

УДК 519.622

АЛГОРИТМ ПЕРЕМЕННОГО ПОРЯДКА И ШАГА НА ОСНОВЕ СТАДИЙ МЕТОДА ДОРМАНДА–ПРИНСА ВОСЬМОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

А. Е. Новиков¹, Е. А. Новиков²

Построено неравенство для контроля устойчивости тринадцатистадийного метода Дорманда–Принса восьмого порядка точности. На основе первых семи стадий построен метод первого порядка с расширенной областью устойчивости. Сформулирован алгоритм интегрирования переменного порядка. Приведены результаты расчетов жестких задач, подтверждающие повышение эффективности алгоритма с переменным порядком по сравнению с расчетами по фиксированной схеме. Работа поддержана грантами РФФИ № 05–01–00579 и № 06–08–00920, а также грантом Президента РФ НШ–3428.2006.9.

Ключевые слова: жесткие системы, явные методы, контроль точности и устойчивости, методы переменного порядка, обыкновенные дифференциальные уравнения, одношаговые разностные методы.

1. Введение. При численном решении задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности возникает необходимость использования алгоритмов на основе явных методов. Методы интегрирования на основе неявных или полужавных численных схем, как правило, используют обращение 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.

В настоящее время можно выделить два подхода к контролю устойчивости [1, 2]. Первый связан с оценкой максимального собственного значения матрицы Якоби через ее норму с последующим контролем (наряду с точностью) неравенства $h\|f_y\| \leq D$ [1], где положительная постоянная D связана с размером области устойчивости. Ясно, что для явных методов, где матрица Якоби не участвует в вычислительном процессе, это приводит дополнительно к ее нахождению и, следовательно, к увеличению вычислительных затрат. Второй подход основан на оценке максимального собственного числа $\lambda_{\max}$ матрицы Якоби степенным методом через приращения правой части системы дифференциальных уравнений с последующим контролем неравенства $h|\lambda_{\max}| \leq D$ [2]. Во всех рассмотренных ситуациях такая оценка не приводит к увеличению вычислительных затрат [3].

В настоящей статье с применением предложенного в [2] способа оценки максимального собственного значения матрицы Якоби построено неравенство для контроля устойчивости метода Дорманда–Принса восьмого порядка точности [4]. Приведены результаты расчетов, подтверждающие повышение эффективности алгоритма с переменным порядком по сравнению с расчетами по фиксированной схеме.

2. Метод Дорманда–Принса. Рассмотрим задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

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

где y и f — N -мерные вещественные вектор-функции, t — независимая переменная. Пусть h — шаг интегрирования. Для решения задачи (1) будем использовать явные формулы типа Рунге–Кутты вида

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

¹ Сибирский федеральный университет, ул. Академика Киренского, 26 а, 660051, Красноярск; e-mail: jibuti88@mail.ru

² Институт вычислительного моделирования СО РАН, Академгородок, 660036, Красноярск; e-mail: novikov@icm.krasn.ru

