УДК 519.622 doi 10.26089/NumMet.v16r342

АЛГОРИТМ ПЕРЕМЕННОЙ СТРУКТУРЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ (3,2)-СХЕМЫ И МЕТОДА ФЕЛЬБЕРГА

Е. А. Новиков[1]

Построен (3,2)-метод третьего порядка с замораживанием матрицы Якоби, в котором L-устойчивыми являются основная и промежуточные численные схемы. Получено неравенство для контроля точности вычислений с использованием вложенного метода второго порядка. Предложено неравенство для контроля устойчивости явного трехстадийного метода Рунге–Кутта–Фельберга третьего порядка. Сформулирован алгоритм переменной структуры, в котором на каждом шаге явный или L-устойчивый метод выбираются по критерию устойчивости. Приведены результаты расчетов.

Ключевые слова: жесткие системы, (m,k)-схемы, метод Фельберга, методы Рунге–Кутта, контроль точности и устойчивости, алгоритм переменной структуры, обыкновенные дифференциальные уравнения, численные методы.

1. Введение. Проблема решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности возникает во многих важных приложениях. Такая задача появляется, например, при моделировании физических, биологических, химико-технологических и других процессов, при расчете динамики механических и электроэнергетических систем, при аппроксимации уравнений в частных производных системой обыкновенных дифференциальных уравнений [1–4].

Для численного решения таких задач обычно применяются A-устойчивые или L-устойчивые численные формулы [1]. В полуявных или неявных методах стадии вычисляются, как правило, с использованием метода Ньютона. При реализации безытерационных методов, например численных схем типа Розенброка, на каждом шаге несколько раз решается линейная система алгебраических уравнений с применением LU-разложения матрицы Якоби. В силу плохой обусловленности этой матрицы решение линейной системы осуществляется с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице, и поэтому при большой размерности исходной системы дифференциальных уравнений декомпозиция матрицы фактически определяет общие вычислительные затраты.

В последнее время при решении жестких задач широкое распространение получили численные схемы типа Розенброка [5]. Эти методы получены из полуявных численных формул типа Рунге–Кутта, в которых применяется одна итерация метода Ньютона. В данных численных схемах матрица Якоби введена непосредственно в вычислительную формулу, а при определении стадий вместо решения нелинейных систем на каждом шаге несколько раз решается линейная система алгебраических уравнений. Необходимая точность вычислений достигается выбором величины шага интегрирования. Методы типа Розенброка просты с точки зрения реализации, и в них вычислительные затраты на шаг легко определяются до начала расчетов. Введение матрицы Якоби в численную схему приводит к принципиальным проблемам с применением одной матрицы Якоби на нескольких шагах интегрирования [3]. Известно, что максимальный порядок точности численных формул с замораживанием матрицы Якоби равен двум [6–7]. Это означает, что применение методов типа Розенброка ограничено либо задачами небольшой размерности, либо расчетами с небольшой точностью [8].

Некоторым аналогом замораживания матрицы Якоби является применение в расчетах алгоритмов интегрирования на основе явных и L-устойчивых методов с автоматическим выбором численной схемы [9]. В этом случае эффективность алгоритма может быть повышена за счет расчета переходного участка, соответствующего максимальному собственному значению матрицы Якоби, явным методом. В качестве критерия выбора эффективной численной формулы естественно применять неравенство для контроля устойчивости [10–11]. Применение таких комбинированных алгоритмов полностью не снимает проблему замораживания матрицы Якоби, потому что явным методом можно просчитать, вообще говоря, только погранслойное решение, соответствующее максимальному собственному значению матрицы Якоби.

[1] Институт вычислительного моделирования СО РАН, Академгородок, 50/44, 660036, Красноярск; главный научный сотрудник, e-mail: novikov@icm.krasn.ru

В [12] предложен класс (m,k)-методов, в которых нахождение стадий не связывается с обязательным вычислением правой части системы дифференциальных уравнений. Числа m и k означают соответственно число стадий и количество вычислений правой части на шаг интегрирования. Реализация (m,k)-методов так же проста, как и методов Розенброка, однако (m,k)-схемы имеют лучшие свойства точности и устойчивости. В рамках (m,k)-методов достаточно просто решается проблема замораживания матрицы Якоби и ее численной аппроксимации [3].

В настоящей статье на основе явного метода типа Рунге–Кутта–Фельберга и L-устойчивой (3,2)-схемы третьего порядка точности построен явно-неявный алгоритм переменной структуры. В (3,2)-схеме допускается замораживание матрицы Якоби и ее численная аппроксимация. Выбор эффективной численной формулы на каждом шаге осуществляется по критерию устойчивости. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность алгоритма интегрирования.

2. Класс (m,k)-методов. Рассмотрим задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

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

где y и f — вещественные N-мерные вектор-функции и t — независимая переменная, которая изменяется на заданном интервале $[t_0, t_k]$. Рассмотрение автономной задачи не снижает общности, потому что неавтономную задачу введением дополнительной переменной можно привести к автономному виду.

