

УДК 519.622

ОПISКА В КОЭФФИЦИЕНТАХ СХЕМЫ ХАММУДА

Е. А. Альшина¹, Е. М. Закс², Н. Н. Калиткин¹

В литературе была предложена одна интересная явная семистадийная схема Рунге–Кутты шестого порядка точности. Однако тестирование установило, что в схеме имеется описка, понижающая порядок точности до первого. Удалось найти и исправить эту описку. Работа поддержана РФФИ (коды проектов 05–01–00152, 05–01–00144, 05–01–08006) и президентской программой поддержки ведущих научных школ (НШ–5772.2006.1) молодых кандидатов наук (МК–1513.2005.9).

Ключевые слова: обыкновенные дифференциальные уравнения, методы Рунге–Кутты, многостадийные формулы, задача Коши.

Решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) часто требуется в практических вычислениях. В обычной практике расчетов для нежестких систем часто используются явные схемы Рунге–Кутты (Explicit Runge–Kutta schemes) [1–3] с небольшим числом стадий ($s \leq 4$).

Позднее были построены схемы с большим числом стадий [4]. В [5] была рассмотрена ранее неизвестная семистадийная схема шестого порядка точности с трехпараметрическим семейством решений уравнения для коэффициентов схемы и приведены два конкретных набора коэффициентов. Эти схемы уникальны тем, что они стоят непосредственно перед вторым порогом Бутчера [6] и имеют максимально возможный при этом порядок точности, который отстает от числа стадий лишь на единицу. Для схем с числом стадий восемь и более отставание порядка от числа стадий составляет не менее двух.

Однако в [5] никакого тестирования предложенных наборов коэффициентов рассмотрено не было. Для тестирования описанных схем мы выбрали задачу Арнсторфа, отнесенную в классической монографии [4, с. 134] к исключительно трудным и практически не поддающимся решению явными схемами невысокого порядка, поскольку схемы невысокого порядка для разумной точности требуют такого большого числа шагов, что ошибки округления сильно накапливаются, а это не позволяет достичь приемлемой точности. Данная задача не жесткая, но очень плохо обусловленная. В ней идет речь о таком движении спутника в системе Земля–Луна, при котором траектория является замкнутой и описывает четыре петли за время одного периода обращения Луны (рис. 1):

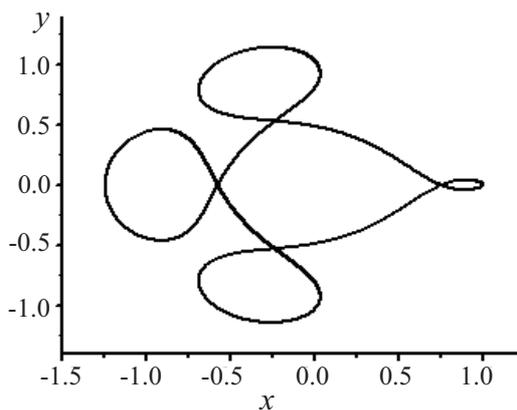


Рис. 1

$$\begin{aligned}
 x'' &= x + 2y' - \mu' \frac{x + \mu}{D_1} - \mu \frac{x - \mu'}{D_2}, & y'' &= y - 2x' - \mu' \frac{y}{D_1} - \mu \frac{y}{D_2}, \\
 D_1 &= ((x + \mu)^2 + y^2)^{3/2}, & D_2 &= ((x - \mu')^2 + y^2)^{3/2}, \\
 \mu &\approx 0.012277471, & \mu' &= 1 - \mu, \\
 x(0) &\approx 0.994, & x'(0) &= 0, \\
 y(0) &= 0, & y'(0) &\approx -2.00158510637908252240537862224, \\
 T_{\text{end}} &\approx 17.0652165601579625588917206249.
 \end{aligned}$$

¹ Институт математического моделирования РАН, Миусская пл., 4, корп. А, 125047, Москва; e-mail: alshina@gmx.co.uk, kalitkin@imamod.ru

² Московский государственный институт электронной техники, факультет микроприборов и технической кибернетики, пр. 4806, д. 5, г. Зеленоград, 124498, Москва; e-mail: sharlotap@yandex.ru