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= 0, & \alpha_2 &= \frac{1}{18}, & \alpha_3 &= \frac{1}{12}, & \alpha_4 &= \frac{1}{8}, \\
\alpha_5 &= \frac{5}{16}, & \alpha_6 &= \frac{3}{8}, & \alpha_7 &= \frac{59}{400}, & \alpha_8 &= \frac{93}{200}, \\
\alpha_9 &= \frac{5490023248}{9719169821}, & \alpha_{10} &= \frac{13}{20}, & \alpha_{11} &= \frac{1201146811}{1299019798}, & \alpha_{12} &= \alpha_{13} = 1, \\
\beta_{42} &= \beta_{52} = \beta_{62} = \beta_{63} = \beta_{72} = \beta_{73} = \beta_{82} = \beta_{83} = \beta_{92} = \beta_{93} = 0, \\
\beta_{10,2} &= \beta_{10,3} = \beta_{11,2} = \beta_{11,3} = \beta_{12,2} = \beta_{12,3} = \beta_{13,2} = \beta_{13,3} = \beta_{13,12} = 0, \\
\beta_{21} &= \frac{1}{18}, & \beta_{31} &= \frac{1}{48}, & \beta_{32} &= \frac{1}{16}, & \beta_{41} &= \frac{1}{32}, \\
\beta_{43} &= \frac{3}{32}, & \beta_{51} &= \frac{5}{16}, & \beta_{53} &= -\frac{75}{64}, & \beta_{54} &= \frac{75}{64}, \\
\beta_{61} &= \frac{3}{80}, & \beta_{64} &= \frac{3}{16}, & \beta_{65} &= \frac{3}{20}, & \beta_{71} &= \frac{29443841}{614563906}, \\
\beta_{74} &= \frac{77736538}{692538347}, & \beta_{75} &= -\frac{28693883}{1125000000}, & \beta_{76} &= \frac{23124283}{1800000000}, & \beta_{81} &= \frac{16016141}{946692911}, \\
\beta_{84} &= \frac{61564180}{158732637}, & \beta_{85} &= \frac{22789713}{633445777}, & \beta_{86} &= \frac{545815736}{2771057229}, & \beta_{87} &= -\frac{180193667}{1043307555}, \\
\beta_{91} &= \frac{39632708}{573591083}, & \beta_{94} &= -\frac{433636366}{683701615}, & \beta_{95} &= -\frac{421739975}{2616292301}, & \beta_{96} &= \frac{100302831}{723423059}, \\
\beta_{97} &= \frac{790204164}{839813087}, & \beta_{98} &= \frac{800635310}{3783071287}, & \beta_{10,1} &= \frac{246121993}{1340847787}, & \beta_{10,4} &= -\frac{37695042795}{15268766246}, \\
\beta_{10,5} &= -\frac{309121744}{1061227803}, & \beta_{10,6} &= -\frac{12992083}{490766935}, & \beta_{10,7} &= \frac{6005943493}{2108947869}, & \beta_{10,8} &= \frac{393006217}{1396673457}, \\
\beta_{10,9} &= -\frac{45442868181}{3398467696}, & \beta_{11,1} &= -\frac{1028468189}{846180014}, & \beta_{11,4} &= \frac{8478235783}{508512852}, & \beta_{11,5} &= \frac{1311729495}{1432422823}, \\
\beta_{11,6} &= -\frac{10304129995}{1701304382}, & \beta_{11,7} &= -\frac{48777925059}{3047939560}, & \beta_{11,8} &= \frac{15336726248}{1032824649}, & \beta_{11,9} &= -\frac{45442868181}{3398467696}, \\
\beta_{11,10} &= \frac{3065993473}{597172653}, & \beta_{12,1} &= \frac{185892177}{718116043}, & \beta_{12,4} &= -\frac{3185094517}{667107341}, & \beta_{12,5} &= -\frac{477755414}{1098053517}, \\
\beta_{12,6} &= -\frac{703635378}{230739211}, & \beta_{12,7} &= \frac{5731566787}{1027545527}, & \beta_{12,8} &= \frac{5232866602}{850066563}, & \beta_{12,9} &= -\frac{4093664535}{808688257}, \\
\beta_{12,10} &= \frac{3962137247}{1805957418}, & \beta_{12,11} &= \frac{65686358}{487910083}, & \beta_{13,1} &= \frac{403863854}{491063109}, & \beta_{13,4} &= -\frac{5068492393}{434740067}, \\
\beta_{13,5} &= -\frac{411421997}{543043805}, & \beta_{13,6} &= \frac{652783627}{914296604}, & \beta_{13,7} &= \frac{11173962825}{925320556}, & \beta_{13,8} &= -\frac{13158990841}{6184727034}, \\
\beta_{13,9} &= \frac{3936647629}{1978049680}, & \beta_{13,10} &= -\frac{160528059}{685178525}, & \beta_{13,11} &= \frac{248638103}{1413531060}.
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
p_{81} &= \frac{13451932}{455176623}, & p_{82} &= p_{83} = p_{84} = p_{85} = 0, \\
p_{86} &= -\frac{808719846}{976000145}, & p_{87} &= \frac{1757004468}{5645159321}, & p_{88} &= \frac{656045339}{265891186}, & p_{89} &= -\frac{3867574721}{1518517206}, \\
p_{8,10} &= \frac{465885868}{322736535}, & p_{8,11} &= \frac{53011238}{667516719}, & p_{8,12} &= \frac{2}{45}, & p_{8,13} &= 0.
\end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
p_{71} &= \frac{14005451}{335480064}, & p_{72} &= p_{73} = p_{74} = p_{75} = 0, \\
p_{76} &= -\frac{59238493}{1068277825}, & p_{77} &= \frac{181606767}{758867731}, & p_{78} &= \frac{561292985}{797845732}, & p_{79} &= -\frac{1041891430}{1371343529}, \\
p_{7,10} &= \frac{760417239}{1151165299}, & p_{7,11} &= \frac{118820643}{751138087}, & p_{7,12} &= -\frac{528747749}{2220607170}, & p_{7,13} &= \frac{1}{4}.
\end{aligned} \tag{5}$$

При значениях коэффициентов (4) схема (2), (3) имеет восьмой порядок точности [4].

