АЛГОРИТМ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПЕРЕМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ ЗАДАЧ*

Е. А. Новиков, А. Е. Новиков (Красноярск)

Достоверность численных экспериментов при имитационном моделировании непрерывных систем связана с выбором надежного и эффективного метода решения поставленной задачи. В настоящее время при построении численных методов актуально расширение их возможностей применительно к системам все более высокой размерности [1–2]. Для решения жестких задач используются L-устойчивые схемы, при реализации которых возникает необходимость решения линейных систем алгебраических уравнений [1]. Это обычно выполняется с применением LU-разложения некоторой матрицы, размерность которой совпадает с размерностью исходной задачи. Декомпозиция матрицы осуществляется с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице. В случае большой размерности время декомпозиции фактически полностью определяет общие вычислительные затраты. Для повышения эффективности расчетов используется замораживание матрицы Якоби [3]. Некоторым аналогом замораживания является применение алгоритмов интегрирования на основе явных и L-устойчивых методов с автоматическим выбором численной схемы [4]. 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 [2, 5].

Здесь на основе явных методов типа Рунге–Кутты первого и третьего порядков, а также L-устойчивого (3,2)-метода третьего порядка точности построен алгоритм переменной структуры с автоматическим выбором численной схемы.

Класс (*m*,*k*)-методов. Ниже будет рассматриваться задача Коши вида

$$y' = f(y)\,,\ y(t_0) = y_0\,,\ t_0 \le t \le t_k\,. \tag{1}$$

где y и f – вещественные N-мерные вектор-функции, t – независимая переменная. Пусть Z есть множество целых чисел, и заданы числа $m,k\in Z$, $k\le m$. Обозначим через M_m множество чисел $\{i\in Z|\ 1\le i\le m\}$, а через M_k, M_{m-k} и J_i, $1<i\le m$, подмножества из M_m вида

$$M_k = \{m_i \in M_m \mid 1 = m_1 < m_2 < \ldots < m_k \le m\}\,,\ \ M_{m-k} = M_m\,,\ \ M_k\,,$$

$$J_i = \{m_{j-1} \in M_m \mid j > 1, m_j \in M_k, m_j \le i\}\,,\ 1 < i \le m\,.$$

Рассмотрим следующие численные схемы

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i\,,\ D_n = E + ahf_n'\,;$$

$$D_n k_i = hf(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j) + \sum_{j\in J_i} \alpha_{ij} k_j + hf_n' \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} k_j\,,\ i \in M_k\,; \tag{2}$$

$$D_n k_i = k_{i-1} + \sum_{j\in J_i} \alpha_{ij} k_j + hf_n' \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} k_j\,,\ i \in M_{m-k}\,,$$

где k_i, $1\le i\le m$, называются стадиями 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 сис-

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 11-01-00106 и 11-01-00224).

темы (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, представимой в виде $A_n=f_n'+hB_n+O(h^2)$, где матрица B_n не зависит от величины шага интегрирования. Так как k и m полностью определяют затраты на шаг, а набор чисел $m_1, \ldots, m_k$ из множества M_k только распределяет их внутри шага, то методы типа (2) названы (m,k)-методами.

***L*-устойчивый (3,2)-метод.** Рассмотрим численную формулу вида

$$\begin{aligned} &y_{n+1} = y_n + p_1k_1 + p_2k_2 + p_3k_3;\\ &D_nk_1 = hf(y_n), D_nk_2 = k_1;\\ &D_nk_3 = hf(y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2) + \alpha_{32}k_2, \end{aligned} \tag{3}$$

где матрица D_n определена в (2). Разложим стадии k_i, $1\le i\le 3$, в ряды Тейлора по степеням h и подставим в первую формулу (3), получим ряд Тейлора для приближенного решения y_{n+1}. Полагая $y_n=y(t_n)$ и сравнвая 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 (3), т. е.

$$p_1 + p_2 + (1+\alpha_{32})p_3 = 1,\ \ ap_1 + 2ap_2 + (a+\beta_{31}+\beta_{32}+3a\alpha_{32})p_3 = 1/2;$$

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

Исследуем устойчивость (3). Применяя ее для решения задачи $y'=\lambda y$, $y(0)=y_0$, $\mathrm{Re}(\lambda)<0$, получим $y_{n+1}=Q(z)y_n$, $z=h\lambda$, где функция устойчивости $Q(z)$ записывается в виде

$$Q(z) = (-a^3 + a^2p_1 + a^2p_3 - a\beta_{31}p_3)z^3/(1-az)^3 +$$

$$+\left\{[3a^2 - 2ap_1 - ap_2 + (\beta_{31}+\beta_{32}-2a)p_3]z^2 + [p_1+p_2-3a+(1+\alpha_{32})p_3]z + 1\right\}/(1-az)^3.$$