Класс (m,k)-методов вводится следующим образом. Зададимся значениями целых чисел m и k, $k \leqslant m$. Введем в рассмотрение множества

$$\begin{aligned}
&M_m = \{1, 2, \dots, m\},\\
&M_k = \{m_i \in M_m \mid 1 = m_1 < m_2 < \dots < m_k \leqslant m\},\\
&J_i = \{m_{j-1} \in M_m \mid j > 1,\ m_j \in M_k,\ m_j \leqslant i\}, \quad 2 \leqslant i \leqslant m.
\end{aligned}$$

Для решения задачи (1) будем применять (m,k)-схемы вида [12]

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i,\\
&D_n k_i = hf\Big(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j\Big) + \sum_{j\in J_i} \alpha_{ij} k_j, \quad i \in M_k,\\
&D_n k_i = k_{i-1} + \sum_{j\in J_i} \alpha_{ij} k_j, \quad i \in M_m \setminus M_k,
\end{aligned} \tag{2}$$

где $D_n = E - ahA_n$, матрица A_n представима в виде

$$A_n = f'_n + hB_n + O(h^2), \tag{3}$$

E — единичная матрица, $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ — матрица Якоби системы (1), B_n — некоторая матрица, не зависящая от размера шага интегрирования h, параметры a, p_i, β_{ij} и α_{ij} — числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости методов (2). В отличие от других известных одношаговых численных схем, в (m,k)-методах правая часть $f(y)$ задачи (1) вычисляется не для всех стадий.

Для описания вычислительных затрат на шаг интегрирования в традиционных одношаговых методах достаточно одной константы m — число стадий. В данных схемах затраты определяются двумя постоянными m и k. Вычислительные затраты на шаг интегрирования в методах (2) следующие: (i) один раз вычисляется матрица Якоби и осуществляется декомпозиция матрицы D_n, (ii) k раз вычисляется функция f и (iii) m раз осуществляется обратный ход в методе Гаусса. Условие (3) позволяет применять формулы (2) с замораживанием матрицы Якоби, которая может вычисляться как аналитически, так и численно [8]. Отметим, что при $k = m$ и $\alpha_{ij} = 0$ численные формулы (2) совпадают с методами типа Розенброка [5].

3. Исследование (3,2)-метода. Далее для решения задачи (1) будем применять численную формулу вида

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3,\\
&D_n k_1 = hf\big(y_n\big), \quad D_n k_2 = k_1,\\
&D_n k_3 = hf\big(\tilde y_{n+1}\big) + \alpha_{32} k_2,
\end{aligned} \tag{4}$$

где $D_n = E - ahA_n$, матрица A_n представима в виде (3), а промежуточная или внутренняя численная схема для вычисления $\tilde{y}_{n+1}$ записывается следующим образом:

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2. \tag{5}$$

Для построения численной формулы третьего порядка точности разложим стадии k_i, $1 \leqslant i \leqslant 3$, в ряды Тейлора в окрестности точки y_n до членов с h^3 включительно:

$$\begin{aligned}
&k_1 = hf_n + ah^2 f'_n f_n + a^2 h^3 f'^2_n f_n + ah^3 B_n f_n + O(h^4),\\
&k_2 = hf_n + 2ah^2 f'_n f_n + 3a^2 h^3 f'^2_n f_n + 2ah^3 B_n f_n + O(h^4),\\
&k_3 = (1+\alpha_{32})hf_n + (a + 3a\alpha_{32} + \beta_{31} + \beta_{32})h^2 f'_n f_n +\\
&\quad + (a^2 + 6a^2\alpha_{32} + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32})h^3 f'^2_n f_n + 0.5(\beta_{31}+\beta_{32})^2 h^3 f''_n f^2_n +\\
&\quad + (1+3\alpha_{32})ah^3 B_n f_n + O(h^4).
\end{aligned} \tag{6}$$

Подставляя (6) в первую формулу (4), запишем

$$\begin{aligned}
y_{n+1} = y_n &+ \Big[p_1 + p_2 + (1+\alpha_{32})p_3\Big] hf_n +\\
&+ \Big[ap_1 + 2ap_2 + (a + 3a\alpha_{32} + \beta_{31} + \beta_{32})p_3\Big] h^2 f'_n f_n +\\
&+ \Big[a^2 p_1 + 3a^2 p_2 + (a^2 + 6a^2\alpha_{32} + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32})p_3\Big] h^3 f'^2_n f_n +\\
&+ 0.5\Big(\beta_{31}+\beta_{32}\Big)^2 p_3 h^3 f''_n f^2_n + \Big[ap_1 + 2ap_2 + (a + 3a\alpha_{32})p_3\Big] h^3 B_n f_n + O(h^4).
\end{aligned} \tag{7}$$

Разложение точного решения $y(t_{n+1})$ в ряд Тейлора в окрестности точки t_n до членов с h^3 включительно имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + \frac{1}{2}h^2 f' f + \frac{1}{6}h^3\Big(f'^2 f + f'' f^2\Big) + O(h^4), \tag{8}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$. Сравнивая (7) и (8) при условии $y_n = y(t_n)$, получим условия третьего порядка точности схемы (4):

$$\begin{aligned}
&p_1 + p_2 + (1+\alpha_{32})p_3 = 1,\\
&ap_1 + 2ap_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32})p_3 = \frac{1}{2},\\
&a^2 p_1 + 3a^2 p_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32})p_3 = \frac{1}{6},\\
&(\beta_{31}+\beta_{32})^2 p_3 = \frac{1}{3}, \quad ap_1 + 2ap_2 + (a + 3a\alpha_{32})p_3 = 0.
\end{aligned} \tag{9}$$

Последнее уравнение (9) возникает за счет применения “испорченной” матрицы Якоби, т.е. за счет использования A_n вместо матрицы Якоби $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$.