3. Контроль точности и устойчивости. Согласно [4], численная формула (2), (3) с коэффициентами (5) имеет седьмой порядок. Тогда для контроля точности схемы восьмого порядка можно использовать

оценку ошибки δ_n следующего вида:

$$\delta_n = \sum_{i=1}^{13} (p_{8i} - p_{7i})k_i. \quad (6)$$

В результате для контроля точности вычислений применяется неравенство

$$\|\delta_n\| \leq \varepsilon, \quad (7)$$

где $\|\cdot\|$ — некоторая норма в $\mathbb{R}^N$, ε — требуемая точность расчетов. Учитывая соотношение $\delta_n = O(h^8)$, шаг h^{ac} по точности выбирается по формуле

$$h^{\text{ac}} = qh, \quad (8)$$

где значение q находится из уравнения $q^8 \|\delta_n\| = \varepsilon$. Если $q < 1$, то происходит повторное вычисление решения (возврат) с шагом h , равным qh . В противном случае вычисляется приближенное решение, а прогнозируемый шаг вычисляется по формуле (8). Неравенство (7) хорошо зарекомендовало себя при решении многих практических задач и будет использоваться ниже. В дальнейшем алгоритм переменного шага на основе схемы (2) с коэффициентами (3)–(5) и неравенством для контроля точности (7) назовем DP78.

Построим неравенство для контроля устойчивости. Для этого применим (2) 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:

$$k_1 = Xy_n, \quad k_2 = \left(X + \frac{1}{18}X^2\right)y_n, \quad k_3 = \left(X + \frac{1}{12}X^2 + \frac{1}{288}X^3\right)y_n,$$

где $X = hA$. Нетрудно видеть, что имеют место соотношения

$$8(2k_3 - 3k_2 + k_1) = \frac{1}{18}X^3y_n, \quad k_2 - k_1 = \frac{1}{18}X^2y_n.$$

Теперь оценку максимального собственного значения матрицы Якоби можно вычислить степенным методом. Введем обозначение

$$v_n = 8 \max_{1 \leq i \leq N} \frac{|(2k_3 - 3k_2 + k_1)_i|}{|(k_2 - k_1)_i|}. \quad (9)$$

Тогда согласно [3] для контроля устойчивости метода Дорманда–Принса можно применять неравенство

$$v_n \leq D, \quad (10)$$

где постоянная D ограничивает интервал устойчивости.

Устойчивость методов типа Рунге–Кутты обычно исследуется на скалярном тестовом уравнении

$$y' = \lambda y, \quad \operatorname{Re}(\lambda) < 0. \quad (11)$$

Применяя (2) с коэффициентами (5) для решения уравнения (11), получим, что функция устойчивости $Q_8(x)$ метода восьмого порядка точности имеет вид

$$Q_8(x) = 1 + \sum_{i=1}^{12} c_{8,i}x^i, \quad x = h\lambda, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \text{где } c_{8,1} &= 1.0, & c_{8,2} &= 0.5, & c_{8,3} &= 0.166666666666667, \\ c_{8,4} &= 0.416666666666667 \times 10^{-1}, & c_{8,5} &= 0.833333333333333 \times 10^{-2}, & c_{8,6} &= 0.138888888888889 \times 10^{-2}, \\ c_{8,7} &= 0.19841269841270 \times 10^{-3}, & c_{8,8} &= 0.24801587301587 \times 10^{-4}, & c_{8,9} &= 0.27521279901047 \times 10^{-5}, \\ c_{8,10} &= 0.24231996586959 \times 10^{-6}, & c_{8,11} &= 0.24389718205443 \times 10^{-7}, & c_{8,12} &= -0.20346152896858 \times 10^{-9}. \end{aligned}$$

Область устойчивости (приведены линии уровня $|Q_8(x)| = q$ для $q = 0.05, 0.1, 0.3, 0.7$ и 1.0) метода восьмого порядка приведена на рис. 1.

