

КОНСТРУИРОВАНИЕ ОБЛАСТЕЙ УСТОЙЧИВОСТИ МЕТОДОВ ТИПА РУНГЕ-КУТТЫ¹

Рыбков М.В.

научный руководитель д-р физ.-мат. наук Е.А. Новиков
Сибирский федеральный университет

Введение. Для численного решения жестких задач вида

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

где y и f – гладкие вещественные N -мерные вектор функции, t – независимая переменная, предлагается применять явные методы вида

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m p_{mi} k_i, \quad k_i = hf \left(t_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j \right), \quad (2)$$

где k_i , $1 \leq i \leq m$, – стадии метода, p_{mi} , α_{ij} и β_{ij} – коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости схемы (2). Известно, что функцией устойчивости явного m -стадийного метода типа Рунге-Кутты (2) является многочлен степени m . Поэтому область устойчивости таких методов зависит от расположения корней многочлена в комплексной плоскости.

Многочлены устойчивости. Пусть заданы два числа k и m , $k \leq m$. Рассмотрим многочлены вида

$$Q_{m,k}(x) = 1 + \sum_{i=1}^k c_i x^i + \sum_{i=k+1}^m c_i x^i, \quad (3)$$

где коэффициенты c_i , $1 \leq i \leq k$, заданы, а c_i , $k+1 \leq i \leq m$, – свободные. Обычно c_i , $1 \leq i \leq k$, определяются из требований аппроксимации. Поэтому для определенности ниже будем предполагать, что $c_i = 1/i!$, $1 \leq i \leq k$.

Обозначим экстремальные точки (3) через x_1, \dots, x_{m-1} , причем $x_1 > x_2 > \dots > x_{m-1}$. Неизвестные коэффициенты c_i , $k+1 \leq i \leq m$, определим из условия, чтобы многочлен (3) в экстремальных точках x_i , $k \leq i \leq m-1$, принимал заданные значения, то есть

$$Q_{m,k}(x_i) = F_i, \quad k \leq i \leq m-1, \quad (4)$$

где $F(x)$ есть некоторая заданная функция, $F_i = F(x_i)$. Для этого на x_i , $k \leq i \leq m-1$, и c_j , $k+1 \leq j \leq m$, рассмотрим следующую алгебраическую систему уравнений

$$Q_{m,k}(x_i) = F_i, \quad Q'_{m,k}(x_i) = 0, \quad k \leq i \leq m-1, \quad Q'_{m,k} = \sum_{i=1}^m i c_i x^{i-1}. \quad (5)$$

Перепишем (5) в виде, удобном для расчетов на ЭВМ. Для этого обозначим через y , z , g и r векторы с координатами

$$y_i = x_{k+i-1}, \quad z_i = c_{k+i}, \quad g_i = F_{k+i-1} - 1 - \sum_{j=1}^k c_j y_i^j, \quad r_i = -\sum_{j=1}^k j c_j y_i^{j-1}, \quad 1 \leq i \leq m-k, \quad (6)$$

через E_1, \dots, E_5 – диагональные матрицы с элементами на диагонали вида

$$e_1^{ii} = k+i, \quad e_2^{ii} = 1/y_i, \quad e_3^{ii} = \sum_{j=1}^k j c_j y_i^{j-1} + \sum_{j=1}^{m-k} (k+j) z_j y_i^{k+j-1},$$

$$e_4^{ii} = \sum_{j=2}^k j(j-1) c_j y_i^{j-2} + \sum_{j=1}^{m-k} (k+j)(k+j-1) z_j y_i^{k+j-2}, \quad e_5^{ii} = (-1)^{k+i-1}, \quad 1 \leq i \leq m-k, \quad (7)$$

а через A – матрицу с элементами $a^{ij} = y_i^{k+j}$, $1 \leq i, j \leq m-k$. С использованием введенных обозначений задачу (5) можно записать в виде

$$Az - g = 0, \quad E_2 A E_1 z - r = 0. \quad (8)$$

Система (8) плохо обусловлена, что приводит к определенным трудностям при использовании для ее решения метода простой итерации. Для сходимости метода Ньютона требуются хорошие начальные условия, что в данном случае есть трудновыполнимая проблема. Если в (5) положить $F_i = (-1)^i$, $k \leq i \leq m-1$, то есть поставить задачу нахождения полинома с максимальным размером интервала