Исследуя совместность (9), получим следующие выражения для коэффициентов:

$$\begin{aligned}
&p_1 = \frac{5}{4} + \frac{3}{4}\alpha_{32}, \quad p_2 = -1 - \frac{3}{2}\alpha_{32}, \quad p_3 = \frac{3}{4},\\
&\beta_{32} = \frac{2}{3} - \beta_{31}, \quad -a^2 + \frac{3}{2}a + \frac{3}{4}a^2\alpha_{32} - \frac{3}{4}a\beta_{31} = \frac{1}{6}.
\end{aligned} \tag{10}$$

Исследуем устойчивость схемы (4) на линейной тестовой задаче Далькквиста [13]

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0, \quad t \geqslant 0, \tag{11}$$

где λ — комплексное число, $\Re(\lambda) < 0$. Смысл λ — некоторое собственное значение матрицы Якоби задачи (1). Применяя (4) для решения (11), получим $y_{n+1} = Q_3(x)y_n$, где $x = \lambda h$, а функция устойчивости

$Q_3(x)$ записывается следующим образом:

$$Q_3(x) = \frac{\Big[-a^3 + a^2p_1 + a^2p_3 - a\beta_{31}p_3\Big]x^3}{\big(1-ax\big)^3} + \\ + \frac{\Big[3a^2 - 2ap_1 - ap_2 + \big(\beta_{31} + \beta_{32} - 2a\big)p_3\Big]x^2}{\big(1-ax\big)^3} + \\ + \frac{\Big[-3a + p_1 + p_2 + (1+\alpha_{32})p_3\Big]x + 1}{\big(1-ax\big)^3}.$$

Из вида $Q_3(x)$ следует, что для L-устойчивости основной схемы (4) необходимо выполнение соотношения

$$-a^2 + ap_1 + ap_3 - \beta_{31}p_3 = 0. \tag{12}$$

Запишем условие L-устойчивости промежуточной схемы (5). Применяя (5) для решения (11), получим $\tilde{y}_{n+1} = Q_2(x)y_n$, где функция устойчивости $Q_2(x)$ промежуточной схемы имеет вид

$$Q_2(x) = \frac{1 + \big(-2a + \beta_{31} + \beta_{32}\big)x + a\big(a - \beta_{31}\big)x^2}{\big(1-ax\big)^2}.$$

Из вида $Q_2(x)$ следует, что промежуточная схема (5) будет L-устойчивой, если $\beta_{31} = a$. С учетом соотношения (12) коэффициенты метода, обладающего L-устойчивой основной схемой, записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} &p_1 = a - \frac{3}{4} + \frac{3}{4}\frac{\beta_{31}}{a}, \quad p_2 = -2a + 3 - \frac{3}{2a}\beta_{31}, \quad p_3 = \frac{3}{4}, \\ &\beta_{32} = \frac{2}{3} - \beta_{31}, \quad \alpha_{32} = \frac{1}{3}a^{-1}\big[4a^2 - 8a + 3\beta_{31}\big], \\ &a^3 - 3a^2 + \frac{3}{2}a - \frac{1}{6} = 0, \end{aligned} \tag{13}$$

где последнее уравнение получено из необходимого условия L-устойчивости (12), а коэффициент β_{31} является свободным.

Дополнительное требование L-устойчивости $\beta_{31} = a$ промежуточной или внутренней численной формулы (5) приводит к коэффициентам

$$p_1 = a, \quad p_2 = -2a + \frac{3}{2}, \quad p_3 = \frac{3}{4}, \quad \beta_{32} = \frac{2}{3} - a, \quad \beta_{31} = a, \quad \alpha_{32} = \frac{1}{3}(4a - 5), \tag{14}$$

где значение параметра a определяется из необходимого условия L-устойчивости основной численной формулы (4). Уравнение L-устойчивости $a^3 - 3a^2 + 1.5a - 1/6 = 0$ имеет три вещественных корня

$$a_1 = 2.40514957850286, \quad a_2 = 0.158983899988677, \quad a_3 = 0.435866521508459.$$

Согласно [14], схема (4) будет A-устойчивой, если $1/3 \leqslant a \leqslant 1.0685790$. Для расчетов рекомендуется коэффициент $a = 0.435866521508459$, потому что в этом случае уравнение $a^3 - 3a^2 + 1.5a - 1/6 = 0$ является и достаточным условием L-устойчивости.

Заметим, что максимальный порядок L-устойчивого метода типа Розенброка с двумя вычислениями правой части исходной задачи равен двум. Построенный здесь L-устойчивый (3,2)-метод имеет третий порядок точности, причем в нем допускается замораживание матрицы Якоби и ее численная аппроксимация без потери порядка точности.