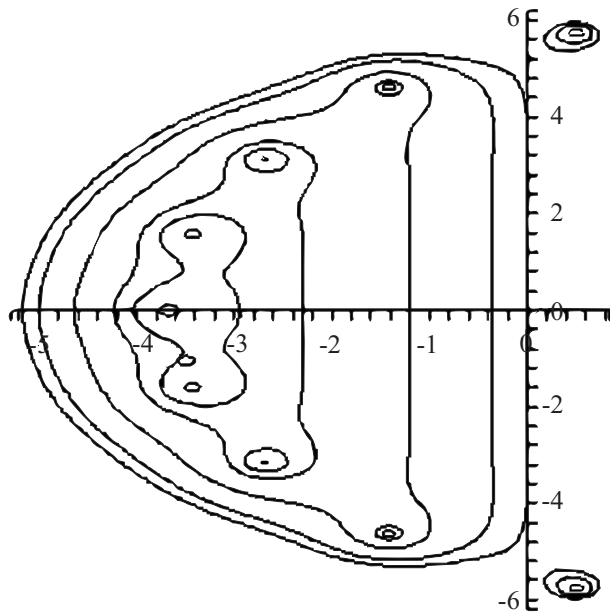


Рис. 1. Область устойчивости метода восьмого порядка точности

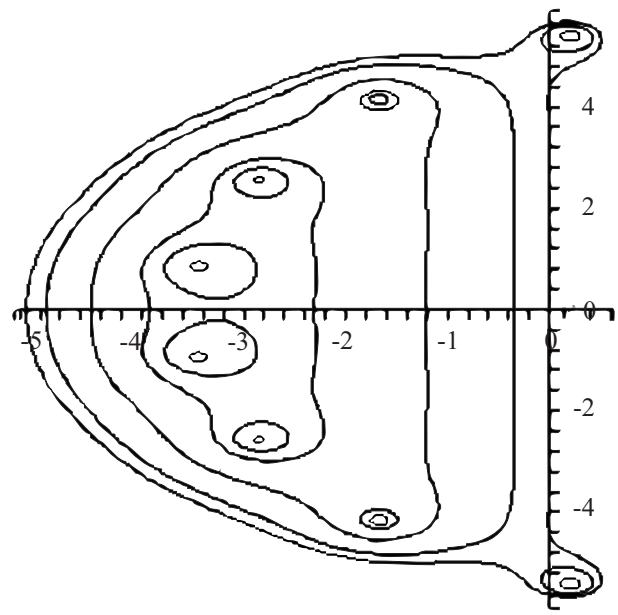


Рис. 2. Область устойчивости метода седьмого порядка точности

Из рис. 1 следует, что интервал устойчивости метода восьмого порядка приблизительно равен 5. Функция устойчивости $Q_7(x)$ метода седьмого порядка точности имеет вид

$$Q_7(x) = 1 + \sum_{i=1}^{12} c_{7,i} x^i, \quad x = h\lambda, \quad (13)$$

где $c_{7,1} = 1.0$, $c_{7,2} = 0.5$, $c_{7,3} = 0.166666666666667$,
 $c_{7,4} = 0.416666666666667 \times 10^{-1}$, $c_{7,5} = 0.833333333333333 \times 10^{-2}$, $c_{7,6} = 0.138888888888889 \times 10^{-2}$,
 $c_{7,7} = 0.19841269841270 \times 10^{-3}$, $c_{7,8} = 0.25044253893357 \times 10^{-4}$, $c_{7,9} = 0.25810595673311 \times 10^{-5}$,
 $c_{7,10} = 0.27974369233314 \times 10^{-6}$, $c_{7,11} = 0.10950482491122 \times 10^{-7}$, $c_{7,12} = -0.10214473550959 \times 10^{-9}$.

Область устойчивости метода седьмого порядка приведена на рис. 2. Интервал устойчивости метода седьмого порядка тоже приблизительно равен 5. Поэтому в неравенстве (10) положим $D = 5$. Учитывая, что $v_n = O(h)$, шаг h^{st} по устойчивости можно выбирать по формуле $h^{\text{st}} = rh$, где r вычисляется из равенства $rv_n = D$.

Оценка (9) является грубой, поскольку

- вовсе не обязательно максимальное собственное число сильно отделено от остальных,
- в степенном методе применяется мало итераций,
- дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (1).

В этой связи контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max \left[h_n, \min (h^{\text{ac}}, h^{\text{st}}) \right], \quad (14)$$

где h_n есть последний успешный шаг интегрирования. Отметим, что формула (14) применяется для прогноза величины шага интегрирования h_{n+1} после успешного вычисления решения с предыдущим 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 формула (14). Данная формула позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость.

Собственно говоря, именно наличие данного участка существенно ограничивает возможности применения явных методов для решения жестких задач.

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 средней жесткости. Отметим, что в зависимости от интервала интегрирования и размерности системы дифференциальных уравнений одна и та же задача может быть отнесена к нежесткой, средней жесткости или жесткой. Если интервал интегрирования таков, что решение представляет собой только переходный участок (решение типа погранслоного), соответствующий максимальному собственному значению матрицы Якоби, а участок установления отсутствует, то такая задача к жестким не относится. Ее решение может быть вычислено явным методом с достаточно малой областью устойчивости. Однако если участок установления велик, то могут возникнуть проблемы с применением явных методов, даже с контролем устойчивости.

