

АЛГОРИТМ ПЕРЕМЕННОГО ПОРЯДКА НА ОСНОВЕ СТАДИЙ МЕТОДА ДОРМАНДА-ПРИНСА

Новиков А.Е.,

научный руководитель чл.-кор. РАН Шайдуров В.В.

Сибирский федеральный университет

Введение. При решении жестких задач большой размерности возникает необходимость использования алгоритмов на основе явных численных схем. Алгоритмы интегрирования на основе неявных или полуявных методов, как правило, используют декомпозицию матрицы Якоби. В данном случае это отдельная трудоемкая задача. В такой ситуации предпочтительнее применять алгоритмы на основе явных формул, если жесткость задачи позволяет за разумное время получить приближение к решению. Обычно алгоритм управления шагом интегрирования строится на контроле точности численной схемы. Это естественно, потому что основным критерием является точность нахождения решения. Однако при применении алгоритмов интегрирования на основе явных формул для решения жестких задач данный подход приводит к потере эффективности и надежности. Это связано с тем, что на участке установления противоречие между точностью и устойчивостью приводит к большому количеству повторных вычислений решения, а шаг выбирается значительно меньше максимально допустимого. Этого можно избежать дополнительным контролем устойчивости численной схемы. Здесь построено неравенство для контроля устойчивости метода Дорманда-Принса восьмого порядка точности. На основе первых семи стадий построен метод первого порядка с расширенной областью устойчивости. Приведены результаты расчетов, подтверждающие повышение эффективности за счет переменного порядка. Работа поддержана грантом РФФИ (проекты 11-01-00106 и 11-01-00224).

Метод Дорманда-Принса. Рассматривается задача Коши для системы 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 – N -мерные вещественные вектор-функции, t – независимая переменная. Для решения (1) используются явные формулы типа Рунге-Кутты

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{13} p_{mi} k_i, \quad k_i = hf(t_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad (2)$$

где h – шаг интегрирования. Коэффициенты α_i и β_{ij} известны и здесь не приводятся в силу их громоздкости. При значениях коэффициентов

$$p_{81} = 14005451/335480064, \quad p_{82} = p_{83} = p_{84} = p_{85} = 0, \quad p_{86} = -59238493/1068277825,$$

$$p_{87} = 181606767/758867731, \quad p_{88} = 561292985/797845732,$$

$$p_{89} = -1041891430/1371343529, \quad p_{8,10} = 760417239/1151165299,$$

$$p_{8,11} = 118820643/751138087, \quad p_{8,12} = -528747749/2220607170, \quad p_{8,13} = 1/4$$

схема (2) имеет восьмой порядок точности.

Контроль точности и устойчивости. Численная формула (2) с коэффициентами

$$p_{71} = 13451932/455176623, \quad p_{72} = p_{73} = p_{74} = p_{75} = p_{7,13} = 0,$$

$$p_{76} = -808719846/976000145, \quad p_{77} = 1757004468/5645159321,$$

$$p_{78} = 656045339/265891186, \quad p_{79} = -3867574721/1518517206,$$

$$p_{7,10} = 465885868/322736535, \quad p_{7,11} = 53011238/667516719, \quad p_{7,12} = 2/45$$

имеет седьмой порядок. Тогда для контроля точности схемы восьмого порядка можно использовать оценку ошибки δ_n вида $\delta_n = \sum_{i=1}^{13} (p_{8i} - p_{7i}) k_i$. В результате для контроля

точности вычислений применяется неравенство $\|\delta_n\| \leq \varepsilon$, где $\|\cdot\|$ – некоторая норма в R^N , а ε – требуемая точность расчетов. Учитывая соотношение $\delta_n = O(h^8)$, шаг h^{ac} по точности выбирается по формуле $h^{ac} = qh$, где значение q находится из уравнения $h^8 \|\delta_n\| = \varepsilon$. Если $q < 1$, то происходит повторное вычисление решения (возврат) с шагом h , равным qh . В противном случае вычисляется приближенное решение, а прогнозируемый шаг полагается равным qh . Неравенство $\|\delta_n\| \leq \varepsilon$ хорошо зарекомендовало себя при решении многих практических задач и ниже будет использоваться здесь. В дальнейшем алгоритм переменного шага на основе схемы (2) с неравенством для контроля точности $\|\delta_n\| \leq \varepsilon$ назовем DP78.