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 14-01-00047)

устойчивости, то вопрос о вычислении начального условия y^0 решается достаточно просто с использованием значений экстремальных точек многочлена Чебышева, рассматриваемого на отрезке $[-2m^2, 0]$. Их можно вычислить по формуле

$$y_i = m^2 [\cos(i\pi / m) - 1], \quad 1 \leq i \leq m-1. \quad (9)$$

Подставляя (9) в первую формулу (8), получим коэффициенты полинома Чебышева, для которого $|Q_{m1}(x)| \leq 1$ при $x \in [-2m^2, 0]$. При любом k в качестве начальных условий можно взять (9) и, как показывают расчеты, имеется хорошая сходимость. Если же $F_i \neq (-1)^i$, $k \leq i \leq m-1$, то выбор начальных условий является, вообще говоря, искусством.

Опишем способ решения (8), который не нуждается в хороших начальных условиях. Для численного решения (8) используем метод установления, который заключается в том, что для стационарной задачи строится нестационарный процесс, решение которого с течением времени устанавливается к решению исходной задачи. Итак, рассмотрим задачу Коши

$$y' = E_5 (E_2 A E_1 A^{-1} g - r), \quad y(0) = y_0, \quad (10)$$

где элементы матрицы E_5 определены в (7). Ясно, что после определения стационарной точки (10) коэффициенты полинома устойчивости можно вычислить из первой системы (8). Заметим, что при использовании матрицы E_5 все собственные числа матрицы Якоби задачи (10) имеют отрицательные вещественные части, то есть задача (10) устойчивая. Из результатов расчетов следует, что (10) является жесткой задачей. Методы решения таких задач предполагают вычисление матрицы Якоби, что в случае (10) связано с трудностями. Поэтому для ее решения используем метод второго порядка точности с численным вычислением и замораживанием матрицы Якоби.

Реализация алгоритма. Расчеты показали, коэффициент c_m многочлена (3) убывает с ростом m , и, в частности, при $m=13$ и $k=1$ величина c_m порядка 10^{-26} . Из-за ошибок округления продолжить расчет задачи (10) при $m>13$ с двойной точностью проблематично. Чтобы вычислить коэффициенты многочлена устойчивости при более высоких степенях m , алгоритм был реализован с использованием инструментов библиотеки qd.

Библиотека qd позволяет проводить расчеты с более высокой точностью. Если стандартный тип данных double, который позволяет представлять числа с двойной точностью, ограничен 53 битами двоичной мантиссы и обеспечивает точностью около 16 десятичных цифр, то числа типа данных dd_real из библиотеки qd имеют 106-битную мантиссу, что обеспечивает точность уже около 32 десятичных цифр. По сути, число типа dd_real есть программно реализованная сумма двух чисел double. При этом мантисса суммы удлиняется в два раза, но диапазон значений, представимых в новом типе данных, не изменяется и составляет приблизительно от 10^{-308} до 10^{308} , как и в стандартном double. Несмотря на это ограничение, точность представления чисел в этом диапазоне возрастает.

При реализации алгоритма вычисления коэффициентов многочлена (3) с использованием типа данных dd_real основные входные параметры алгоритма – точность интегрирования ε и величина шага численного дифференцирования s_j – не менялись. В качестве начальных значений были выбраны значения экстремальных точек многочлена Чебышева (9). В результате «расширенная» точность представления чисел позволила вычислить коэффициенты многочленов степени $m>13$. Однако уже при $k>2$ и $m>15$ метод интегрирования показывал долгую сходимость к решению, при $k>2$ и $m>20$ метод расходился. Это объясняется

тем, что при фиксированном m с увеличением значения k длина интервала устойчивости сокращается, и корни многочлена (3) располагаются все ближе друг к другу. Например, максимальная длина интервала устойчивости метода при $m=10$ и $k=2$ равна 81.1, а при $m=10$ и $k=9$ – 7.46. Таким образом, начальные условия, вычисленные по формуле (9) с ростом k являются все более грубыми, что приводит к соответствующим вычислительным сложностям.

