) не снижает общности. В случае неавтономной задачи $y'=f(t,y)$, $y(t_0)=y_0$ введением дополнительной переменной $y'_{N+1}=1$, $y_{N+1}(t_0)=t_0$ ее всегда можно привести к автономному виду. Для решения (1) будем применять одношаговую численную формулу вида

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3,$$
$$D_n k_1 = hf(y_n),\ D_n k_2 = k_1, \qquad (2)$$
$$D_n k_3 = hf(y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2) + \alpha_{32} k_2,$$

где $D_n=E-ahf'_n$, E – единичная матрица, $f'_n=\partial f(y_n)/\partial y$ – матрица Якоби задачи (1), a, p_1, p_2, p_3, β_{31}, β_{32}, α_{32} – числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (2). Для построения метода третьего порядка разложим стадии k_i, $1 \le i \le 3$, в ряды Тейлора по степеням h, и подставим в первую формулу (2). В результате получим ряд Тейлора для приближенного решения y_{n+1}, то есть

$$y_{n+1} = y_n + [p_1 + p_2 + (1+\alpha_{32}) p_3] hf_n +$$
$$+[ap_1 + 2ap_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32}) p_3] h^2 f'_n f_n +$$
$$+[a^2 p_1 + 3a^2 p_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32}) p_3] h^3 f'^2_n f_n +$$
$$+[(\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3] h^3 f''_n f_n^2 + O(h^4).$$

Ряд Тейлора для точного решения $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + \frac{1}{2} h^2 f'f + \frac{1}{6} h^3 (f'^2 f + f'' f^2) + O(h^4).$$

Полагая $y_n=y(t_n)$ и сравнивая ряды для точного $y(t_{n+1})$ и приближенного y_{n+1} решений до членов с h^3 включительно, получим условия третьего порядка точности схемы (2)

$$p_1 + p_2 + (1+\alpha_{32}) p_3 = 1,$$
$$ap_1 + 2ap_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32}) p_3 = \frac{1}{2}, \qquad (3)$$
$$a^2 p_1 + 3a^2 p_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32}) p_3 = \frac{1}{6},$$
$$(\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3 = \frac{1}{3}.$$

Положим в (3) коэффициенты a, β_{31} и β_{32} свободными, и исследуем ее на совместность. Значение p_3 выразим из последнего уравнения (3). Умножим первое соотношение (3) на −a и сложим со вторым. Затем умножим первое уравнение на $-a^2$ и сложим с третьим. В результате имеем

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

где $\beta=\beta_{31}+\beta_{32}$. Разрешая данную линейную систему относительно p_2 и α_{32}, значение p_1 определим из первого соотношения (3). В результате можно записать

$$p_1 = \frac{\beta^2 (18a^2 - 9a + 1) + 2a(\beta_{31} - a)}{6a^2\beta^2},$$
$$p_2 = \frac{\beta^2 (-18a^2 + 15a - 2) + 2a(\beta_{32} - \beta_{31})}{6a^2\beta^2}, \qquad (4)$$
$$p_3 = \frac{1}{3\beta^2},\ \ \alpha_{32} = \frac{\beta^2 (6a^2 - 6a + 1) - 2a\beta_{32}}{2a^2}.$$

Исследуем устойчивость схемы (2) на линейном скалярном уравнении $y'=\lambda y$, $Re(\lambda)<0$, где смысл λ − некоторое собственное число матрицы Якоби задачи (1). Применяя (2) для решения данного уравнения, получим $y_{n+1}=Q(z)y_n$, $z=h\lambda$, где функция устойчивости Q(z) записывается следующим образом

$$Q(z) = \frac{[-a^3 + a^2 p_1 + a^2 p_3 - a\beta_{31} p_3] z^3 + [3a^2 - 2ap_1 - ap_2 + (\beta_{31} + \beta_{32} - 2a) p_3] z^2}{(1-az)^3} +$$

$$+\frac{[-3a+p_1+p_2+(1+\alpha_{32})p_3]z+1}{(1-az)^3}.$$

Из вида Q(z) следует, что для L-устойчивости схемы (2) необходимо выполнение соотношения $a^2-a(p_1+p_3)+\beta_{31}p_3=0$. Подставляя сюда коэффициенты (4), получим кубическое уравнение относительно параметра a, которое имеет вид $6a^3-18a^2+9a-1$. Данное уравнение имеет три вещественных корня. Согласно [7] схема (2) будет A-устойчивой, если параметр a удовлетворяет неравенству $1/3\le a\le 1/0685790$. Поэтому выбираем корень, равный a=0.435866521508459, вычисленный методом деления отрезка пополам с двойной точностью.

Сравнивая представление приближенного и точного решений до членов с h^4 включительно, видим, что локальная ошибка схемы (2) будет минимальной, если

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

Теперь отсюда и (4) получим набор коэффициентов

$$p_1=\frac{130a^2-33a+6}{54a^2},\ p_2=\frac{-54a^2+21a-4}{18a^2},\ p_3=\frac{16}{27},$$

$$\beta_{31}=\frac{48a-3}{32a},\ \beta_{32}=\frac{3-24a}{32a},\ \alpha_{32}=\frac{54a^2-30a+6}{32a^2},$$