Построим неравенство для контроля устойчивости схемы (2). Для этого применим ее для решения линейной задачи $y' = Ay$ с постоянной матрицей A . Первые три стадии k_1 , k_2 и k_3 схемы (2) применительно к данной задаче имеют вид $k_1 = Xy_n$, $k_2 = (X + X^2/18)y_n$ и $k_3 = (X + X^2/12 + X^3/288)y_n$, где $X = hA$. Нетрудно видеть, что имеют место соотношения $8 \cdot (2k_3 - 3k_2 + k_1) = X^3 y_n / 18$ и $k_2 - k_1 = X^2 y_n / 18$. Теперь оценку максимального собственного числа матрицы Якоби системы (1) можно вычислить степенным методом. Обозначим

$$v_n = 8 \max_{1 \leq i \leq N} \{ |(2k_3 - 3k_2 + k_1)_i| / |(k_2 - k_1)_i| \}. \quad (3)$$

Тогда для контроля устойчивости метода Дорманда-Принса можно применять неравенство $v_n \leq D$, где постоянная D ограничивает интервал устойчивости. Устойчивость методов типа Рунге-Кутты обычно исследуется на скалярном тестовом уравнении $y' = \lambda y$, $\text{Re}(\lambda) < 0$. Легко показать, что интервал устойчивости методов седьмого и восьмого порядков точности приблизительно равен 5. Поэтому положим $D = 5$ в неравенстве $v_n \leq D$. Учитывая, что $v_n = O(h)$, шаг h^{st} по устойчивости можно выбрать по формуле $h^{st} = rh$, где r вычисляется из равенства $rv_n = D$.

Оценка (3) является грубой, потому что: 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. В результате прогнозируемый шаг вычисляется по формуле $h_{n+1} = \max\{h_n, \min\{h^{ac}, h^{st}\}\}$, где h_n есть последний успешный шаг интегрирования. Отметим, что эта формула применяется для прогноза величины шага интегрирования h_{n+1} после успешного вычисления решения с шагом h_n , и поэтому фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат. Если шаг по устойчивости меньше последнего успешного, то он уменьшен не будет, потому что причиной этого может быть грубость оценки максимального собственного числа. Однако шаг не будет и увеличен, потому что 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 предлагается эта формула. Она позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. В дальнейшем алгоритм переменного шага с дополнительным контролем устойчивости численной схемы будем называть DP78ST. Данный алгоритм основан на численной формуле высокого (восьмого) порядка точности и поэтому ориентирован на решение нежестких задач с высокой точностью расчетов, а также задач умеренной жесткости.

Метод первого порядка. На основе стадий схемы (2) построим метод первого порядка точности с более широкой областью устойчивости. Для этого перепишем (2) в виде

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i, \quad y_{n,i} = y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j, \quad k_i = hf(t_n + \alpha_i h, y_{n,i}), \quad (4)$$

где $y_{n,i}$ называют промежуточными или внутренними схемами метода (4). Введем в

рассмотрение матрицу B_m с элементами b_{ij} вида $b_{1j}=1, 1 \leq i \leq m; b_{ki}=0, 2 \leq k \leq m, 1 \leq j \leq i-1$ и $b_{ki} = \sum_{j=k-1}^{i-1} \beta_{ij} b_{k-1,j}, 2 \leq k \leq m, k \leq i \leq m$. Применяя (4) для решения линейного скалярного уравнения $y' = \lambda y, \operatorname{Re}(\lambda) < 0$, получим $y_{n+1} = Q_m(x) y_n$, где $x = h\lambda$, а функция устойчивости $Q_m(x)$ имеет вид $Q_m(x) = \sum_{i=1}^m c_i x^i, c_i = \sum_{j=i}^m b_{ij} p_j$. Обозначим $C_m = (c_1, \dots, c_m)^T$ и $P_m = (p_1, \dots, p_m)^T$. Тогда коэффициенты c_i многочлена устойчивости и коэффициенты p_i метода (4) связаны соотношением $B_m P_m = C_m$. Теперь при заданных β_{ij} и c_i коэффициенты p_i можно определить из линейной системы алгебраических уравнений $B_m P_m = C_m$. Требование первого порядка точности схемы (4) означает $\sum_{i=1}^m p_i = 1$. Поэтому положим $c_1 = 1$. Остальные коэффициенты $c_i, 2 \leq i \leq m$, используем для задания размера и формы области устойчивости. Они могут быть вычислены известным алгоритмом, и поэтому ниже будем считать их заданными.

