СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Козлов В.В. Об устойчивости положений равновесия в нестационарном силовом поле // Прикл. математика и механика. 1991. Т. 55. № 1. С. 12-19.

2. Андреев А.С. Об устойчивости положения равновесия неавтономной механической системы // Прикл. математика и механика. 1996. Т. 60. № 3. С. 388-396.

3. Матросов В.М. Метод векторных функций Ляпунова: анализ динамических свойств нелинейных систем. М.: Физматлит, 2001. 384 с.

4. Александров А.Ю. Об устойчивости положений равновесия нелинейных неавтономных механических систем // Прикл. математика и механика. 2007. Т. 71. № 3. С. 361-376.

5. Александров А.Ю., Косов А.А. Об асимптотической устойчивости положений равновесия механических систем с нестационарным ведущим параметром // Изв. РАН. Теория и системы управления. 2008. № 3. С. 8-22.

6. Агафонов С.А. Об устойчивости и стабилизации движения неконсервативных механических систем // Прикл. математика и механика. 2010. Т. 74. № 4. С. 560-566.

Евгений Александрович НОВИКОВ —
гл. научный сотрудник
Института вычислительного
моделирования СО РАН (г. Красноярск),
доктор физико-математических наук, профессор
novikov@icm.krasn.ru

Александр Анатольевич ЗАХАРОВ —
зав. кафедрой информационной безопасности
Института математики и компьютерных наук
Тюменского государственного университета,
доктор технических наук, профессор
azaharov@utmn.ru

УДК 519.622

ЯВНЫЕ МЕТОДЫ РУНГЕ–КУТТА: АЛГОРИТМЫ С КОНТРОЛЕМ ТОЧНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

RUNGE–KUTTA EXPLICIT METHODS: INTEGRATION ALGORITHMS WITH ACCURACY CONTROL

АННОТАЦИЯ. Построены алгоритмы переменного шага на основе явных методов типа Рунге–Кутта второго порядка точности, в которых глобальные ошибки аппроксимации оцениваются фактически без увеличения вычислительных затрат.

SUMMARY. Algorithms of variable step on the basis of Runge–Kutta-type explicit methods of second-order accuracy are constructed where the global error of approximation is estimated practically with no increase in computation cost.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Жесткие задачи, численный метод, глобальная ошибка, контроль точности.

KEY WORDS. Stiff problems, numerical methods, global error, accuracy control.

1. **Введение.** Во многих приложениях возникает проблема численного решения задачи Коши для жестких систем дифференциальных уравнений [1]:

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

где y и f — вещественные N-мерные вектор-функции, t — независимая переменная, изменяющаяся на заданном интервале $[t_0, t_k]$. В последнее время при численном исследовании некоторых умеренно жестких задач все большее внимание привлекают явные методы [2]. Это связано с тем, что при решении ряда задач методами с неограниченной областью устойчивости возникает проблема с декомпозицией матрицы Якоби, что требует порядка N^3 арифметических операций. В то же время явные методы не нуждаются в вычислении данной матрицы, и если жесткость задачи не слишком велика, то они будут предпочтительнее. Более того, появление многопроцессорных ЭВМ позволяет взглянуть иначе на явные методы, которые легко распараллеливаются.

Можно выделить две основные причины, которые приводят к трудностям при использовании явных методов для решения жестких задач [2]. Первая причина связана с противоречием между точностью и устойчивостью численной схемы на участке установления. Следствием этого является раскачивание величины шага интегрирования, что в лучшем случае приводит к многочисленным повторным вычислениям решения (возвратам), а шаг интегрирования выбирается значительно меньше максимально возможного. Этого недостатка можно избежать, например, предложенным в [3] способом контроля устойчивости.

Вторая причина ограниченного применения явных методов связана с тем, что области устойчивости известных численных схем слишком малы. В настоящий момент имеется ряд работ, посвященных вопросам построения явных методов с расширенными областями устойчивости [2]. Расширение области устойчивости связано с ростом вычислительных затрат на шаг интегрирования. Поэтому, если шаг ограничен по точности, такие схемы будут малоэффективны. Однако, если шаг ограничен по устойчивости, что имеет место на участке установления, то за счет применения численных схем с расширенными областями устойчивости можно значительно повысить эффективность алгоритмов интегрирования.

Здесь построен явный трехстадийный метод типа Рунге–Кутта второго порядка точности. Третье вычисление правой части использовано для расширения области устойчивости метода до шести по вещественной оси. Приведены результаты расчетов жесткой задачи, которые подтверждают повышение эффективности за счет расширения области устойчивости.