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

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i, \quad y_{n,i} = y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j, \quad k_i = hf(t_n + \alpha_i h, y_{n,i}), \quad (15)$$

где $y_{n,i}$ называют промежуточными (или внутренними) схемами метода (15). Введем в рассмотрение матрицу B_m с элементами b_{ij} вида

$$\begin{aligned} b_{1i} &= 1, \quad 1 \leq i \leq m, \quad b_{ki} = 0, \quad 2 \leq k \leq m, \quad 1 \leq i \leq k-1, \\ b_{ki} &= \sum_{j=k-1}^{i-1} \beta_{ij} b_{k-1,j}, \quad 2 \leq k \leq m, \quad k \leq i \leq m, \end{aligned} \quad (16)$$

где β_{ij} , $2 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq i-1$, определены соотношениями (3). Применяя (15) для решения линейного скалярного уравнения (11), получим $y_{n+1} = Q_m(x)y_n$, $x = h\lambda$, где функция устойчивости $Q_m(x)$ имеет вид

$$Q_m(x) = 1 + \sum_{i=1}^m c_i x^i, \quad c_i = \sum_{j=i}^m b_{ij} p_j. \quad (17)$$

Обозначим $C_m = (c_1, \dots, c_m)^T$ и $P_m = (p_1, \dots, p_m)^T$. Тогда из (17) следует, что коэффициенты многочлена устойчивости c_i , $1 \leq i \leq m$, и коэффициенты p_i , $1 \leq i \leq m$, метода (15) связаны соотношением

$$B_m P_m = C_m. \quad (18)$$

Теперь при заданных β_{ij} , $2 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq i-1$, и c_i , $1 \leq i \leq m$, коэффициенты p_i , $1 \leq i \leq m$, можно определить из (18). Требование первого порядка точности схемы (15) означает, что $\sum_{i=1}^m p_i = 1$.

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 предложенным в [3] 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 равенство $|Q_m(x_i)| = 1$. 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 устойчивости по мнимой оси.

При $m = 13$ максимальный интервал устойчивости равен 338. Подставляя соответствующие c_i , $1 \leq i \leq 13$, в (18), получим коэффициенты p_i , $1 \leq i \leq 13$, метода (15) первого порядка точности с максимальным интервалом устойчивости. Учитывая, что размер области устойчивости по вещественной оси метода (2), (5) равен 5, для задач, в которых шаг в основном ограничен по устойчивости, 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 (15) малы, а это при больших шагах приводит к большим погрешностям в промежуточных вычислениях.

Из результатов численных экспериментов следует, что наиболее эффективным является метод первого порядка (15) с коэффициентами β_{ij} (3) при $m = 7$. Коэффициенты c_i , $2 \leq i \leq 7$, многочлена устойчивости $Q_7(x)$ с максимальным интервалом устойчивости, равным 98.0, имеют вид

$$\begin{aligned} c_2 &= 0.16326530612245, & c_3 &= 0.99958350687216 \times 10^{-2}, & c_4 &= 0.29142376293650 \times 10^{-3}, \\ c_5 &= 0.43614440711587 \times 10^{-5}, & c_6 &= 0.32366931882441 \times 10^{-7}, & c_7 &= 0.94364232893419 \times 10^{-10}, \end{aligned}$$

при этом из (18) получим

$$\begin{aligned} p_1 &= -0.43635713190292, & p_2 &= -0.39757930691747, & p_3 &= 0.11027283617527 \times 10, \\ p_4 &= 0.72030701125358, & p_5 &= 0.10208963607634 \times 10^{-1}, & p_6 &= 0.56373316433595 \times 10^{-3}, \\ p_7 &= 0.12836904213518 \times 10^{-3}. \end{aligned} \quad (19)$$

Область устойчивости данного метода приведена на рис. 3.

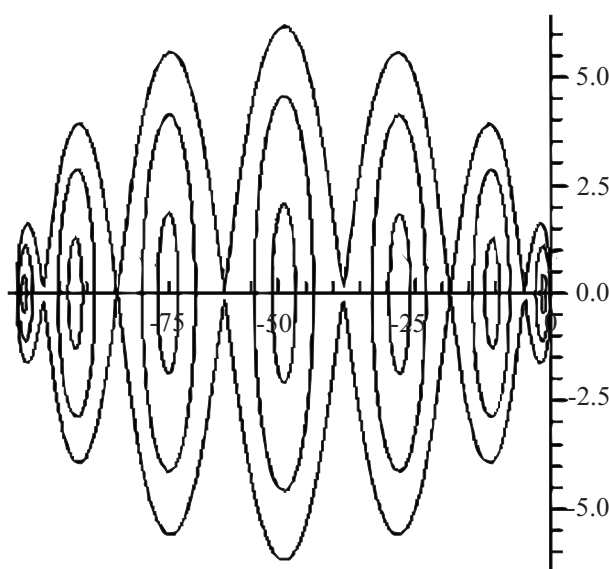


Рис. 3. Область устойчивости метода (15), (19)

