УДК 519.622

АЛГОРИТМ ИНТЕГРИРОВАНИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ТИПА РОЗЕНБРОКА И ЧЕСКИНО

Е. А. Новиков[1]

Построено неравенство для контроля устойчивости схемы Ческино второго порядка точности. На основе стадий этого метода предложена численная формула первого порядка с расширенным до 32 интервалом устойчивости. На основе L-устойчивой схемы типа Розенброка и численной формулы Ческино разработан алгоритм переменной структуры, в котором эффективная численная формула выбирается на каждом шаге по критерию устойчивости. Алгоритм предназначен для решения как жестких, так и нежестких задач. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность построенного алгоритма. Работа поддержана РФФИ (проекты 11–01–00106 и 11–01–00224).

Ключевые слова: жесткая задача, методы Ческино и Розенброка, контроль точности и устойчивости.

Введение. Во многих важных приложениях возникает проблема численного решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Кроме того, многие вычислители дискретизацией по пространственным переменным уравнения в частных производных приводят к обыкновенным дифференциальным уравнениям. Полученная таким образом задача, как правило, жесткая и большой размерности. Для решения жестких задач в основном применяются неявные методы, в которых основные затраты приходятся на декомпозицию матрицы Якоби. Для повышения эффективности расчетов в ряде алгоритмов используется замораживание матрицы Якоби, т.е. применение одной и той же матрицы на нескольких шагах интегрирования [1]. Наиболее успешно этот подход применяется в алгоритмах на основе многошаговых численных формул [2]. Такой прием достаточно просто применяется для методов, в которых стадии вычисляются с участием матрицы Якоби в некотором итерационном процессе. В алгоритмах интегрирования на основе известных безытерационных численных схем, к которым относятся методы типа Розенброка [3] и их различные модификации, вопрос о применении одной матрицы на нескольких шагах интегрирования более сложный. В таких алгоритмах матрица Якоби включена непосредственно в численную формулу и ее аппроксимация может приводить к понижению порядка точности. В [4] эта проблема изучается применительно к методам типа Розенброка. Доказано, что максимальный порядок точности данных методов равен двум, если в алгоритме интегрирования одна матрица Якоби применяется на нескольких шагах интегрирования. Это означает, что применение методов типа Розенброка будет эффективным при решении задач небольшой размерности или при небольшой точности расчетов.

Аналогом замораживания матрицы Якоби является применение в расчетах алгоритмов интегрирования на основе явных и L-устойчивых методов с автоматическим выбором численной схемы [5–7]. В этом случае эффективность алгоритма может быть повышена за счет расчета переходного участка, соответствующего максимальному собственному значению матрицы Якоби, по явному методу. В качестве критерия выбора эффективной численной формулы естественно применять неравенства для контроля устойчивости [8–10]. Отметим, что применение таких комбинированных алгоритмов полностью не снимает проблему замораживания матрицы Якоби [11].

В настоящей статье построено неравенство для контроля устойчивости метода Ческино второго порядка точности. На основе стадий данной численной формулы построена схема первого порядка с расширенной до 32 единиц по вещественной оси областью устойчивости. На основе L-устойчивой схемы типа Розенброка и рассмотренных явных численных формул разработан алгоритм переменной структуры, в котором эффективная численная формула выбирается на каждом шаге по критерию устойчивости. Алгоритм предназначен для решения жестких и нежестких задач с точностью расчетов порядка 1% и ниже. Приведены результаты вычислений, подтверждающие работоспособность и эффективность построенного алгоритма.

[1] Институт вычислительного моделирования СО РАН, Академгородок, 660036, Красноярск; профессор, главный науч. сотр., e-mail: novikov@icm.krasn.ru

1. Методы типа Розенброка. 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 — N-мерные вещественные вектор-функции, t — независимая переменная. Для решения системы (1) применим методы типа Розенброка, которые имеют вид

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n k_i = hf\Bigl(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j\Bigr),$$

где $D_n = E - ahf'_n$; E — единичная матрица; $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ — матрица Якоби системы (1); h — шаг интегрирования; k_i, $1 \leqslant i \leqslant m$, — стадии метода; a, p_i и β_{ij} — вещественные константы, определяющие свойства точности и устойчивости численных формул.