2. Численные схемы. Ниже для численного решения задачи Коши (1) будут применять явные методы типа Рунге–Кутта вида:

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i,\ k_i = hf\left(t_n + h\sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}, y_n + \sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}k_j\right), \tag{2}$$

где $k_i, 1 \le i \le m,$ — стадии метода, p_i, $1 \le i \le m$ и β_{ij}, $2 \le i \le m$, $1 \le j \le i-1$, — коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (2). Для упрощения выкладок далее будет рассматриваться автономная задача (1), однако все нижепостроенные методы можно применять для неавтономных систем.

Запишем приближенное решение (1) в виде ряда Тейлора в окрестности точки t_n до членов с h^3 включительно. Для этого введем в рассмотрение верхнюю треугольную матрицу B_m с элементами b_{ij}, то есть:

$$b_{ii}=1,\ 1\le i\le m,\ b_{ki}=0,\ 2\le k\le m,\ 1\le i\le k-1,$$

$$b_{ki}=\sum_{j=k-1}^{i-1}\beta_{ij}b_{k-1,j},\ 2\le k\le m,\ k\le i\le m,$$

где β_{ij} есть коэффициенты схемы (2). Матрица B_m невырожденная тогда и только тогда, когда $\beta_{i,i-1}\neq 0$ при $2\le i\le m$. Матрица B_m является верхней треугольной. С помощью метода математической индукции тривиально показывается, что диагональные элементы b_{ii} матрицы B_m вычисляются по формуле $\beta_{ii}=\beta_{21}\beta_{32}\ \ldots\ \beta_{i,i-1}$, $2\le i\le m$. Данные соотношения и требование невырожденности матрицы B_m эквивалентны. Эти соотношения означают также, что сразу после вычисления каждой новой стадии она вовлекается в вычислительный процесс, что является естественным условием при определении методов (2).

Если метод (2) применяется для решения задачи $y'=\lambda y$, $y(0)=y_0$, где λ интерпретируется как некоторое собственное число матрицы Якоби задачи (1), то имеют место соотношения:

$$y_{n+1}=Q_m(z)y_n,\ Q_m(z)=1+\sum_{i=1}^{m}c_iz^i,\ c_i=\sum_{j=i}^{m}b_{ij}p_j,$$

где $z=h\lambda$, $1\le i\le m$, а $Q_m(z)$ называется функцией устойчивости метода (2). Последнее соотношение можно переписать в матричном виде, то есть $B_mP_m=C_m$, где $P_m=(p_1,\ \ldots,\ p_m)^T$ и $C_m=(c_1,\ \ldots,\ c_m)^T$. В случае линейной задачи с постоянными коэффициентами $y'=Ay+b$, $y(t_0)=y_0$, $t_0\le t\le t_k$, соотношение $B_mP_m=C_m$ можно применять для построения методов заданного порядка точности. Используя обозначение $f(y)=Ay+b$, нетрудно убедиться, что для точного $y(t_{n+1})$ и приближенного y_{n+1} решений справедливы представления:

$$y(t_{n+1})=y(t_n)+\sum_{i=1}^{\infty}\frac{h^i}{i!}f'^{(i-1)}f,\ \ y_{n+1}=y_n+\sum_{i=1}^{m}c_ih^if_n'^{(i-1)}f_n, \tag{3}$$

где элементарные дифференциалы вычислены, соответственно, на точном $y(t_n)$ и приближенном y_n решениях, а коэффициенты функции устойчивости $Q_m(z)$ и параметры схемы (2) связаны соотношением $B_mP_m=C_m$. Из сравнения (3) при условии $y_n=y(t_n)$ следует, что схема (2) будет иметь p–й порядок точности, если $c_i=1/i!$, $1\le i\le p$. Задаваясь значениями коэффициентов β_{ij}, $2\le i\le m$, $1\le j\le i-1$, параметры p_i, $1\le i\le m$, схемы (2) p–го порядка точности получим единственным образом из линейной системы $B_mP_m=C_m$.

В случае нелинейной задачи (1) точное решение $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n можно записать в виде

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

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$. Приближенное решение y_{n+1}, полученное по схеме (2), представимо в виде:

$$y_{n+1}=y_n+\sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=i}^{m}b_{ij}p_j\right)h^if_n'^{(i-1)}f_n+\frac{1}{2}\left(\sum_{i=2}^{m}b_{2i}p_i\right)h^3f_n''f_n^2+O(h^4), \tag{5}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n.