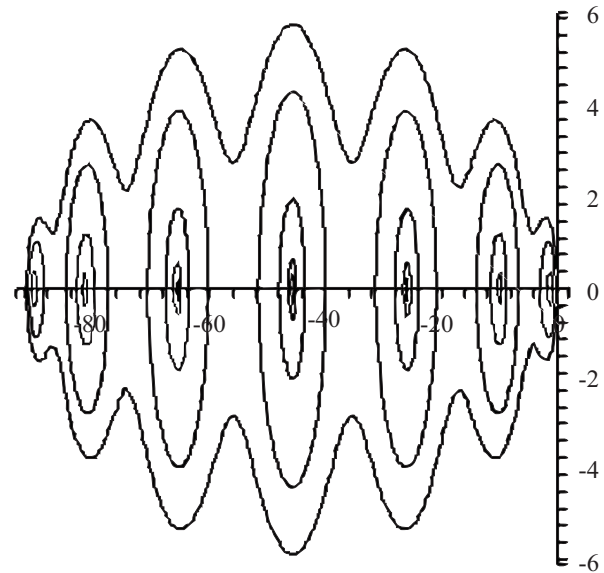


Рис. 4. Область устойчивости метода (15), (20)

Приведем еще один набор коэффициентов

$$\begin{aligned} c_2 &= 0.17242757067512, & c_3 &= 0.11240089243768 \times 10^{-1}, & c_4 &= 0.34986371648830 \times 10^{-3}, \\ c_5 &= 0.55971678758885 \times 10^{-5}, & c_6 &= 0.44431955012931 \times 10^{-7}, & c_7 &= 0.13862209013567 \times 10^{-9}, \end{aligned}$$

при которых в экстремальных точках x_i , $1 \leq i \leq 6$, многочлена устойчивости выполняется условие $|Q_7(x)| = 0.9$. Подставляя эти значения c_i , $2 \leq i \leq 7$, в (18), получим коэффициенты

$$\begin{aligned} p_1 &= -0.41342955189830, & p_2 &= -0.57548324135785, & p_3 &= 0.11243725642680 \times 10, \\ p_4 &= 0.85058623738482, & p_5 &= 0.12991731772814 \times 10^{-1}, & p_6 &= 0.77368430693719 \times 10^{-3}, \\ p_7 &= 0.18857552359567 \times 10^{-3} \end{aligned} \quad (20)$$

метода (15) первого порядка точности почти с максимальным интервалом устойчивости, равным приблизительно 90. Область устойчивости этого метода приведена на рис. 4. Область устойчивости построенного метода первого порядка точности по вещественной оси примерно в 18 раз шире области устойчивости численной схемы (2), (5). Кроме того, метод первого порядка по числу вычислений правой части задачи (1) почти в два раза экономнее данной численной схемы. Поэтому для задач, в которых шаг ограничен в основном по устойчивости, предполагаемое теоретическое повышение эффективности составляет 36 раз.

Построим неравенства для контроля точности и устойчивости метода (15). В неравенстве для контроля точности будем применять оценку локальной ошибки $\delta_{n,1}$. С применением разложений точного и

приближенного решений в ряды Тейлора по степеням h до членов с h^2 включительно получим, что $\delta_{n,1}$ имеет вид $\delta_{n,1} = 0.5(1 - 2c_2)h^2(f_t + f_y f) + O(h^3)$, где элементарные дифференциалы f_t и $f_y f$ вычислены на точном решении $y(t_n)$. Нетрудно видеть также, что имеет место соотношение

$$k_2 - k_1 = \frac{1}{18} h^2 (f_{nt} + f_{ny} f_n) + O(h^3),$$

где элементарные дифференциалы f_{nt} и $f_{ny} f_n$ вычислены на приближенном решении y_n . Тогда для контроля точности численной формулы (15) можно применять неравенство

$$|d(1 - 2c_2)| \|k_2 - k_1\| \leq \varepsilon, \quad (21)$$

где $d = 9$, $\|\cdot\|$ — некоторая норма в $\mathbb{R}^N$, ε — требуемая точность расчетов.