Пусть при реализации этих методов применяется замораживание матрицы Якоби. Это означает, что при реализации методов типа Розенброка применяется матрица D_{n-i} вида $D_{n-i} = E - ahf'_{n-i}$, где i — число шагов с замороженной матрицей. Нетрудно видеть, что в этом случае имеет место соотношение $f'_{n-i} = f'_n - ih(f''f)_\zeta$, где матрица $(f''f)_\zeta$ вычисляется в некоторой точке ζ. Аналогичное соотношение можно получить при численном вычислении матрицы Якоби [12], поэтому далее будем предполагать, что при реализации методов типа Розенброка используется матрица $D_n = E - ahA_n$, где матрица A_n представима в виде $A_n = f'_n + hB_n + O(h^2)$, а матрица B_n не зависит от размера шага интегрирования. Данное предположение позволяет применять методы типа Розенброка с замораживанием как аналитической, так и численной матрицы Якоби, а также допускает некоторые другие виды ее аппроксимации.

2. Схема второго порядка точности. Рассмотрим двухстадийную схему типа Розенброка вида

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2, \quad D_n k_1 = hf(y_n), \quad D_n k_2 = hf(y_{n+\beta}), \tag{2}$$

где формулу $y_{n+\beta} = y_n + \beta k_1$ называют внутренней, или промежуточной численной схемой. Схема (2) будет иметь второй порядок точности, если $p_1 + p_2 = 1$ и $\beta p_2 = 0.5 - a$. Исследуем устойчивость этой схемы на линейной скалярной задаче $y' = \lambda y$, $y(0) = y_0$, где λ — произвольное комплексное число, такое, что $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$. Применяя (2) для решения этого уравнения и учитывая условия порядка, получим $y_{n+1} = Q(x)y_n$, где

$$Q(x) = \frac{1 + (1-2a)x + (a^2 - 2a + 0.5)x^2}{(1-ax)^2}, \quad x = \lambda h.$$

Отсюда следует, что для L-устойчивости численной формулы (2) необходимо выполнение равенства $a^2 - 2a + 0.5 = 0$.

Далее, из анализа результатов расчетов следует, что недостаточно хорошие свойства устойчивости внутренней (промежуточной) схемы $y_{n+\beta} = y_n + \beta k_1$ приводят к понижению эффективности алгоритма интегрирования вследствие увеличения ошибок в промежуточных вычислениях. Так как при условии $a^2 - 2a + 0.5 = 0$ основной метод L-устойчив, то потребуем аналогичного свойства от данной численной формулы. Применяя ее для решения $y' = \lambda y$, получим $y_{n+\beta} = Q_\beta(x)y_n$, где

$$Q_\beta(x) = \frac{1 + (\beta - a)x}{1 - ax}.$$

Отсюда следует, что внутренняя схема будет L-устойчивой, если $\beta = a$. Учитывая условия порядка и соотношение $\beta = a$, локальную ошибку δ_n схемы (2) можно записать в виде

$$\delta_n = \left(a - \frac{1}{3}\right)h^3 f'^2 f + \frac{9a-1}{12} h^3 f'' f^2 - ah^3 B_n f + O(h^4).$$

Уравнение $a^2 - 2a + 0.5 = 0$ имеет два корня: $a_1 = 1 - \sqrt{2}/2$ и $a_2 = 1 + \sqrt{2}/2$. Выберем $a = 1 - \sqrt{2}/2$, потому что в этом случае меньше коэффициент в главном члене $(a - 1/3)h^3 f'^2 f$ локальной ошибки. В результате получим набор коэффициентов

$$p_1 = \beta = a = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad p_2 = \frac{\sqrt{2}}{2},$$

при которых численная формула (2) имеет второй порядок точности, является L-устойчивой и обладает L-устойчивой промежуточной схемой.