Известно, что при $c_1 = 1$ для любого m можно так выбрать коэффициенты многочлена устойчивости, что соответствующая область устойчивости будет расширена до $2m^2$ по вещественной оси. Однако в этом случае в экстремальных точках $x_i, 1 \leq i \leq m-1$, имеет место $|Q_m(x_i)| = 1$. Это приводит к тому, что область устойчивости становится "почти" многосвязной. Поэтому во многих случаях коэффициенты $c_i, 2 \leq i \leq m$, выбираются так, чтобы в экстремальных точках выполнялось соотношение $|Q_m(x_i)| = \gamma, \gamma < 1$. За счет подходящего выбора γ можно влиять на величину области по мнимой оси.

При $m=13$ максимальный интервал устойчивости схемы (4) равен 338. Подставляя соответствующие $c_i, 1 \leq i \leq 13$, в $B_m P_m = C_m$, получим коэффициенты $p_i, 1 \leq i \leq 13$, метода (4) первого порядка точности с максимальным интервалом устойчивости. Учитывая, что размер области устойчивости по вещественной оси метода (2) восьмого порядка равен 5, для задач, в которых шаг в основном ограничен по устойчивости, при расчетах методом первого порядка эффективность может быть повышена примерно в 67 раз. Однако из результатов расчетов даже простейших задач следует, что шаг интегрирования существенно меньше максимально возможного. Это связано с тем, что области устойчивости внутренних схем (4) малы, и это при больших шагах приводит к большим погрешностям в промежуточных вычислениях.

Из результатов численных экспериментов следует, что наиболее эффективным является метод первого порядка (4) при $m=7$. Коэффициенты $p_i, 1 \leq i \leq 7$, метода с максимальным интервалом устойчивости, равным 98.0, имеют вид

$$p_1 = -0.43635713190292, p_2 = -0.39757930691747, p_3 = +0.11027283617527 \cdot 10^{+1}, \\ p_4 = +0.72030701125358, p_5 = +0.10208963607634 \cdot 10^{-1}, p_6 = +0.56373316433595 \cdot 10^{-3}, \\ p_7 = +0.12836904213518 \cdot 10^{-3}.$$

Приведем еще один набор коэффициентов $p_i, 1 \leq i \leq 7$,

$$p_1 = -0.41342955189830, p_2 = -0.57548324135785, p_3 = +0.11243725642680 \cdot 10^{+1}, \\ p_4 = +0.85058623738482, p_5 = +0.12991731772814 \cdot 10^{-1}, p_6 = +0.77368430693719 \cdot 10^{-3}, \\ p_7 = +0.18857552359567 \cdot 10^{-3},$$

при которых в экстремальных точках $x_i, 1 \leq i \leq 6$, многочлена устойчивости выполняется условие $|Q_m(x_i)| = 0.9$. В этом случае длина интервала устойчивости почти максимальная и равна приблизительно 90. Область устойчивости построенного метода первого порядка точности по вещественной оси примерно в 18 раз шире области устойчивости численной схемы (2) восьмого порядка. Кроме того, метод первого порядка по числу вычислений правой части задачи (1) почти в два раза дешевле данной численной схемы. Поэтому для задач, в которых шаг ограничен в основном по устойчивости, предполагаемое теоретическое повышение эффективности в 36 раз.