В построенном неравенстве стадия k_1 вычисляется в точке t_n , а стадия k_2 — в точке $(t_n + h/18)$. Так как ни одна стадия не вычисляется в точке t_{n+1} , то при быстром изменении решения это может приводить к потере точности вычислений. Поэтому в алгоритме интегрирования контроль (21) используется как предварительный. Учитывая соотношение $hf(t_{n+1}, y_{n+1}) - k_1 = h^2(f_{nt} + f_{ny} f_n) + O(h^3)$, окончательное решение по точности принимается проверкой следующего неравенства:

$$0.5|1 - 2c_2| \|hf(t_{n+1}, y_{n+1}) - k_1\| \leq \varepsilon. \quad (22)$$

Использование двух неравенств для контроля точности вычислений позволяет существенно сократить число повторных вычислений решения вследствие нарушения точности расчетов. Дополнительное сокращение возвратов достигается выбором $d = 1$ в формуле (21). Поскольку интервал устойчивости численной схемы (15), (20) ограничен числом 90, то для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $v_n \leq 90$, где v_n определяется по формуле (9).

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 (погранслоев), то явный метод Эйлера будет в 7 раз эффективнее построенного метода. Естественно, что при высокой точности расчетов на переходных участках эффективнее будет метод (2), (5). 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 (2), (5) переход на численную схему (15), (20) 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 типа (14).

5. Результаты расчетов. Расчеты проводились на IBM PC Athlon(tm)XP 2000 с двойной точностью. В конкретных расчетах норма в неравенствах для контроля точности вычислялась по формуле

$$\|\delta_n\| = \max_{1 \leq i \leq N} \left[\frac{|\delta_n^i|}{|y_n^i| + r} \right], \text{ где } i \text{ — номер компоненты, } r \text{ — положительный параметр. Если по } i\text{-й компоненте}$$

решения выполняется неравенство $|y_n^i| < r$, то контролируется абсолютная ошибка εr , в противном случае — относительная ошибка ε . В расчетах параметр r выбирался таким образом, чтобы по всем компонентам решения фактическая точность была не хуже задаваемой. Для всех примеров задаваемая точность ε полагалась равной $\varepsilon = 10^{-6}$. 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).

Пример 1 (см. [5]):

$$\begin{aligned} y_1' &= -0.04y_1 + 0.01y_2y_3, & y_2' &= 400y_1 - 100y_2y_3 - 3000y_2^2, & y_3' &= 30y_2^2, \\ t &\in [0, 40], & y_1(0) &= 1, & y_2(0) &= y_3(0) = 1, & h_0 &= 10^{-5}. \end{aligned}$$

При вычислении решения алгоритмом DP78 без контроля устойчивости затраты составили isa = 21 960, iwo = 12 134, ifu = 431 088, т.е. больше половины шагов сопровождаются повторным вычислением решения вследствие нарушения точности расчетов. Это естественно для всех алгоритмов без контроля устойчивости.

Для алгоритма DP78ST затраты следующие: isa = 22 042, iwo = 996, ifu = 298 498. Из сравнения результатов расчетов следует, что контроль устойчивости приводит к повышению эффективности расчетов почти в 1.5 раза. При расчетах с переменным порядком имеем isa = 7 696, iwo = 9, ifu = 54 061.

Пример 2 (см. [5]):

$$y_1' = -0.013y_1 - 1000y_1y_3, \quad y_2' = -2500y_2y_3, \quad y_3' = -0.013y_1 - 1000y_1y_3 - 2500y_2y_3, \\ t \in [0, 50], \quad y_1(0) = 1, \quad y_2(0) = 1, \quad y_3(0) = 0, \quad h_0 = 2.9 \times 10^{-4}.$$

Для алгоритма DP78 без контроля устойчивости затраты составили $isa = 36\,699$, $iwo = 20\,147$, $ifu = 718\,851$. Для алгоритма DP78ST имеем $isa = 36\,814$, $iwo = 576$, $ifu = 485\,494$. И в этом случае контроль устойчивости приводит к повышению эффективности расчетов почти в 1.5 раза. При расчетах с переменным порядком имеем $isa = 6\,760$, $iwo = 0$, $ifu = 47\,368$. Заметим, что для одного из лучших методов DVERK78 системы Maple 9.5 на данном примере имеем $ifu = 598\,890$.