Контроль точности схемы (2) будем осуществлять методом первого порядка точности

$$y_{n+1,1} = y_n + k_1.$$

Тогда в неравенстве для контроля точности вычислений можно использовать оценку ошибки ε_n следующего вида [9]:

$$\varepsilon_n = y_{n+1} - y_{n+1,1} = \frac{\sqrt{2}}{2}\,(k_2 - k_1).$$

Подчеркнем важную особенность построенной оценки ошибки. Из L-устойчивости основной численной схемы (2) следует, что для ее функции устойчивости $Q(x)$ выполняется соотношение $Q(x) \to 0$ при $x \to -\infty$. Так как для точного решения $y(t_{n+1}) = \exp(x)y(t_n)$ задачи $y' = \lambda y$ выполняется аналогичное свойство, то естественным будет требование стремления к нулю оценки ошибки ε_n при $x \to -\infty$. Однако для построенной оценки имеем $\varepsilon_n = O(1)$. Поэтому с целью исправления асимптотического поведения вместо ε_n рассмотрим оценки $\varepsilon_n(j_n)$ вида

$$\varepsilon_n(j_n) = D^{1-j_n}\varepsilon_n, \quad 1 \leqslant j_n \leqslant 2. \tag{3}$$

Нетрудно видеть, что с точностью до главного члена, т.е. первого члена в разложении ошибок в ряды Тейлора по степеням h, оценки ε_n и $\varepsilon_n(j_n)$ совпадают при любом значении j_n, причем $\varepsilon_n(2) \to 0$ при $x \to -\infty$. Теперь для контроля точности вычислений можно применять следующее неравенство:

$$||\varepsilon_n(j_n)|| \leqslant \varepsilon, \quad 1 \leqslant j_n \leqslant 2. \tag{4}$$

Здесь ε — требуемая точность интегрирования, $||\cdot||$ — некоторая норма в R^N. Применение $\varepsilon_n(j_n)$ вместо ε_n не приводит к существенному увеличению вычислительных затрат. При $x \to 0$ оценка $\varepsilon_n(1) = \varepsilon_n$ правильно отражает поведение ошибки и нет смысла проверять неравенство (4) при других значениях j_n. При резком увеличении шага поведение ε_n может оказаться неудовлетворительным, что проявляется в неоправданном уменьшении шага и повторных вычислениях решения. Поэтому при реализации алгоритма интегрирования неравенство (4) используется следующим образом. При каждом фиксированном n выбирается наименьшее значение j_n, при котором выполняется неравенство (4). Если оно не выполняется ни при каком j_n, то шаг уменьшается и решение вычисляется повторно.

Учитывая, что имеет место соотношение $\varepsilon_n(j_n) = O(h^2)$, шаг h^{roz} по точности выбирается по формуле $h^{\mathrm{roz}} = dh$, где d находится из уравнения $d^2||\varepsilon_n(j_n)|| = \varepsilon$. Если $d < 1$, то происходит повторное вычисление решения (возврат) с шагом h, равным dh. В противном случае вычисляется приближенное решение, а прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется по формуле $h_{n+1} = dh$. Неравенство (4) хорошо зарекомендовало себя при решении многих практических задач и будет ниже использоваться.

Оценку максимального собственного значения $w_{n,0} = h\lambda_{n,\,\max}$ матрицы Якоби системы (1), необходимую для перехода на явную формулу, получим по формуле

$$w_{n,0} = h\left\|\frac{\partial f}{\partial y}\right\| = h\max_{1\leqslant i\leqslant N}\sum_{j=1}^{N}\left|\partial f_i/\partial y_j\right|.$$

Ниже данная оценка будет применяться для автоматического выбора численной схемы — явной или L-устойчивой численной формулы.

3. Метод Ческино. Для решения системы (1) рассмотрим явную формулу типа Рунге–Кутта вида

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + p_{m1}k_1 + p_{m2}k_2 + p_{m3}k_3 + p_{m4}k_4,\\
&k_1 = hf(t_n, y_n), \quad k_2 = hf(t_n + \frac{1}{4}\,h, y_n + \frac{1}{4}\,k_1),\\
&k_3 = hf(t_n + \frac{1}{2}\,h, y_n + \frac{1}{2}\,k_2), \quad k_4 = hf(t_n + h, y_n + k_1 - 2k_2 + 2k_3),
\end{aligned} \tag{5}$$