С помощью реализованного алгоритма были вычислены коэффициенты многочленов устойчивости, соответствующих методам с максимальным интервалом устойчивости. Обозначим через $L_{m,k}$ длину интервала устойчивости вдоль вещественной оси метода с многочленом устойчивости $Q_{m,k}$. Из расчетов следует, что при $k>3$ величины $L_{m,k}$ и $L_{m+1,k+1}$ близки по значению, то есть можно предположить, что корни многочленов $Q_{m,k}$ и $Q_{m+1,k+1}$ располагаются близко. Также задача (10) имеет одинаковую размерность $(m-k)$ как при вычислении коэффициентов многочлена $Q_{m,k}$, так и при вычислении коэффициентов многочлена $Q_{m+1,k+1}$. Данные замечания позволяют сформулировать правило выбора «хороших» начальных условий для решения задачи (10) при любых m и k : 1) при $k=1$ или $k=2$ начальные условия вычисляются как значений экстремальных точек многочлена Чебышева по формуле (9); 2) при $k>2$ для вычисления коэффициентов многочлена $Q_{m+1,k+1}$ в качестве начальных условий выбираются значения, вычисленные на предыдущем «слое», то есть корни многочлена $Q_{m,k}$.

Данное правило, очевидно, обладает тем недостатком, что для вычисления коэффициентов многочлена $Q_{m+1,k+1}$ необходимо вычислить корни многочлена на всех предыдущих слоях. Тем не менее, эксперимент показывает, что при таком выборе начальных условий метод показывает достаточно быструю сходимость. Время вычислений начинает возрастать с ростом размерности задачи $(m-k)$. Также увеличение времени расчета связано с программной реализацией типа данных `dd_real`, операций логарифмирования и извлечения корня в библиотеке `qd`.

Результаты расчетов. Решение задачи (10) с применением инструментов библиотеки `qd` позволило вычислить коэффициенты многочленов устойчивости до степени $m=35$ при различных значениях функции F . Из анализа графических изображений областей устойчивости следует, что форма, размер и структура области устойчивости зависят от расположения корней многочлена устойчивости (3) в комплексной плоскости $\{h\lambda\}$. На расположение корней можно влиять выбором функции F .

Если положить $F_i=(-1)^i$, $k \leq i \leq m-1$, то длина интервала устойчивости методов первого порядка точности известна и определяется как $L_{m,1}=2m^2$. С повышением порядка k метода при фиксированном количестве стадий m длина интервала устойчивости сокращается. Таким образом, расширения области устойчивости метода заданного порядка точности можно добиться увеличением числа стадий. В результате численного эксперимента были получены оценки максимальной длины интервала устойчивости метода в зависимости от параметров k и m , то есть

$$L_{m,2} \approx 0.824 \cdot m^2, L_{m,3} \approx 0.499 \cdot m^2, L_{m,4} \approx 0.354 \cdot m^2, L_{m,5} \approx 0.271 \cdot m^2, \\ L_{m,6} \approx 0.219 \cdot m^2, L_{m,7} \approx 0.182 \cdot m^2, L_{m,8} \approx 0.156 \cdot m^2, L_{m,9} \approx 0.135 \cdot m^2.$$

Заметим, что данные оценки справедливы при $m>15$, а при небольших значениях m они являются грубыми. Данные соотношения позволяют заранее, не прибегая к вычислению коэффициентов многочленов устойчивости, оценить размер интервала устойчивости метода. Данные методы имеют почти многосвязные области устойчивости в форме эллипсов, соприкасающихся в одной точке, центры которых расположены на действительной оси. С ростом k

появляются комплексно сопряженные корни, и область устойчивости растягивается вдоль мнимой оси на тех участках, где они расположены. Длина интервала устойчивости при этом сокращается.