Из вида $Q(z)$ следует, что для L-устойчивости (3) необходимо выполнение соотношения $a^2-a(p_1+p_3)+\beta_{31}p_3=0$. Подставляя сюда коэффициенты p_i, $1\le i\le 3$, получим кубическое уравнение относительно параметра a, которое имеет вид $a^3-3a^2+3a/2-1/6=0$. Далее, сравнивая представление приближенного и точного решений до членов с h^4 включительно, видим, что локальная ошибка будет минимальной, если

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

В результате получим набор коэффициентов:

$$p_1 = (130a^2 - 33a + 6)/(54a^2), p_2 = (21a - 54a^2 - 4)/(18a^2), p_3 = 16/27,;$$

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

где значение a определяется из условия L-устойчивости $a^3-3a^2+3a/2-1/6=0$. Согласно [6] схема (3) будет A-устойчивой, если параметр a удовлетворяет неравенству $1/3\le a=1.0685790$, поэтому выбираем корень $a=0.435866521508459$. В результате имеем следующий комплект коэффициентов:

$$p_1 = 0.15902052285216\cdot 10^1;\ p_2 = -0.14930556622438\cdot 10^1;\ p_3 = 0.59259259259259;$$

$$\beta_{31} = 0.12849112162238\cdot 10^1;\ \beta_{32} = -0.53491121622384;\ \alpha_{32} = 0.52356010690630.$$

Для контроля точности вычислений и выбора шага интегрирования используем идею вложенных методов. Для этого рассмотрим метод (2) следующего вида:

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

где приближение y_n вычислено по формуле (3). Отметим, что в этой численной схеме применяются стадии метода (3), и поэтому ее использование практически не приводит к увеличению вычислительных затрат. Нетрудно видеть, что при значениях коэффициентов b_1=0.5(4a–1)/a и b_2=0.5(1–2a)/a эта схема имеет второй порядок точности, а ее локальная ошибка $\delta_{n,2}$ имеет вид $\delta_{n,3}=(6a^2-6a+1)h^3f'^2f/6+O(h^4)$. Тогда в неравенстве для контроля точности можно применять оценку ошибки $\varepsilon_n(j_n)$ вида [7]

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

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

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

где $c=|24a^2-24a+4|/|1-12a+36a^2-24a^3|\approx 3$; ε – точность интегрирования, а значение параметра j_n выбирается наименьшим, при котором выполняется данное неравенство.

Оценку максимального собственного числа $w_{n,0}=h\lambda_{n,\max}$ матрицы Якоби системы (1), необходимую для перехода на явную формулу, определим через ее норму $w_{n,0}=h\|\partial f/\partial y\|$. Ниже данная оценка будет применяться для автоматического выбора численной схемы.

Явный метод третьего порядка. Теперь для численного решения задачи (1) рассмотрим явный трехстадийный метод типа Рунге–Кутта вида

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + p_1k_1 + p_2k_2 + p_3k_3, \\ k_1 = hf(y_n),\ k_2 = hf(y_n+\beta_{21}k_1),\ k_3 = hf(y_n+\beta_{31}k_1+\beta_{32}k_2). \end{gathered} \tag{4}$$

Далее для сокращения выкладок будем рассматривать задачу (1), однако построенные ниже методы можно применять для решения неавтономных задач. 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 (4), т. е.

$$p_1+p_2+p_3=1,;\ \beta_{21}p_2+(\beta_{31}+\beta_{32})p_3=1/2;\ \beta_{21}^2p_2+(\beta_{31}+\beta_{32})^2p_3=1/3;\ \beta_{21}\beta_{32}p_3=1/6.$$