где h — шаг интегрирования, k_i, $1 \leqslant i \leqslant 4$, — стадии метода, p_{mi}, $1 \leqslant i \leqslant 4$, — числовые коэффициенты, m — порядок точности метода. При коэффициентах

$$p_{21} = 1, \quad p_{22} = -2, \quad p_{23} = 2, \quad p_{24} = 0 \tag{6}$$

схема (5), (6) имеет второй порядок точности [13]. Схема (5) с коэффициентами

$$p_{41} = p_{44} = \frac{1}{6}, \quad p_{42} = 0, \quad p_{43} = \frac{2}{3}$$

имеет четвертый порядок. Тогда для контроля точности схемы второго порядка можно использовать оценку ошибки $\delta_{n,2}$ вида

$$\delta_{n,2} = \sum_{i=1}^{4} (p_{4i} - p_{2i}) k_i.$$

В результате для контроля точности вычислений применяется неравенство $||\delta_{n,2}|| \leqslant \varepsilon$, где $||\cdot||$ — некоторая норма в R^N, ε — требуемая точность расчетов. Учитывая, что имеет место соотношение $\delta_{n,2} = O(h^3)$, шаг h^{ac} по точности выбирается по формуле $h^{\text{ac}} = qh$, где q ищется из уравнения $q^3||\delta_{n,2}|| = \varepsilon$. Если $q < 1$, то происходит повторное вычисление решения (возврат) с шагом h, равным qh. В противном случае вычисляется приближенное решение, а прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется по формуле $h_{n+1} = qh$. Неравенство $||\delta_{n,2}|| \leqslant \varepsilon$ хорошо зарекомендовало себя при решении многих практических задач и будет ниже использоваться.

4. Контроль устойчивости метода Ческино. Построим неравенство для контроля устойчивости схемы (5). Для этого применим (5) для решения линейной задачи $y' = Ay$ с постоянной матрицей A. Первые три стадии k_1, k_2 и k_3 применительно к данной задаче имеют вид

$$k_1 = Xy_n, \quad k_2 = \Big[X + \frac{1}{4}\,X^2\Big] y_n, \quad k_3 = \Big[X + \frac{1}{2}\,X^2 + \frac{1}{8}\,X^3\Big] y_n,$$

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

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

Теперь оценку максимального собственного значения $w_{n,1}$ матрицы Якоби системы (1) можно вычислить степенным методом [9]. Введем обозначение

$$w_{n,1} = 2 \max_{1 \leqslant i \leqslant N} \left\{ \frac{|(k_1 - 2k_2 + k_3)_i|}{|(k_2 - k_1)_i|} \right\}. \tag{7}$$

Тогда для контроля устойчивости метода Ческино можно применять неравенство $w_{n,1} \leqslant D$, где число D ограничивает интервал устойчивости.

Устойчивость методов типа Рунге–Кутта обычно исследуется на скалярном тестовом уравнении $y' = \lambda y$, где λ — произвольное комплексное число, такое, что $\text{Re}(\lambda) < 0$. Смысл λ — это некоторое собственное значение матрицы Якоби задачи (1). Применяя (5), (6) для решения уравнения $y' = \lambda y$, получим, что функция устойчивости $Q_2(x)$ метода второго порядка точности имеет вид

$$Q_2(x) = 1 + x + \frac{1}{2}\,x^2 + \frac{1}{4}\,x^3,$$

а функция устойчивости $Q_4(x)$ метода четвертого порядка имеет вид

$$Q_4(x) = 1 + x + \frac{1}{2}\,x^2 + \frac{1}{6}\,x^3 + \frac{1}{24}\,x^4,$$

где $x = h\lambda$. Длина интервала устойчивости метода второго порядка примерно равна двум, а метода четвертого порядка — приблизительно равна 2.8 [10]. Поэтому в неравенстве $w_{n,1} \leqslant D$ положим $D = 2$. Учитывая, что $w_{n,1} = O(h)$, шаг h^{st} по устойчивости можно выбирать по формуле $h^{\text{st}} = rh$, где r вычисляется из равенства $rw_{n,1} = 2$.

Оценка (7) является грубой, потому что максимальное собственное значение не обязательно сильно отделено от остальных, в степенном методе применяется мало итераций и дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (1). Поэтому контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max\Big[h_n,\ \min\big(h^{\text{ac}},\ h^{\text{st}}\big)\Big], \tag{8}$$

где h_n — последний успешный шаг интегрирования.