Построим неравенства для контроля точности и устойчивости метода (4). В неравенстве для контроля точности будем применять оценку локальной ошибки $\delta_{n,1}$. С применением разложений точного и приближенного решений в ряды Тейлора получим, что $\delta_{n,1}$ имеет вид $\delta_{n,1}=0.5(1-c_2)(f_i+f_{y'})+O(h^3)$. Нетрудно видеть также, что имеет место соотношение $k_2-k_1=h^2(f_i+f_{y'})+O(h^3)$. Тогда для контроля точности численной формулы (4) можно применять неравенство $|1-2c_2| \cdot \|k_2-k_1\| \leq \varepsilon$, где $\|\cdot\|$ – некоторая норма в R^N , ε – требуемая точность расчетов.

Методы первого порядка с расширенными областями устойчивости эффективны на участках установления, где шаг ограничен по устойчивости. Очевидно, что если шаг ограничен по точности, что характерно для переходных участков, то явный метод Эйлера будет в 7 раз эффективнее построенного метода. Естественно, что при высокой точности расчетов на переходных участках эффективнее будет метод восьмого порядка (2). Существенного повышения эффективности можно достигнуть за счет применения каждого метода на том участке, где он наиболее эффективен. В качестве критерия переключения с метода на метод можно использовать неравенство для контроля устойчивости. При расчетах по методу восьмого порядка переход на численную схему (4) осуществляется при нарушении неравенства $v_n \leq 5$. При расчетах методом первого порядка обратный переход происходит в случае выполнения $v_n \leq 5$. Вычисления методом первого порядка сопровождаются дополнительным (наряду с точностью) контролем неравенства $v_n \leq 90$, а шаг выбирается по формуле $h_{n+1} = \max\{h_n, \min[h^{ac}, h^{st}]\}$.

Результаты расчетов. Расчеты проводились на PC Intel(R) Core(TM) i7-3770S CPU@3.10GHz с двойной точностью. Задаваемая точность расчетов полагалась равной 10^{-6} . Ниже через isa, iwo и ifu обозначены, соответственно, суммарное число шагов интегрирования, число повторных вычислений решения (возвратов) вследствие нарушения требуемой точности расчетов и число вычислений правой части системы (1). Для демонстрации работы построенных алгоритмов рассмотрим пример:

$$y_1' = 77.27(y_2 - y_1 y_2 + y_1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1^2), \quad y_2' = (-y_2 - y_1 y_2 + y_3)/77.27, \\ y_3' = 0.161(y_1 - y_3), \quad t \in [0, 300], \quad y_1(0) = y_3(0) = 4, \quad y_2(0) = 1.1, \quad h_0 = 2 \cdot 10^{-3}.$$

Задача является простейшей моделью реакции Белоусова-Жаботинского. Она слишком жесткая для явных методов и приведена здесь с целью демонстрации принципиальной возможности применения явных методов для решения достаточно жестких задач. Для DP78 вычислительные затраты isa=1 434 938, iwo=778 643, ifu=27 997 910, а для DP78ST следующие – isa=1 437 875, iwo=35 173, ifu=19 114 451. При расчетах с переменным порядком имеем isa=132 180, iwo=166, ifu=930 915. Такая же тенденция сохраняется при интегрировании десяти жестких тестовых примеров.

Заключение. Метод Дорманда-Принса получил широкое распространение для решения нежестких задач. Его программная реализация входит, пожалуй, во все известные библиотеки программ. Численное исследование данного алгоритма проводились многими авторами. В частности, в монографии Э. Хайрера с соавторами отмечено, что метод Дорманда-Принса дает "Прекрасные численные результаты ..." применительно к решению нежестких задач. Здесь ограничились применением данного метода для решения жестких задач и на тестовом примере показали повышение эффективности за счет дополнительного контроля устойчивости, а также за счет расчетов с переменным порядком. Контроль устойчивости позволяет существенно сократить неоправданные возвраты и, тем самым, повысить эффективность расчетов. По сути дела, контроль устойчивости расширяет возможности метода Дорманда-Принса применительно к умеренной жесткости.