Пример 3 (см. [5]):

$$y_1' = 77.27(y_2 - y_1y_2 + y_1 - 8.375 \times 10^{-6}y_1^2), \quad y_2' = \frac{-y_2 - y_1y_2 + y_3}{77.27}, \quad y_3' = 0.161(y_1 - y_3), \\ t \in [0, 300], \quad y_1(0) = 4, \quad y_2(0) = 1.1, \quad y_3(0) = 4, \quad h_0 = 2 \times 10^{-3}.$$

Эта 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 составили $isa = 1\,434\,938$, $iwo = 778\,643$, $ifu = 27\,997\,910$, а для DP78ST — $isa = 1\,437\,875$, $iwo = 35\,173$, $ifu = 19\,114\,451$. При расчетах с переменным порядком имеем $isa = 132\,180$, $iwo = 166$, $ifu = 930\,915$. Такая же тенденция сохраняется при интегрировании всех рассмотренных задач и, в частности, десяти жестких тестовых примеров, приведенных в [5].

6. Заключение. Метод Дорманда–Принса [4] получил широкое распространение. Его программная реализация входит, пожалуй, во все известные библиотеки программ. Текст программы на Фортране приведен в монографии [6]. Численное исследование данного алгоритма проводилось многими авторами. Нам не хотелось бы лишний раз подтверждать его преимущества путем сравнения с другими алгоритмами с автоматическим выбором шага интегрирования при высокоточных расчетах, ибо это слишком известный факт. В частности, в [6, с. 209] отмечено, что метод Дорманда–Принса дает “Прекрасные численные результаты...” применительно к решению нежестких задач. Поэтому мы здесь ограничили его применением для решения жестких задач и на трех тестовых примерах показали повышение эффективности за счет дополнительного контроля устойчивости, а также за счет расчетов с переменным порядком.

Наиболее показательной является задача моделирования реакции Белоусова–Жаботинского, при решении которой алгоритмом без контроля устойчивости происходит почти 800 000 повторных вычислений решения за счет неустойчивости численной схемы. Это означает увеличение вычислительных затрат примерно на 9 000 000 дополнительных вычислений правой части исходной задачи, ибо повторное вычисление решения сопровождается двенадцатью дополнительными вычислениями функции f (хотя метод тринадцатистадийный, стадия k_1 зависит от размера шага линейно, и поэтому в случае возврата ее вычислять не нужно). Контроль устойчивости позволяет существенно сократить неоправданные возвраты и тем самым повысить эффективность алгоритма интегрирования. По сути дела, контроль устойчивости расширяет возможности метода Дорманда–Принса применительно к задачам средней жесткости.

Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, потому что оценка максимального собственного числа матрицы Якоби системы (1) осуществляется через ранее вычисленные стадии и не приводит к росту числа вычислений функции f . Как правило, для этих целей применяются три первые стадии. Такая оценка получается грубой. Однако применение контроля устойчивости в качестве ограничителя на рост шага и в качестве критерия выбора численной схемы позволяет избежать негативных последствий грубости оценки.

Применение на участке установления методов низкого порядка точности с расширенными областями устойчивости позволяет значительно увеличить размер шага интегрирования без увеличения вычислительных затрат. На переходных участках, где определяющую роль играет точность вычислений, эффективными являются методы более высокого порядка точности, но с небольшой областью устойчивости. Комбинирование методов низкого и высокого порядков с помощью неравенства для контроля устойчивости позволяет значительно повысить эффективность расчетов.

Существенную роль в выборе метода интегрирования — явный или L -устойчивый — играет размерность задачи. Если речь идет о решении нескольких уравнений, когда вычислительные затраты на декомпозицию матрицы Якоби мало отличаются от затрат на вычисление правой части системы дифференциальных уравнений, L -устойчивые методы будут предпочтительнее. Однако если речь идет о тысячах или даже миллионах уравнений, для которых обращение матрицы Якоби есть отдельная трудно-

выполнимая задача, явные методы могут оказаться значительно предпочтительнее даже для достаточно жестких задач, ибо в них не используется матрица Якоби. В любом случае здесь не идет речь о замене L -устойчивых методов явными, а осуществляется попытка “потеснить” неявные методы явными за счет контроля устойчивости численной схемы, а также за счет применения явных методов с расширенными областями устойчивости и расчетов с переменным порядком.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Shampine L.M.* Implementation of Rosenbrock methods // ACM Transaction on Mathematical Software. 1982. **8**, N 5. 93–113.
2. *Новиков Е.А., Новиков В.А.* Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // ДАН СССР. 1984. **277**, № 5. 1058–1062.
3. *Новиков Е.А.* Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997.
4. *Prince P.J., Dormand J.R.* High order embedded Runge-Kutta formulae // J. Comp. Appl. Math. 1981. **7**. 67–75.
5. *Enright W.H., Hull T.E.* Comparing numerical methods for the solutions of systems of ODE's // BIT. 1975. N 15. 10–48.
6. *Хайпер Э., Нерсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.

Поступила в редакцию
12.09.2007