Формула (8) применяется для прогноза 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 значения. Однако шаг не будет и увеличен, потому что не исключена возможность неустойчивости численной схемы. Формула (8) позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Из результатов расчетов алгоритмом интегрирования с контролем точности и дополнительным контролем устойчивости следует, что фактическая точность вычисления решения на интервале установления значительно выше задаваемой. Это естественно, потому что старые ошибки подавляются за счет контроля устойчивости, а новые ошибки невелики за счет малости производных решения. В такой ситуации эффективнее проводить вычисления методом более низкого порядка точности с широкой областью устойчивости.

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

$$y_{n+1} = y_n + r_1k_1 + r_2k_2 + r_3k_3 + r_4k_4, \tag{9}$$

где стадии k_i, $1 \leqslant i \leqslant 4$, вычислены по формулам (5), а коэффициенты r_i, $1 \leqslant i \leqslant 4$, подлежат определению. Заметим, что при $r_1 = 1$, $r_2 = -2$, $r_3 = 2$ и $r_4 = 0$ численная формула (9) имеет второй порядок точности и совпадает с (5) с коэффициентами (6). Построим менее точную схему с максимальным интервалом устойчивости. Для этого применим (9) для решения скалярного тестового уравнения $y' = \lambda y$. Получим $y_{n+1} = Q_1(x)y_n$, где функция устойчивости $Q_1(x)$ имеет вид

$$Q_1(x) = 1 + (r_1 + r_2 + r_3 + r_4)x + \left(\frac{1}{4}\,r_2 + \frac{1}{2}\,r_3 + r_4\right)x^2 + \left(\frac{1}{8}\,r_3 + \frac{1}{2}\,r_4\right)x^3 + \frac{1}{4}\,r_4x^4.$$

Требование первого порядка точности приводит к соотношению $r_1 + r_2 + r_3 + r_4 = 1$, которое ниже будем считать выполненным. Оставшиеся коэффициенты r_i выберем таким образом, чтобы метод (9) имел максимальный интервал устойчивости [10]. Для этого рассмотрим многочлен Чебышева $T_4(z) = 8z^4 - 8z^2 + 1$ на промежутке $[-1, 1]$. Проведем замену переменных, полагая $z = 1 - 2x/\gamma$. Получим

$$T_4(x) = 1 - \frac{32}{\gamma}\,x + \frac{160}{\gamma^2}\,x^2 - \frac{256}{\gamma^3}\,x^3 + \frac{128}{\gamma^4}\,x^4,$$

при этом отрезок $[\gamma, 0]$ отображается на $[-1, 1]$. Нетрудно показать, что среди всех многочленов $P_4(x)$ вида

$$P_4(x) = 1 + x + c_2x^2 + c_3x^3 + c_4x^4$$

для $T_4(x)$ неравенство $|T_4(x)| \leqslant 1$ выполняется на максимальном интервале $[\gamma, 0]$, $\gamma = -32$. Потребуем совпадения коэффициентов $Q_1(x)$ и $T_4(x)$ при $\gamma = -32$. Это приводит к соотношениям

$$r_1 + r_2 + r_3 + r_4 = 1, \quad \frac{1}{4}\,r_2 + \frac{1}{2}\,r_3 + r_4 = \frac{5}{32},$$

$$\frac{1}{8}\,r_3 + \frac{1}{2}\,r_4 = \frac{1}{128}, \quad \frac{1}{4}\,r_4 = \frac{1}{8192}.$$

В результате получим коэффициенты

$$r_1 = \frac{895}{2048}, \quad r_2 = \frac{257}{512}, \quad r_3 = \frac{31}{512}, \quad r_4 = \frac{1}{2048}$$

метода первого порядка точности с максимальным интервалом устойчивости, локальная ошибка $\delta_{n,1}$ которого имеет вид

$$\delta_{n,1} = \frac{9}{32}\,h^2f'f + O(h^3).$$

Метод первого порядка предполагается применять на участке установления, где ошибки невелики и шаг по точности значительно больше шага по устойчивости. Поэтому для контроля точности численной формулы первого порядка будем использовать оценку локальной ошибки. Учитывая, что имеет место

$$k_2 - k_1 = \frac{1}{4}\,h^2f'_nf_n + O(h^3),$$

и принимая во внимание вид локальной ошибки, неравенство для контроля точности записывается в виде

$$||k_2 - k_1|| \leqslant \varepsilon,$$

где $||\cdot||$ — некоторая норма в R^N, ε — требуемая точность расчетов.