4. Контроль точности вычислений. Для построения неравенства для контроля точности численной формулы (4) с коэффициентами (14) введем дополнительную стадию $D_nk_4 = k_3$. Заметим, что при большой размерности исходной задачи вычислительные затраты на определение стадии k_4 на фоне декомпозиции матрицы D_n, которая выполняется для определения предыдущих стадий, незначительны. Для контроля точности будем использовать идею вложенных методов. Для этого на основе уже вычисленных стадий k_1, k_2 и k_3 построим численную схему второго порядка

$$y_{n+1,2} = y_n + b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3 + b_4k_4, \tag{15}$$

а контроль точности будем осуществлять проверкой неравенства

$$||y_{n+1} - y_{n+1,2}|| \leqslant \varepsilon, \tag{16}$$

где $||\cdot||$ – некоторая норма в R^N, ε – требуемая точность расчетов. Для нахождения коэффициентов b_1, b_2, b_3 и b_4 запишем разложение стадии k_4 в ряд Тейлора в окрестности точки t_n до членов с h^3 включительно. Получим

$$\begin{aligned} k_4 = &\big(1+\alpha_{32}\big)hf_n + \big(2a+\beta_{31}+\beta_{32}+4a\alpha_{32}\big)h^2 f_n' f_n + \\ &+\big(3a^2+10a^2\alpha_{32}+3a\beta_{31}+4a\beta_{32}\big)h^3 {f_n'}^2 f_n + \\ &+0.5\big(\beta_{31}+\beta_{32}\big)^2 h^3 f_n'' {f_n}^2 + \big(2+4\alpha_{32}\big)ah^3 B_n f_n + O\big(h^4\big). \end{aligned}$$

Учитывая (6), условия второго порядка схемы (15) записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} &b_1 + b_2 + \big(1+\alpha_{32}\big)\big(b_3+b_4\big) = 1, \\ &ab_1 + 2ab_2 + \big(a+3a\alpha_{32}+\beta_{31}+\beta_{32}\big)b_3 + \\ &\quad + \big(2a+4a\alpha_{32}+\beta_{31}+\beta_{32}\big)b_4 = 1/2. \end{aligned} \tag{17}$$

Заметим, что схема (4) построена с учетом возможности замораживания матрицы Якоби и ее численной аппроксимации. Ошибки, вносимые использованием “испорченной” матрицы Якоби, учитываются последним соотношением (9). Аналогичное требование к формуле (15) приводит к дополнительному уравнению

$$ab_1 + 2ab_2 + \big(1+3\alpha_{32}\big)ab_3 + \big(2+4\alpha_{32}\big)ab_4 = 0. \tag{18}$$

Решая совместно (17) и (18), получим

$$b_1 = 2a - \frac{1}{2} - \left(\frac{4}{3}a - \frac{2}{3}\right)b_3, \quad b_2 = 2 - 3a + \left(\frac{4}{3}a - \frac{2}{3}\right)b_3, \quad b_4 = \frac{3}{4} - b_3,$$

где b_3 — свободный параметр. Положив $b_3 = 0$, имеем коэффициенты

$$b_1 = 2a - \frac{1}{2}, \quad b_2 = 2 - 3a, \quad b_3 = 0, \quad b_4 = \frac{3}{4},$$

где $a = 0.435866521508459$. Отметим, что применение неравенства для контроля точности (16) не приводит к дополнительным вычислениям правой части или обращениям матрицы Якоби, так как при его построении были использованы уже вычисленные стадии k_1 и k_2. Введение дополнительной стадии k_4, применяемой только для контроля точности, увеличивает вычислительные затраты на один обратный ход метода Гаусса на шаг интегрирования.

В конкретных расчетах левая честь неравенства (16) вычислялась по формуле

$$||y_{n+1} - y_{n+1,2}|| = \max_{1\leqslant iN} \frac{|y^i_{n+1} - y^i_{n+1,2}|}{|y^i_n| + r},$$

где N — размерность задачи (1), r — некоторая положительная постоянная. Если по i-й компоненте решения выполняется неравенство $|y^i_n| < r$, то контролируется абсолютная ошибка $\varepsilon \cdot r$, в противном случае — относительная ошибка ε.

Оценку максимального собственного значения $v_{n,0} = h \cdot |\lambda_{n,\max}|$ матрицы Якоби системы (1), необходимую для перехода на явную формулу, оценим через ее норму по формуле

$$v_{n,0} = h \cdot \Big|\frac{\partial f(y_n)}{\partial y}\Big| = h \cdot \max_{1\leqslant i\leqslant N} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \Big|\frac{\partial f_i(y_n)}{\partial y_j}\Big| \right\}.$$

5. Метод Рунге–Кутта–Фельберга третьего порядка. Для численного решения задачи Коши

$$y' = f(t,y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leqslant t \leqslant t_k, \tag{19}$$