Для задачи Коши неавтономная система ОДУ записывается в виде $\frac{dy}{dt} = f(t, y)$, $0 \leq t \leq T$, $y(0) = y_0$, где t — скалярная переменная, а y и f — вектор-функции одинаковой размерности M . В этом случае традиционная запись явных схем Рунге–Кутты по Бутчеру [6] такова:

$$\hat{y} = y + \tau \sum_{m=1}^s b_m k_m, \quad k_m = g\left(t + \tau c_m, y + \tau \sum_{l=1}^{m-1} a_{ml} k_l\right).$$

Задача Аренсторфа автономна, и поэтому на ней не тестируется набор коэффициентов c_m . Однако условие

$$c_k = \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} \quad (1)$$

должно быть выполнено для обеспечения аппроксимации седьмого порядка. Это достаточное условие нетрудно получить, “автономизируя” исходную систему, т.е. выбирая время t в качестве новой независимой переменной. В результате появляются два типа времени: время-аргумент и время-функция.

Мы провели расчеты по схеме шестого порядка точности с использованием вложенных сгущающихся сеток и асимптотически точной оценки погрешности методом Ричардсона. Сгущение сеток прекращалось, когда достигалась заданная точность. Такой метод, как известно, гарантирует надежность сходимости погрешности. Детали метода описаны в [7–9]. Для расчета мы использовали два набора коэффициентов, приведенных в разделах 12 и 13 статьи [5]. Второй из этих наборов, представленный в виде девятнадцатизначных десятичных дробей, имеет вид

$$\begin{aligned} a_{2,1} &= 0.0397738810636626820, & a_{3,1} &= -2.0232213068287026442, & a_{3,2} &= 2.4676666083882350242, \\ a_{4,1} &= 1.5592163502993216408, & a_{4,2} &= -1.5836402510918297656, & a_{4,3} &= 0.7738073247325784584, \\ a_{5,1} &= 0.2984961191036369227, & a_{5,2} &= -0.1599241405554344570, & a_{5,3} &= 0.1925752515959041894, \\ a_{5,4} &= -0.0547540278940766248, & a_{6,1} &= -0.4034341508024866341, & a_{6,2} &= 0.4032361290994029897, \\ a_{6,3} &= -0.4580854271226429143, & a_{6,4} &= 0.2593977914292753504, & a_{6,5} &= 0.9224924551464301780, \\ a_{7,1} &= 1.5246901584942485567, & a_{7,2} &= -1.2165599427197976634, & a_{7,3} &= 1.3275508776336936246, \\ a_{7,4} &= -1.0232188176759936277, & a_{7,5} &= -0.9944282869822560419, & a_{7,6} &= 1.3819660112501051518. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь не приведены коэффициенты c_k , но их можно восстановить по формуле (1). Расчеты по этому набору показали, что схема действительно сходится с шестым порядком точности. Тестовые расчеты проводились с 64-разрядными числами. Наилучшая достигнутая относительная точность составила 10^{-11} . Это означает, что не менее одиннадцати знаков этих коэффициентов заведомо верны. Учитывая, что погрешность последних шагов очень чувствительна к точности расчета первых шагов (ошибка в начальных данных увеличивается к концу расчета в 10^6 раз), можно достаточно уверенно утверждать, что верны не менее шестнадцати знаков этих коэффициентов.

Первый набор коэффициентов в [5] записан через обыкновенные дроби и радикалы. Это означает, что каждый коэффициент вычисляется с предельной машинной точностью. Такое представление надежнее, чем заданное десятичной дробью. Однако попытка выполнить расчет по этому набору дала только первый порядок точности вместо шестого. Это свидетельствует о какой-то опiske в [5]. Нам их удалось найти и исправить, повторив все выкладки, рассмотренные в [5]. Ошибочными оказались коэффициенты $a_{6,5}$, $a_{7,5}$, c_5 и c_6 . Ниже (см. (3)) приведен исправленный нами набор коэффициентов, обеспечивающий шестой порядок точности.