Интервал устойчивости численной схемы (9) равен 32. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $w_{n,1} \leqslant 32$, где $w_{n,1}$ задается формулой (7). Отметим, что область устойчивости метода (9) может быть расширена по мнимой оси описанным в [10] алгоритмом построения полиномов устойчивости. Необходимость расширения по мнимой оси возникает в случае, когда матрица Якоби задачи (1) содержит комплексные собственные числа с ненулевой мнимой частью.

6. Алгоритм интегрирования переменной структуры. На основе построенных явных методов первого и второго порядков точности легко сформулировать алгоритм переменного порядка и шага. Расчеты всегда начинаются методом второго порядка как более точным. Переход на схему первого порядка осуществляется при нарушении неравенства $w_{n,1} \leqslant 2$. Обратный переход на метод второго порядка происходит в случае выполнения неравенства $w_{n,1} \leqslant 2$. При расчетах по методу первого порядка наряду с точностью контролируется устойчивость $w_{n,1} \leqslant 32$, а выбор прогнозируемого шага производится по аналогии с методом второго порядка точности по формуле типа (8).

В случае использования схемы (2) формулировка алгоритма интегрирования также не вызывает трудностей. Нарушение неравенства $w_{n,1} \leqslant 32$ вызывает переход на L-устойчивую схему (2). Передача управления явным методам происходит в случае выполнения неравенства $w_{n,0} \leqslant 32$, где оценка $w_{n,0}$ вычисляется через норму матрицы Якоби.

При численном вычислении матрицы Якоби ее j-й столбец вычисляется по формуле

$$\frac{\partial f}{\partial y_j} = \frac{1}{r_j}\Big[f(y_1, y_2, \ldots, y_{j-1}, y_j + r_j, y_{j+1}, \ldots, y_N) - f(y_1, y_2, \ldots, y_{j-1}, y_j, y_{j+1}, \ldots, y_N)\Big].$$

В расчетах шаг численного дифференцирования r_j выбирается по формуле

$$r_j = \max\big(10^{-14}, 10^{-7}|y_j|\big).$$

Расчеты предполагается проводить с двойной точностью, т.е. при представлении чисел мантисса содержит 14 значащих цифр. Постоянная 10^{-7} введена для того, чтобы выдвинуть шаг численного дифференцирования на середину разрядной сетки.

Численную формулу (2) без потери порядка точности можно применять с замораживанием матрицы D_n. Отметим, что при замораживании матрицы Якоби величина шага интегрирования остается постоянной с целью сохранения свойства L-устойчивости метода (2). Попытка замораживания матрицы D_n осуществляется после каждого успешного шага. Размораживание матрицы происходит в следующих случаях:

— нарушение точности расчетов,

— если число шагов с замороженной матрицей достигло заданного максимального числа i_h,

— если прогнозируемый шаг больше последнего успешного в q_h раз.

Числами i_h и q_h можно влиять на перераспределение вычислительных затрат. При $i_h = 0$ и $q_h = 0$ замораживания не происходит, при увеличении i_h и q_h число вычислений правой части возрастает, а количество обращений матрицы Якоби убывает. В случае большой размерности системы дифференциальных уравнений (1) имеет смысл выбирать i_h и q_h достаточно большими. В расчетах использовались значения $i_h = 10$ и $q_h = 2$.

Норма $||\varphi||$ в неравенствах для контроля точности вычисляется по формуле

$$||\varphi|| = \max_{1\leqslant i\leqslant N}\left\{\frac{|\varphi^i|}{\big(|y_n^i| + v\big)}\right\},$$

где i — номер компоненты, v — положительный параметр. Если по i-й компоненте решения выполняется неравенство $|y_n^i| < v$, то контролируется абсолютная ошибка $v\,\varepsilon$, в противном случае — относительная ошибка ε. Для опытных вычислителей рекомендуется вместо константы v выбирать постоянные v_i, $1 \leqslant i \leqslant N$, по каждой компоненте решения индивидуально.