будем применять явный метод типа Рунге–Кутта

$$\begin{aligned} &y_{n+1} = y_n + p_{m,1}k_1 + p_{m,2}k_2 + p_{m,3}k_3, \\ &k_1 = hf\big(t_n, y_n\big), \quad k_2 = hf\big(t_n + h, y_n + k_1\big), \\ &k_3 = hf\Big(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{4}k_1 + \frac{1}{4}k_2\Big). \end{aligned} \tag{20}$$

При значениях коэффициентов

$$p_{3,1} = p_{3,2} = \frac{1}{6}, \quad p_{3,3} = \frac{2}{3} \tag{21}$$

численная формула (20) совпадает с методом Фельберга третьего порядка [15], а при коэффициентах

$$p_{2,1} = p_{2,2} = \frac{1}{2}, \quad p_{2,3} = 0 \tag{22}$$

численная схема (20) имеет второй порядок точности. Введем обозначение

$$\varepsilon_{n,3} = \bigg|\bigg|\sum_{i=1}^{3}\big(p_{3,i} - p_{2,i}\big)k_i\bigg|\bigg| = \frac{1}{3}\cdot\Big|\Big|2k_3 - k_2 - k_1\Big|\Big|,$$

где $\big|\big|\cdot\big|\big|$ — некоторая норма в R^N. Тогда для контроля точности схемы (20) с коэффициентами (21) можно применять неравенство $\varepsilon_{n,3} \leqslant \varepsilon$, где ε — требуемая точность интегрирования. Через стадии k_i, $1 \leqslant i \leqslant 3$, неравенство для контроля точности записывается в виде

$$\frac{1}{3}\cdot\Big|\Big|2k_3 - k_2 - k_1\Big|\Big| = \frac{1}{3}\cdot\max_{1\leqslant i\leqslant N}\left\{\frac{\big|2k_3^i - k_2^i - k_1^i\big|}{\big|y_n^i\big| + r}\right\} \leqslant \varepsilon,$$

где r — некоторая положительная постоянная. Если по i-й компоненте решения выполняется неравенство $|y_n^i| < r$, то контролируется абсолютная ошибка $\varepsilon\cdot r$, в противном случае — относительная ошибка ε.

Известно, что метод (20), (21) при решении нежестких задач является эффективным. Однако его применение для расчета жестких задач на участке установления приводит к большому числу повторных вычислений решения (возвратов) за счет возникающей неустойчивости. Этих возвратов частично можно избежать за счет дополнительного контроля устойчивости численной схемы [10–11].

Для построения неравенства для контроля устойчивости численной формулы (20), (21) запишем стадии k_1, k_2 и k_3 применительно к задаче $y' = Ay$, где A — матрица с постоянными коэффициентами. Получим

$$k_1 = X\cdot y_n,\ k_2 = \big(X + X^2\big)\cdot y_n, \quad k_3 = \big(X + \frac{1}{2}X^2 + \frac{1}{4}X^3\big)\cdot y_n,$$

где $X = h\cdot A$. Нетрудно видеть, что выполнены соотношения

$$k_2 - k_1 = X^2\cdot y_n, \quad 2\cdot\big(2k_3 - k_2 - k_1\big) = X^3\cdot y_n.$$

Тогда оценку максимального собственного значения $v_n = h\cdot|\lambda_{n,\max}|$ матрицы Якоби задачи (19) можно вычислить степенным методом по приближенной формуле

$$v_n = 2\cdot\max_{1\leqslant i\leqslant N}\left\{\frac{\big|2k_3^i - k_2^i - k_1^i\big|}{\big|k_2^i - k_1^i\big|}\right\}. \tag{23}$$

В результате для контроля устойчивости схемы (20) можно применять неравенство $v_n \leqslant D$, где константу D можно выбрать равной 2.5, т.е. примерно равной длине интервала устойчивости схемы (20), (21).

Оценка (23) максимального собственного значения матрицы Якоби задачи (19) является грубой, потому что вовсе не обязательно максимальное собственное значение значительно отделено от остальных; в степенном методе применяется мало итераций и дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (19). Поэтому здесь контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется следующим образом. Новый шаг h^{ac} по точности определяется по формуле $h^{ac} = q_1 h_n$, где h_n — последний успешный шаг интегрирования, а q_1, учитывая соотношение $\varepsilon_{n,3} = O\bigl(h_n^3\bigr)$, задается уравнением $q_1^3 \cdot \varepsilon_{n,3} = \varepsilon$. Шаг по устойчивости h^{st} задается формулой $h^{st} = q_2 h_n$, где q_2, учитывая соотношение $v_n = O\bigl(h_n\bigr)$, определяется из равенства $q_2 v_n = 2.5$. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется по следующей формуле:

$$h_{n+1} = \max\Bigl[h_n,\ \min\bigl(h^{ac}, h^{st}\bigr)\Bigr]. \tag{24}$$

Если шаг по устойчивости должен быть уменьшен, то в качестве следующего шага будет применяться последний успешный шаг h_n, потому что причиной уменьшения может быть грубость оценки максимального собственного значения матрицы Якоби. Однако шаг не будет и увеличен, потому что возможна неустойчивость численной схемы. Формула (24) позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Из результатов расчетов жестких задач алгоритмом с дополнительным контролем устойчивости следует повышение эффективности примерно в полтора-два раза, однако точность вычислений существенно выше задаваемой. Это естественно, потому что старые ошибки подавляются за счет контроля устойчивости, а новые ошибки на участке установления невелики.