При решении некоторых классов задач не требуется значительное расширение интервала устойчивости. Например, в случае если собственные числа матрицы Якоби имеют большие мнимые части. Тогда шаг интегрирования из условия точности выбирается достаточно малым, и поэтому расширение области устойчивости требуется в основном по мнимой оси. Для построения методов интегрирования с такой областью устойчивости помимо увеличения порядка метода k следует также выбирать значения функции F как $F_i = (-1)^i \mu$, $k \leq i \leq m-1$, $0 < \mu < 1$. Чем меньше μ , тем ближе будут располагаться корни, и область будет вытягиваться вдоль мнимой оси и сокращаться вдоль действительной. Если положить $F_i = \mu$, $k \leq i \leq m-1$, $0 < \mu < 1$, то есть функция F является знакопостоянной, то возможны два случая. При нечетном параметре m один корень многочлена обязательно будет действительным. Тогда расположив действительный корень многочлена между парами комплексно сопряженных корней, можно построить область устойчивости в форме, близкой к прямоугольнику, вытянутому вдоль мнимой оси. Логика выбора μ в этом случае аналогичная.

При четном значении m многочлен будет иметь ровно $m/2$ пар комплексно сопряженных корней. В этом случае с увеличением значения μ длина интервала устойчивости, наоборот, сокращается. В отдельных случаях одна пара комплексно сопряженных корней может перейти в правую полуплоскость, образовав «островки устойчивости». Например, при $k=3$, $m=4$, $F_4=0.1$ область устойчивости односвязная, захватывает мнимую ось и имеет длину интервала устойчивости 3.73. Если положить $F_4=0.5$, то пара корней отрывается, область становится многосвязной и в меньшей степени захватывает мнимую ось, длина интервала устойчивости сокращается до 1.52. Наиболее удачное расположение корней наблюдается, если задать $F_4=0.3$. Построенная область устойчивости изображена на рис. 1.

Таким образом, не только значения k и m , определяющие соответственно порядок точности метода и количество стадий, влияют область устойчивости, но также и заданием значений функции F можно добиться нужной формы и размера области устойчивости. Области устойчивости могут быть получены под конкретный набор задач, если известна информация о примерном расположении собственных чисел матрицы Якоби в комплексной плоскости.

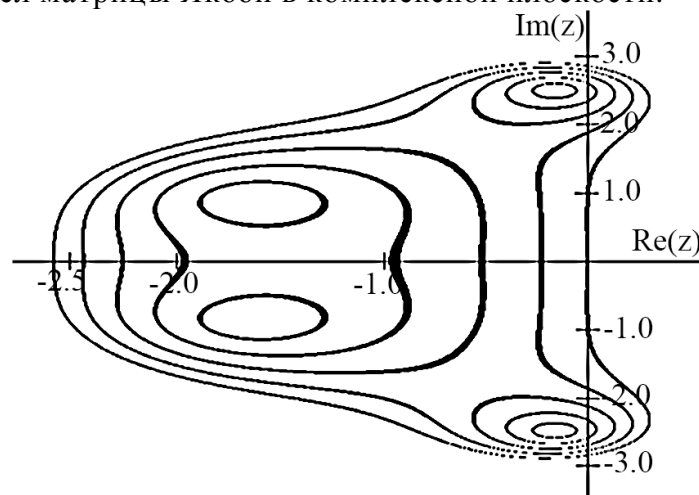


Рис. 1. Область устойчивости при значениях параметров $m=4$, $k=3$, $F=\{0.3\}$, $L_{4,3}=2.60$

Заключение. Предложенный алгоритм вычисления коэффициентов многочленов устойчивости позволяет строить явные методы с заданными областями устойчивости. Реализация алгоритма с повышенной точностью дает возможность вычислить коэффициенты многочленов до степени $m=35$. Выбором параметров k , m и значений функции F можно влиять на форму области устойчивости. Полученные оценки длины интервала устойчивости в зависимости от k и m , а также механизм влияния функции F на области устойчивости позволяют создавать методы с областями устойчивости, которые наиболее адаптированы для интегрирования конкретных задач.