Положим β_{21}=1/2 и $\beta_{31}+\beta_{32}$=1. Тогда на каждом шаге приращения k_1, k_2 и k_3 вычисляются в точках t_n, $t_n+h/2$ и t_n+h, соответственно. Такое распределение точек t_i приводит к повышению надежности расчетов. В результате имеем коэффициенты

$$\beta_{21}=1/2;\ \beta_{31}=-1;\ \beta_{32}=2;\ p_1=p_3=1/6;\ p_2=2/3\,.$$

Неравенство для контроля точности вычислений метода третьего порядка построим с использованием идеи вложенных методов. Для этого рассмотрим вспомогательную схему $y_{n+1,1}=y_n+r_1k_1+r_2k_2$, где k_1 и k_2 определены в (4). Требование второго порядка приводит к коэффициентам r_1=0 и r_2=1. Тогда оценку ошибки $\varepsilon_{n,3}$ метода третьего порядка можно оценить по формуле $\varepsilon_{n,3}=\|y_{n+1}-y_{n+1,1}\|=\|k_1-2k_2+k_3\|$, а неравенство для контроля точности вычислений имеет вид $\varepsilon_{n,3}\le\varepsilon$ [7], где $\|\cdot\|$ – некоторая норма в R^N; ε – требуемая точность интегрирования.

Неравенство для контроля устойчивости численной формулы (4) построим предложенным в [2, 5] 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 $k_1=Xy_n$, $k_2=[X+0.5X^2]y_n$ и $k_3=[X+X^2+X^3]y_n$, где $X=hA$. Легко видеть, что $k_1-2k_2+k_3=X^3y_n$ и $2(k_2-k_1)=X^2y_n$. Тогда согласно [2] оценку максимального собственного числа $w_{n,3}=h\lambda_{n,\max}$ матрицы Якоби системы (1) можно вычислить по формуле

$$w_{n,3}=0.5\max_{1\le i\le N}(|k_1^i-2k_2^i+k_3^i|/|k_2^i-k_1^i|).$$

Интервал устойчивости численной схемы (4) приблизительно равен 2.5. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $w_{n,3}\le 2.5$. Полученная оценка 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.

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 $h_{n+1}=\max[h_n,\ \min(h^{ac},\ h^{st})]$. Отметим, что данная формула применяется для прогноза величины шага интегрирования h_{n+1} после успешного вычисления решения, и поэтому она 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.

Метод первого порядка. Для численного решения задачи (1) рассмотрим схему

$$y_{n+1}=y_n+r_1k_1+r_2k_2+r_3k_3, \tag{5}$$

где стадии k_1, k_2 и k_3 заданы при описании метода третьего порядка точности. Построим менее точную схему с максимальным интервалом устойчивости. Применяя (5) для решения задачи $y'=\lambda y$, $y(0)=y_0$, $\mathrm{Re}(\lambda)<0$, получим $y_{n+1}=Q(x)y_n$, $x=h\lambda$, где функция устойчивости $Q(x)$ записывается в виде $Q(x)=1+(r_1+r_2+r_3)x+[r_2/2+r_3]x^2+r_3x^3$. Требование первого порядка точности приводит к соотношению $r_1+r_2+r_3=1$, которое ниже будем считать выполненным. Теперь выберем r_2 и r_3 таким образом, чтобы метод (5) имел максимальный интервал устойчивости. Для этого рассмотрим многочлен Чебышева $T_3(z)=(4z^3-3z)$ на промежутке $[-1,1]$. Проведем замену переменных, полагая $z=1-2x/\gamma$. Получим $T_3(x)=1-18x/\gamma+48x^2/\gamma^2-32x^3/\gamma^3$, при этом отрезок $[\gamma,0]$ отображается на отрезок $[-1,1]$. Нетрудно показать, что среди всех многочленов вида $P_3(x)=1+x+c_2x^2+c_3x^3$ для $T_3(x)$ неравенство $|T_3(x)|\le 1$ выполняется на максимальном интервале $[\gamma,0]$, $\gamma=-18$ [2]. Потребуем совпадения коэффициентов $Q(x)$ и $T_3(x)$ при $\gamma=-18$. Это приводит к соотношениям $r_1+r_2+r_3=1$, $r_2/2+r_3=4/27$ и $r_3=4/729$. В результате имеем коэффициенты $r_1=517/729$, $r_2=208/729$ и $r_3=4/729$ метода первого порядка точности с максимальным интервалом устойчивости, локальная ошибка $\delta_{n,1}$ имеет вид $\delta_{n,1}=19h^2f'f+O(h^3)$. Для контроля точности численной формулы первого порядка будем использовать оценку локальной ошибки. Учитывая, что $k_2-k_1=0.5h_n^2f_n'f_n+O(h^3)$ и вид локальной ошибки, неравенство для контроля точности записывается в виде $19\|k_2-k_1\|/27\le\varepsilon$. Интервал устойчивости численной схемы (5) первого порядка точности равен 18 [8]. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $w_{n,3}\le 18$.