6. Алгоритм переменной конфигурации. На основе построенных методов легко сформулировать алгоритм, в котором на каждом шаге выбирается наиболее эффективная численная схема. Первый шаг всегда выполняется явным методом, потому что в нем не используется матрица Якоби. Нарушение неравенства $v_n \leqslant 2.5$ вызывает переход на L-устойчивую схему, где оценка v_n вычисляется по формуле (23). Передача управления явным методам происходит в случае выполнения неравенства $v_{n,0} \leqslant 2.5$, где оценка $v_{n,0}$ вычисляется через норму матрицы Якоби. Ниже построенный алгоритм интегрирования переменной конфигурации будем называть RKMK3.

7. Результаты расчетов. Расчеты проводились на IBM PC с двойной точностью. В расчетах параметр r выбирался таким образом, чтобы по всем компонентам решения фактическая точность была не хуже задаваемой. Расчеты проводились с точностью $\varepsilon = 10^{-3}$, потому что при такой точности вычислений наиболее эффективны методы третьего порядка. Сравнение эффективности проводилось с известным методом Гира в реализации А. Хиндмарша DLSODE из коллекции ODEPACK [16].

Ниже через if и ij обозначены соответственно суммарное число вычислений правой части и количество декомпозиций матрицы Якоби задачи, которые позволяют объективно оценить эффективность алгоритма интегрирования. В качестве первого тестового примера выбрана простейшая модель реакции Белоусова–Жаботинского [17]

$$\begin{aligned} &y_1' = 77.27\bigl(y_2 - y_1 y_2 + y_1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1^2\bigr),\\ &y_2' = \bigl(-y_2 - y_1 y_2 + y_3\bigr)/77.27, \quad y_3' = 0.161\bigl(y_1 - y_3\bigr),\\ &t \in [0, 300], \quad y_1(0) = y_3(0) = 4, \quad y_2(0) = 1.1, \quad h_0 = 2 \cdot 10^{-3}. \end{aligned} \tag{25}$$

Коэффициент жесткости системы (25) равен примерно 10^7. В данном примере имеются три переходных процесса на коротком промежутке времени (около 1 сек.) и процесс установления на оставшейся части интервала. Именно на таких задачах достигается преимущество явно-неявных алгоритмов интегрирования.

Расчеты проводились с численной матрицей Якоби. Решение данной задачи алгоритмом RKMK3 с автоматическим выбором явной или L-устойчивой численной схемы вычислено с затратами if $= 986$ и ij $= 67$. При расчетах только по L-устойчивой схеме (4) с замораживанием матрицы Якоби затраты if $= 856$ и ij $= 90$, а без замораживания — if $= 999$ и ij $= 306$. Фактическая точность расчетов в конце интервала интегрирования не хуже задаваемой. Решение (25) удалось вычислить явным методом с контролем устойчивости с затратами if $= 8\,918\,913$. Данная задача слишком жесткая для явных методов. Однако результаты расчетов приведены здесь с целью демонстрации принципиальной возможности применения явных методов с контролем устойчивости для решения достаточно жестких примеров, которые на некоторых задачах большой размерности могут быть эффективнее L-устойчивых методов.

При расчетах программой DLSODE требуемая точность 10^{-3} достигается при задаваемой точности 10^{-4} с затратами if $= 1\,129$ и ij $= 107$. При более высокой точности расчетов DLSODE эффективнее построенного алгоритма. Это является следствием низкого порядка точности построенных численных формул. При задаваемой точности 10^{-3} алгоритм RKMK3 более чем в 1.5 раз эффективнее известного метода DLSODE по числу декомпозиций матрицы Якоби, в то время как количество вычислений правой части задачи (25) для RKMK3 и DLSODE различается не столь значительно. В случае большой размерности задачи (1) построенный алгоритм интегрирования по времени счета может быть эффективнее DLSODE.

Следующий пример описывается системой двух дифференциальных уравнений в частных производных с начальными и граничными условиями. Это задача исследования проникновения помеченных радиоактивной меткой антител в пораженную опухолью ткань живого организма [18]. Рассматривается система одномерных уравнений реакции–диффузии

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - kuv, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -kuv, \tag{26}$$

которые возникают из химической реакции $A + B \xrightarrow{k} C$, где A — антитело с радиоактивной меткой, реагирующее с субстратом B — тканью, пораженной опухолью, k — константа скорости реакции. Концентрации A и B обозначены через u и v соответственно. При выводе уравнений (26) предполагалось, что кинетика реакции описывается законом действующих масс, причем реагент A подвижен, тогда как реагент B неподвижен. Изучается полубесконечная пластина, внутри которой субстрат B равномерно распределен. Реагент A, попадая на поверхность пластины, начинает проникать в нее. После некоторых преобразований и дискретизации по пространственной переменной эта задача записывается в виде начальной задачи для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad y(0) = g, \ y \in \mathbb{R}^{2N}, \quad 0 \leqslant t \leqslant 20, \tag{27}$$