Построенный алгоритм переменного порядка и шага, а также с автоматическим выбором явной или L-устойчивой численной схемы будем называть ROZ2CES24.

7. Результаты расчетов. Расчеты проводились с задаваемой точностью $\varepsilon = 10^{-2}$ на PC Intel(R) Core i7-3770S CPU@3.10GHz с двойной точностью. Невысокая точность расчетов связана с тем, что в построенном алгоритме применяются схемы низкого порядка точности; поэтому данным методом осуществлять расчеты с более высокой точностью нецелесообразно. Сравнение эффективности проводилось с известным методом Гира в реализации Хиндмарша DLSODE из коллекции ODEPACK [14] и алгоритмом

RKMK2 [15] на основе L-устойчивой (2,1)-схемы и явных двухстадийных методов типа Рунге–Кутта. В качестве тестовой задачи выбрана модель реакции Белоусова–Жаботинского, для которой на промежутке интегрирования характерно наличие трех переходных процессов. Тестовый пример имеет вид [16]

$$
\begin{aligned}
&y_1' = 77.27(y_2 - y_1y_2 + y_1 - 8.375\times 10^{-6}y_1^2),\\
&y_2' = \frac{1}{77.27}(-y_2 - y_1y_2 + y_3), \quad y_3' = 0.161(y_1 - y_3),\\
&t\in[0,300], \quad y_1(0)=4, \quad y_2(0)=1.1, \quad y_3(0)=4, \quad h_0 = 2\times 10^{-3}.
\end{aligned}
\tag{10}
$$

Расчеты проводились с численной матрицей Якоби. Сравнение эффективности проводилось по числу вычислений ifu правой части и количеству декомпозиций ija матрицы Якоби задачи (10) на интервале интегрирования. Решение примера (10) алгоритмом ROZ2CES24 вычислено с затратами ifu $=1\,029$ и ija $=49$. При вычислениях по L-устойчивой схеме (2) затраты ifu $=926$ и ija $=88$. Фактическая точность расчетов в конце интервала интегрирования не хуже задаваемой. Решение примера (10) удалось вычислить алгоритмом переменного порядка и шага на основе явных методов с затратами ifu $=978\,524$. Данная задача слишком жесткая для явных методов, однако результаты расчетов приведены здесь с целью демонстрации принципиальной возможности применения явных методов с контролем устойчивости и переменным порядком для решения достаточно жестких примеров. Заметим, что по времени счета явные методы на некоторых жестких задачах большой размерности могут быть эффективнее L-устойчивых методов.

Решение задачи (10) алгоритмом RKMK2 [15] вычислено с затратами ifu $=1\,214$ и ija $=65$. Решение данной задачи явными методами переменного порядка и шага из алгоритма RKMK2 вычислено с затратами ifu $=2\,112\,678$. При расчетах программой DLSODE требуемая точность $\varepsilon = 10^{-2}$ достигается при задаваемой точности $\varepsilon = 10^{-4}$ с затратами ifu $=1\,129$ и ija $=107$. При более высокой точности расчетов DLSODE эффективнее построенного алгоритма. Это является следствием низкого порядка точности построенных численных формул в алгоритме ROZ2CES24.

При задаваемой точности $\varepsilon = 10^{-2}$ алгоритм ROZ2CES24 более чем в два раза эффективнее алгоритма DLSODE по числу декомпозиций матрицы Якоби, в то время как количество вычислений правой части задачи (10) для ROZ2CES24 и DLSODE различается незначительно. В случае большой размерности задачи (1) построенный алгоритм интегрирования по времени счета может быть эффективнее DLSODE.

Заключение. Построенный алгоритм ROZ2CES24 предназначен для расчетов с небольшой точностью — порядка 1% и ниже. В этом случае достигается его максимальная эффективность. В ROZ2CES24 с помощью специального указателя можно задавать различные режимы: 1) явными методами первого или второго порядков точности с контролем или без контроля устойчивости; 2) явными методами с переменным порядком и шагом; 3) L-устойчивым методом с замораживанием или без замораживания аналитической или численной матрицы Якоби; 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 ли задача жесткой или нет, перекладывается на алгоритм интегрирования.

Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, потому что оценка максимального собственного значения матрицы Якоби системы (1) осуществляется через ранее вычисленные стадии и не приводит к росту числа вычислений функции f. Такая оценка получается грубой. Однако применение контроля устойчивости в качестве ограничителя на рост шага позволяет избежать негативных последствий грубости оценки. Более того, в некоторых случаях это приводит к нестандартно высокому повышению эффективности явных методов. На участке установления за счет контроля устойчивости старые ошибки стремятся к нулю, а новые невелики за счет малости производных решения. В некоторых случаях вместо оценки максимального собственного значения оценивается следующее по порядку. Шаг интегрирования становится больше максимально допустимого; с таким шагом осуществляется интегрирование до тех пор, пока не нарушается неравенство для контроля точности. Как правило, число таких шагов невелико, однако величина шага может на порядок превышать максимальный шаг по устойчивости. После нарушения неравенства для контроля точности шаг уменьшается до максимально возможного. Такой эффект может повторяться многократно в зависимости от длины участка установления. В результате средний шаг интегрирования может превышать максимально допустимый.

Применение на участке установления явного метода первого порядка точности с расширенной областью устойчивости позволяет в 16 раз увеличить размер шага интегрирования по сравнению с явным методом второго порядка без увеличения вычислительных затрат. На переходных участках, где определяющую роль играет точность вычислений, более эффективным является метод второго порядка точности, хотя и с небольшой областью устойчивости. Комбинирование методов низкого и высокого порядков с помощью неравенства для контроля устойчивости позволяет повысить эффективность расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.
2. *Byrne G.D., Hindmarsh A.C.* ODE solvers: a review of current and coming attractions // J. of Comput. Physics. 1987. № 70. 1–62.
3. *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. 1963. № 5. 329–330.
4. *Новиков В.А., Новиков Е.А., Юматова Л.А.* Замораживание матрицы Якоби в методе типа Розенброка второго порядка точности // ЖВМ и МФ. 1987. **27**, № 3. 385–390.
5. *Новиков Е.А.* Построение алгоритма интегрирования жестких систем дифференциальных уравнений на неоднородных схемах // Докл. АН СССР. 1984. **278**, № 2. 272–275.
6. *Новиков Е.А.* Алгоритм интегрирования жестких задач с помощью явных и неявных методов // Изв. Сарат. ун-та. Сер. Математика. Механика. Информатика. 2012. **12**, вып. 4. 19–27.
7. *Новиков А.Е., Новиков Е.А.* Алгоритм переменного порядка и шага на основе стадий метода Дорманда–Принса восьмого порядка точности // Вычислительные методы и программирование. 2007. **8**. 317–325.
8. *Новиков В.А., Новиков Е.А.* Повышение эффективности алгоритмов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений за счет контроля устойчивости // ЖВМ и МФ. 1985. **25**, № 7. 1023–1030.
9. *Новиков Е.А.* Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997.
10. *Новиков Е.А.* Конструирование областей устойчивости явных методов типа Рунге–Кутта // Вычислительные методы и программирование. 2009. **10**. 248–257.
11. *Новиков Е.А., Шорников Ю.В.* Компьютерное моделирование жестких гибридных систем. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2012.
12. *Новиков Е.А., Шитов Ю.А.* Алгоритм интегрирования жестких систем на основе (m, k)-метода второго порядка точности с численным вычислением матрицы Якоби. Препринт ИВМ СО РАН. № 20. Красноярск, 1988.
13. *Ceschino F., Kuntzman J.* Numerical solution of initial value problems. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1966.
14. *Hindmarsh A.C.* ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. Preprint UCRL-88007. Lawrence Livermore National Laboratory. Livermore, 1982.
15. *Новиков А.Е., Новиков Е.А.* Численное решение жестких задач с небольшой точностью // Математическое моделирование. 2010. **22**, № 1. 46–56.
16. *Enright W.H., Hull T.E., Lindberg B.* Comparing numerical methods for the solutions of stiff systems of ODE’s // BIT. 1975. **15**. 10–48.

Поступила в редакцию
14.04.2013