Расчет орбиты Аренсторфа с набором (3) дал фактическую точность немного хуже, чем с набором (2). На сетке с 200 000 узлами при использовании набора (3) погрешность скорости составила 10^{-10} , что лишь немного хуже, чем в первом случае. Кроме того, по обсуждаемой схеме были проведены расчеты ряда других задач, в том числе неавтономных. В этих случаях схема также дала шестой порядок точности, что дополнительно подтверждает правильность скорректированного набора коэффициентов (3).

Таким образом, проверена и исправлена схема шестого порядка точности, показавшая хорошие результаты на достаточно трудной задаче. Хотя эта схема выглядит более громоздко, чем классическая схема Кутты четвертого порядка, по сложности записи она не сильно уступает ей, а по общему объему вычислений более экономична. Это является большим достоинством данной схемы. Для нее был реализован

алгоритм вычисления на вложенных сгущающихся сетках с асимптотически точной оценкой погрешности по методу Рунге-Кутты.

$$\begin{aligned}
 a_{2,1} &= \frac{4}{7}, & a_{3,1} &= \frac{115}{112}, & a_{3,2} &= -\frac{5}{16}, \\
 a_{4,1} &= \frac{589}{630}, & a_{4,2} &= \frac{5}{18}, & a_{4,3} &= -\frac{16}{45}, \\
 a_{5,1} &= \frac{229}{1200} - \frac{23}{6000}\sqrt{5}, & a_{5,2} &= \frac{119}{240} - \frac{187}{1200}\sqrt{5}, & a_{5,3} &= -\frac{14}{75} + \frac{34}{375}\sqrt{5}, \\
 a_{5,4} &= -\frac{3}{100}\sqrt{5}, & a_{6,1} &= \frac{71}{2400} - \frac{587}{12000}\sqrt{5}, & a_{6,2} &= \frac{187}{480} - \frac{391}{2400}\sqrt{5}, \\
 a_{6,3} &= -\frac{38}{75} + \frac{26}{375}\sqrt{5}, & a_{6,4} &= \frac{27}{80} - \frac{3}{400}\sqrt{5}, & a_{6,5} &= \frac{1+\sqrt{5}}{4}, \\
 a_{7,1} &= -\frac{49}{480} + \frac{43}{160}\sqrt{5}, & a_{7,2} &= -\frac{425}{96} + \frac{51}{32}\sqrt{5}, & a_{7,3} &= \frac{52}{15} - \frac{4}{5}\sqrt{5}, \\
 a_{7,4} &= -\frac{27}{16} + \frac{3}{16}\sqrt{5}, & a_{7,5} &= \frac{5}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{5}, & a_{7,6} &= \frac{5}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{5}, \\
 b_1 &= \frac{1}{12}, & b_2 &= 0, & b_3 &= 0, \\
 b_4 &= 0, & b_5 &= \frac{5}{12}, & b_6 &= \frac{5}{12}, \\
 b_7 &= \frac{1}{12}, & c_1 &= 0, & c_2 &= \frac{4}{7}, \\
 c_3 &= \frac{5}{7}, & c_4 &= \frac{6}{7}, & c_5 &= \frac{5-\sqrt{5}}{10}, \\
 c_6 &= \frac{5+\sqrt{5}}{10}, & c_7 &= 1.
 \end{aligned} \tag{3}$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Runge C. Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen // Math. Ann. 1895. **46**. 167–178.
2. Kutta W. Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen // Zeitschr. Für Math. U. Phys. 1901. **46**. 435–453.
3. Runge C. Über die numerische Auflösung totaler Differentialgleichungen // Göttinger Nachrichten. 1905. 252–257.
4. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
5. Хаммуд Г.М. Трехмерное семейство 7-шаговых методов Рунге-Кутта порядка 6 // Вычислительные методы и программирование. 2001. **2**, № 2. 71–78.
6. Butcher J.C. Coefficients for study of Runge-Kutta integration processes // J. Austral. Math. Soc. 1963. **3**. 185–201.
7. Марчук Г.И., Шайдулов В.В. Повышение точности решений разностных схем. М.: Наука, 1979.
8. Калиткин Н.Н., Альшин А.Б., Альшина Е.А., Rogov B.B. Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005.
9. Арушанян О.Б., Залеткин С.Ф. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений на Фортране. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1990.

Поступила в редакцию
23.10.2006