где N — задаваемый параметр. Функция f определяется формулами

$$\begin{aligned} f_{2j-1} &= \alpha_j \frac{y_{2j+1} - y_{2j-3}}{2\triangle\zeta} + \beta_j \frac{y_{2j-3} - 2y_{2j-1} + y_{2j+1}}{(\triangle\zeta)^2} - ky_{2j-1}y_{2j}, \\ f_{2j} &= -ky_{2j}y_{2j-1}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} &\alpha_j = \frac{2(j\Delta\zeta - 1)^3}{c^2}, \quad \beta_j = \frac{(j\Delta\zeta - 1)^4}{c^2}, \quad 1 \leqslant j \leqslant N, \\ &\Delta\zeta = \frac{1}{N}, \quad y_{-1}(t) = \phi(t), \quad y_{2,N+1} = y_{2,N-1}, \\ &g \in \mathrm{R}^{2N}, \quad g = (0, v_0, 0, v_0, \ldots, 0, v_0)^{\mathrm{T}}. \end{aligned}$$

Функция $\varphi(t) = 2$ при $t \in (0, 5]$ и $\varphi(t) = 0$ при $t \in (5, 20]$, т.е. φ имеет разрыв первого рода в точке $t = 5$. Вычисления проводились с параметрами $k = 100$, $v_0 = 1$ и $c = 4$.

Рассматриваемые ниже расчеты проводились с численной матрицей Якоби при $N = 200$, т.е. система (27) состоит из 400 уравнений. Следовательно, для одного вычисления матрицы требуется 400 вычислений правой части задачи (27). Задача о нахождении разрыва функции $\varphi(t)$ при $t = 5$ возлагалась на алгоритм управления шагом. Решение данной задачи алгоритмом RKMK3 с автоматическим выбором явной или L-устойчивой численной схемы вычислено с затратами if = 17 982 и ij = 43. При расчетах только по L-устойчивой схеме (4) с замораживанием матрицы Якоби затраты if = 22 489 и ij = 54, а без замораживания — if = 30 798 и ij = 76. При расчетах явным методом с контролем устойчивости затраты if = 193 676. При расчетах программой DLSODE затраты if = 25 358 и ij = 62. Снова при более высокой точности расчетов DLSODE эффективнее построенного алгоритма. Заметим, что алгоритм на основе явной схемы по времени счета примерно в полтора раза эффективнее других методов, что является следствием достаточно большой размерности задачи (27). С ростом N преимущество явного метода по времени счета возрастает.

8. Заключение. Построенный алгоритм RKMK3 предназначен для расчетов с точностью 10^{-3} и ниже. В этом случае достигается его максимальная эффективность. В RKMK3 с помощью специального признака можно задавать различные режимы расчета:

1) явным методом третьего порядка точности с контролем или без контроля устойчивости;

2) L-устойчивым (3,2)-методом с замораживанием или без замораживания как аналитической, так и численной матрицы Якоби;

3) 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 ли задача жесткой или нет, перекладывается на алгоритм интегрирования.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 14–01–00047).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.
2. *Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
3. *Новиков Е.А., Шорников Ю.В.* Компьютерное моделирование жестких гибридных систем. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2012.
4. *Демиденко Н.Д., Кулагин В.А., Шокин Ю.И.* Моделирование и вычислительные технологии распределенных систем. Новосибирск: Наука, 2012.
5. *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Comput. J. 1963. **5**, N 4. 329–330.
6. *Новиков Е.А., Новиков В.А., Юматова Л.А.* Замораживание матрицы Якоби в методе типа Розенброка второго порядка точности // ЖВМ и МФ. 1987. **27**, № 3. 385–390.
7. *Новиков Е.А., Двинский А.Л.* Замораживание матрицы Якоби в методах типа Розенброка // Вычислительные технологии. 2005. **10**. 108–114.
8. *Новиков А.Е., Новиков Е.А.* Численное решение жестких задач с небольшой точностью // Математическое моделирование. 2010. **22**, № 1. 46–56.
9. *Новиков Е.А.* Построение алгоритма интегрирования жестких систем дифференциальных уравнений на неоднородных схемах // ДАН СССР. 1984. **278**, № 2. 272–275.
10. *Новиков В.А., Новиков Е.А.* Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // ДАН СССР. 1984. **277**, № 5. 1058–1062.
11. *Новиков Е.А.* Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997.
12. *Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И.* Одношаговые безытерационные методы решения жестких систем // ДАН СССР. 1988. **301**, № 6. 1310–1314.
13. *Dahlquist G.G.* A special stability problem for linear multistep methods // BIT Numer. Math. 1963. **3**, N 1. 27–43.
14. *Демидов Г.В., Юматова Л.А.* Исследование точности неявных одношаговых методов. Препринт ВЦ СО АН СССР. № 25. Новосибирск, 1976.
15. *Fehlberg E.* Low order classical Runge–Kutta formulas with step size control and their application to some heat transfer problems. Huntsville: NASA, 1969.
16. *Byrne G.D., Hindmarsh A.C.* Stiff ODE solvers: a review of current and coming attractions // J. of Comput. Physics. 1987. **70**, N 1. 1–62.
17. *Enright W.H., Hull T.E., Lindberg B.* Comparing numerical methods for the solutions of systems of ODE's // BIT Numer. Math. 1975. **15**, N 1. 10–48.
18. *Mazzia F., Magherini C.* Test set for initial value problem solvers. Technical Report N 4/2008. Department of Mathematics, University of Bari, Italy. Bari, 2008.