Алгоритм с автоматическим выбором численной схемы. На основе построенных явных методов первого и третьего порядков точности легко сформулировать алгоритм переменного порядка и шага. Расчеты всегда начинаются методом третьего порядка как более точным. Переход на схему первого порядка осуществляется при нарушении неравенства $w_{n,3} \le 2.5$. Обратный переход на метод третьего порядка происходит в случае выполнения неравенства $w_{n,3} \le 2.5$. При расчетах по методу первого порядка наряду с точностью контролируется устойчивость.

В случае использования схемы (3) формулировка алгоритма интегрирования также не вызывает трудностей. Нарушение неравенства $w_{n,3} \le 18$ вызывает переход на схему (3), а выполнение неравенства $w_{n,0} \le 18$ вызывает переход на явные методы.

Результаты расчетов. В качестве тестового примера рассмотрим уравнение Ван-дер-Поля для имитации осциллирующих физических процессов. Здесь это уравнение изучается в виде системы двух уравнений первого порядка

$$y_1' = y_2\,,\ y_2' = [(1 - y_1^2)y_2 - y_1]/\mu$$

с начальными условиями $y_1(0)=2$ и $y_2(0)=0$, $t \in [0,11]$. Изменением параметра μ варьируется жесткость модели. В таблице приведены результаты расчетов при различных значениях μ. Вычислительные затраты приведены в форме *if*(*ij*), где через *if* и *ij* обозначены соответственно число вычислений правой части и декомпозиций матрицы Якоби на интервале интегрирования. Сравнение эффективности построенного алгоритма MKRK3 проводилось с методом Гира в реализации А. Хиндмарша DLSODE из коллекции ODEPACK [9]. Расчеты проводились таким образом, чтобы в точном и приближенном решениях совпадали две значащие цифры, где под точным понимается решение при точности вычислений $\varepsilon = 10^{-11}$.

μ	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}
MKRK3	1778(0)	5009(0)	3221(734)	4236(976)	5091(1213)	5963(1428)
DLSODE	1756(118)	4634(310)	5213(461)	6503(600)	8021(733)	9357(841)

Из анализа результатов расчетов следует, что при небольшой жесткости задачи в построенном алгоритме работают только явные методы. Начиная с $\mu = 10^{-3}$, в зависимости от условия устойчивости в процессе вычислений комбинируются явные и *L*-устойчивый схемы. Из изучения пошаговых вычислений видно, что на переходных участках расчеты осуществляются по явным формулам, а на участках установления – по *L*-устойчивой схеме (в таблице *ij* совпадает с числом шагов *L*-устойчивого метода).

По числу вычислений правой части *if* построенный алгоритм MKRK3 почти при всех значениях μ эффективнее алгоритма DLSODE, но по количеству декомпозиций матрицы Якоби MKRK3 проигрывает. Это означает, что на задачах большой размерности DLSODE может быть эффективнее. Дополнительным резервом для MKRK3 является включение в состав алгоритма интегрирования *L*-устойчивого метода с замораживанием матрицы Якоби

Заключение. В построенном алгоритме RKMK3 с помощью признака можно задавать различные режимы расчета: 1) явными методами первого или третьего порядков точности с контролем или без контроля устойчивости; 2) явными методами с переменным порядком и шагом; 3) *L*-устойчивым методом; 4) 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 задача жесткой или нет, перекладывается на алгоритм интегрирования.

Литература

1. **Хайрер Э., Ваннер Г.** Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир. 1999. 685 с.
2. **Новиков Е. А.** Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука. 1997. 197 с.
3. **Новиков Е. А., Двинский А. Л.** Замораживание матрицы Якоби в методах типа Розенброка // Вычислительные технологии. 2005. Т. 10. С. 108–114.
4. **Новиков А. Е., Новиков Е. А.** Численное решение жестких задач с небольшой точностью // Математическое моделирование. 2010. Т. 22. № 1. С. 46–56.
5. **Новиков В. А., Новиков Е. А**. Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // ДАН СССР. 1984. Т. 277. № 5. С. 1058–1062.
6. **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.
7. **Демидов Г. В., Новиков Е. А.** Оценка ошибки одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // Числ. методы механики сплошной среды. 1985. Т. 16. № 1. С. 27–42.
8. **Новиков Е. А.** Конструирование областей устойчивости явных методов типа Рунге-Кутта // М.: Вычислительные методы и программирование. 2009. Т. 10. С. 248–257.
9. **Byrne G. D., Hindmarsh A. C.** Stiff ODE solvers: a review of current and comming attractions // J. of Comput. Physics. 1986. № 70. P. 1–62.