при которых локальная ошибка $\delta_{n,3}$ схемы (2) имеет вид

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

В жестких задачах поведение ошибки определяется элементарным дифференциалом $f'^3 f$. Поэтому согласно [8] при построении оценки аналога глобальной ошибки будем учитывать только первое слагаемое в локальной ошибке $\delta_{n,3}$. Для контроля точности вычислений и автоматического выбора величины шага интегрирования используем идею вложенных методов. Для этого рассмотрим двухстадийный метод следующего вида

$$y_{n+1,1}=y_n+b_1k_1+b_2k_2,\ D_nk_1=hf(y_n),\ D_nk_2=k_1, \tag{5}$$

где приближение y_n вычислено по формуле (2). Отметим, что в численной формуле (5) применяются стадии метода (2), и поэтому (5) практически не приводит к увеличению вычислительных затрат. При значениях коэффициентов $b_1=0.5(4a-1)/a$ и $b_2=0.5(1-2a)/a$ схема (5) имеет второй порядок точности, а ее локальная ошибка $\delta_{n,2}$ имеет вид

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

Тогда с учетом вида локальной ошибки $\delta_{n,3}$ согласно [8] в неравенстве для контроля точности можно применять оценку ошибки $\varepsilon_n(j_n)$ вида

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

Теперь неравенство для контроля точности имеет вид [8]

$$\| D_n^{1-j_n}(y_{n+1}+y_{n+1,1})\| \le c\varepsilon,\ 1\le j_n\le 2. \tag{6}$$

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 (6). Заметим, что в смысле главного члена оценки $\varepsilon_n(1)$ и $\varepsilon_n(2)$ совпадают. Кроме того, неравенство (6) при $j_n=2$ проверяется редко, в основном при резком увеличении шага интегрирования. Поэтому применение $\varepsilon_n(j_n)$ к значительному росту вычислительных затрат не приводит. Норма $\|\xi\|$ в левой части неравенства (6) вычисляется по формуле $\|\mu\|=\max_{1\le i\le N}|\mu_i|/(|y_n^i|+v)$. В случае выполнения неравенства $|y_n^i|<v$ по i-й компоненте

решения контролируется абсолютная ошибка vε, в противном случае контролируется относительная ошибка ε.

Расчеты жестких задач обычно осуществляются с двойной точность, то есть в мантиссе 14 правильных значащих цифр. При численном вычислении матрицы Якоби шаг численного дифференцирования r_i выбирается по формуле $r_j=\max(10^{-14},10^{-7}|y_n^i|)$, $1\le i\le N$. Тогда j-й столбец a_n^j численной матрицы Якоби имеет вид

$$a_n^j = [\, f(y_1,\cdots,y_j + r_j,\cdots,y_N) - f(y_1,\cdots,y_j,\cdots,y_n)] / r_j\,,$$

то есть для задания матрицы требуется N вычислений правой части системы дифференциальных уравнений (1).

Теперь сформулируем алгоритм интегрирования на основе численной формулы (2). Пусть приближение y_n к решению $y(t_n)$ задачи (1) вычислено в точке t_n с шагом h_n. Учитывая, что $\varepsilon_n(j_n)=O(h_n^3)$, $1\le j_n\le 2$, алгоритм формулируется следующим образом.

Шаг 1. Вычисляется матрица Якоби.

Шаг 2. Формируется матрица D_n.

Шаг 3. Вычисляются стадии k_1, k_2 и k_3.

Шаг 4. Вычисляется оценка ошибки $\varepsilon_n(1)$.

Шаг 5. Вычисляется величина q_1 по формуле $q_1^3\|\varepsilon_n(1)\|=c\varepsilon$.

Шаг 6. Если $q_1<1$, то есть требуемая точность не выполнена, то вычисляется $\varepsilon_n(2)$. В противном случае $\varepsilon_n(2)$ полагается равным $\varepsilon_n(1)$.

Шаг 7. Вычисляется значение параметра q_2 по формуле $q_2^3\|\varepsilon_n(2)\|=c\varepsilon$.

Шаг 8. Если $q_2<1$, то h_n полагается равным q_2h_n, и происходит повторное вычисление решения – возврат на шаг 2.

Шаг 9. Вычисляется приближение к решению в точке t_{n+1} по формуле (2).

Шаг 10. Вычисляется значение параметра h_{n+1} по формуле $h_{n+1}=\min(q_1, q_2)h_n$.

Шаг 11. Выполняется следующий шаг интегрирования.

Из результатов расчетов примеров [9] следует, что построенный алгоритм при точности расчетов $\varepsilon=10^{-2}$ примерно в полтора раза эффективнее известного метода Гира в реализации А. Хиндмарша, а при точности расчетов $\varepsilon=10^{-4}$ − эффективнее примерно 1.3 раза. При более высокой точности расчетов метод Гира эффективнее. Это связано с тем, что в состав методов Гира входят схемы до шестого порядка включительно.

[1] Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи / М.: Мир, 1999.

[2] Rosenbrock H.H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. − 1963. − №5. − P. 329−330.

[3] Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений / М.: Мир, 1988.

[4] Новиков В.А., Новиков Е.А., Юматова Л.А. Замораживание матрицы Якоби в методе типа Розенброка второго порядка точности // ЖВМ и МФ. − 1987. − Т. 27. − №3. − С. 385−390.

[5] Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И. Одношаговые безытерационные методы решения жестких систем // ДАН СССР. − 1988. − Т. 301. − №6. − С. 1310−1314.

[6] Новиков А.Е., Новиков Е.А. Численное решение жестких задач с небольшой точностью // Математическое моделирование, 2010, Т. 22, №1,С. 46-56.

[7] Демидов Г.В., Юматова Л.А. Исследование некоторых аппроксимаций в связи с А–устойчивостью полуявных методов // Числ. методы механики сплошной среды. − 1977. − Т.8. − №3. − С. 68–79.

[8] Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем / Новосибирск: Наука, 1997.

[9] Enright W.H., Hull T.E. Comparing numerical methods for the solutions of systems of ODE's // BIT. − 1975. − №15. − P. 10–48.