Поступила в редакцию
16.06.2015

A Variable Structure Algorithm Using the (3,2)-Scheme and the Fehlberg Method

E. A. Novikov [1]

[1] *Institute of Computational Modeling, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; Akademgorodok 50/44, Krasnoyarsk, 660036, Russia; Dr. Sci., Professor, Principal Scientist,*
e-mail: novikov@icm.krasn.ru

Received June 16, 2015

Abstract: A third-order (3,2)-method allowing freezing the Jacobi matrix is constructed. Its main and intermediate numerical schemes are L-stable. An accuracy control inequality is obtained using an embedded method of second order. A stability control inequality for the explicit three-stage Runge–Kutta–Fehlberg method of third order is proposed. A variable structure algorithm is formulated. An explicit or L-stable method is chosen according to the stability criterion at each step. Numerical results are discussed.

Keywords: stiff systems, (m,k)-schemes, Fehlberg method, Runge–Kutta methods, accuracy and stability control, variable structure algorithm, ordinary differential equations, numerical methods.

References

1. E. Hairer and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations. II. Stiff and Differential-Algebraic Problems* (Springer, Berlin, 1996; Mir, Moscow, 1999).

2. E. Hairer, S. P. Nörsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations. I. Nonstiff Problems* (Springer, Berlin, 1987; Mir, Moscow, 1990).

3. E. A. Novikov and Yu. V. Shornikov, *Computer Simulation of Stiff Hybrid Systems* (Novosibirsk Tech. Univ., Novosibirsk, 2012) [in Russian].

4. N. D. Demidenko, V. A. Kulagin, and Yu. I. Shokin, *Modeling and Computational Technologies of Distributed Systems* (Nauka, Novosibirsk, 2012) [in Russian].

5. H. H. Rosenbrock, "Some General Implicit Processes for the Numerical Solution of Differential Equations," Comput. J. **5** (4), 329–330 (1963).

6. V. A. Novikov, E. A. Novikov, and L. A. Yumatova, "Freezing of the Jacobi Matrix in the Second Order Rosenbrock Method," Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. **27** (3), 385–390 (1987) [USSR Comput. Math. Math. Phys. **27** (2), 41–45 (1987)].

7. E. A. Novikov and A. L. Dvinskii, "Jacoby Matrix Freezing for Rosenbrock-Type Methods," Vychisl. Tekhnol. **10**, 108–114 (2005).

8. A. E. Novikov and E. A. Novikov, "Numerical Integration of Stiff Systems with Low Accuracy," Mat. Model. **22** (1), 46–56 (2010) [Math. Models Comput. Simul. **2** (4), 443–452 (2010)].

9. E. A. Novikov, "Construction of an Algorithm for the Integrating Stiff Differential Equations on Nonuniform Schemes," Dokl. Akad. Nauk SSSR **278** (2), 272–275 (1984) [Sov. Math. Dokl. **30** (2), 358–361 (1984)].

10. V. A. Novikov and E. A. Novikov, "Control of the Stability of Explicit One-Step Methods of Integrating Ordinary Differential Equations," Dokl. Akad. Nauk SSSR **277** (5), 1058–1062 (1984) [Sov. Math. Dokl. **30** (1), 211–215 (1984)].

11. E. A. Novikov, *Explicit Methods for Stiff Systems* (Nauka, Novosibirsk, 1997) [in Russian].

12. E. A. Novikov, Yu. A. Shitov, and Yu. I. Shokin, "One-Step Noniteration Method for Solving Stiff Systems," Dokl. Akad. Nauk SSSR **301** (6), 1310–1314 (1988).

13. G. G. Dahlquist, "A Special Stability Problem for Linear Multistep Methods," BIT Numer. Math. **3** (1), 27–43 (1963).

14. G. V. Demidov and L. A. Yumatova, *The Investigation of Precision of Implicit One-Step Methods*, Preprint No. 25 (Comput. Center of Siberian Branch of USSR Academy of Sciences, Novosibirsk, 1976).

15. E. Fehlberg, *Low Order Classical Runge–Kutta Formulas with Step Size Control and Their Application to Some Heat Transfer Problems*, NASA Technical Report R 315 (NASA, Huntsville, 1969).

16. G. D. Byrne and A. C. Hindmarsh, "Stiff ODE Solvers: A Review of Current and Coming Attractions," J. Comput. Phys. **70** (1), 1–62 (1987).

17. W. H. Enright, T. E. Hull, and B. Lindberg, "Comparing Numerical Methods for Stiff Systems of ODE's," BIT Numer. Math. **15** (1), 10–48 (1975).

18. F. Mazzia and C. Magherini, *Test Set for Initial Value Problem Solvers*, Technical Report 4/2008 (University of Bari, Bari, 2008).