Теперь перейдем к построению методов второго порядка точности.

3. Двухстадийная численная схема. Для численного решения задачи Коши (2) рассмотрим двухстадийную формулу типа Рунге–Кутта [4]

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2,\ k_1 = hf(y_n),\ k_2 = hf(y_n + \beta_{21} k_1). \tag{6}$$

Получим условия второго порядка точности схемы (6) с минимальной локальной ошибкой. При условии $y_n=y(t_n)$ сравнивая (5) и (6) до членов с h^2 включительно, получим $p_1+p_2=1$, $\beta_{21}p_2=0{,}5$ и $\beta^2_{21}p_2=1/3$, то есть $\beta_{21}=2/3$, $p_1=0{,}25$ и $p_2=0{,}75$. Тогда локальная ошибка $\delta_{n,2}$ схемы (7) имеет вид $\delta_{n,2}=(h^3/6)f'^2f+O(h^4)$. Согласно [4], для контроля точности вычислений можно применять неравенство $0{,}25\|k_2-k_1\| \le \varepsilon$, где ε — требуемая точность расчетов, $\|\bullet\|$ — некоторая норма в R^N. Так как приращение k_1 зависит от размера шага линейно, то повторное вычисление решения в случае нарушения требуемой точности расчетов будет приводить только к одному дополнительному вычислению правой части исходной задачи (1). Приращение k_1 вычисляется в точке t_n, а k_2 — в точке $t_n+2h/3$, поэтому быстрое изменение решения может приводить к потере точности вычислений. Учитывая, что в смысле главного члена разности $hf(t_{n+1})-k_1$ и k_2-k_1 совпадают, при выборе шага дополнительно будем проверять неравенство $\|hf(t_{n+1})-k_1\|/6 \le \varepsilon$. В этом случае при выборе шага интегрирования используется информация из крайних точек, что повышает надежность расчетов. Приведенный ниже алгоритм интегрирования переменного шага будем называть RK_05.

При сравнении свойств устойчивости численных схем удобно пользоваться отношением длины интервала устойчивости к количеству вычислений функции f на шаге интегрирования, например, [4; 46-48]. Применяя схему (6) для решения линейной задачи $y'=\lambda y$, получим $y_{n+1}=Q_2(z)y_n$, где функция устойчивости $Q_2(z)$ имеет вид $Q_2(z)=1+z+0{,}5z^2$. Тогда метод (6) будет устойчивым, если $|Q(z)|\le 1$, что равносильно выполнению двух неравенств $1+0{,}5z\ge 0$ и $z^2+2z+4\ge 0$. Отсюда видно, что в алгоритме RK_05 на одно вычисление функции f приходится единица длины интервала устойчивости. В явном методе Эйлера на одно вычисление функции f приходится две единицы интервала устойчивости. Если шаг ограничен только в силу устойчивости, то явный метод Эйлера может оказаться эффективнее. Поэтому построим еще одну численную схему второго порядка, в которой на одно вычисление f задачи (1) приходится не менее двух единиц длины интервала устойчивости.

Трехстадийная численная схема. Рассмотрим формулу типа Рунге–Кутта с тремя вычислениями функции f на шаге интегрирования, то есть:

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ k_1 = hf\left(y_n\right), \quad k_2 = hf\left(y_n + \beta_{21} k_1\right), \\ k_3 = hf\left(y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2\right). \end{gathered} \tag{7}$$

Используя (5) получим следующее представление приближенного решения:

$$\begin{aligned} y_{n+1} = y_n &+ \left(p_1 + p_2 + p_3\right) hf_n + \left(\alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3\right) h^2 f_n' f_n + \\ &+ \frac{h^3}{6}\left[bf_n'^2 f_n + \frac{1}{2}\left(\alpha_2^2 p_2 + \alpha_3^2 p_3\right) f_n'' f_n^2 \right] + O\left(h^3\right) \end{aligned} \tag{8}$$

где $\alpha_2=\beta_{21}$, $\alpha_3=\beta_{31}+\beta_{32}$, $b=\beta_{21}\beta_{32}p_3$. Получим условия второго порядка точности схемы (7) с минимальной локальной ошибкой. При условии $y_n=y(t_n)$ сравнивая (4) и (8) до членов с h^3 включительно, получим

$$p_1+p_2+p_3=1,\ \alpha_2 p_2+\alpha_3 p_3=0{,}5,\ 3\alpha_2^2 p_2+3\alpha_3^2 p_3=1, \qquad (9)$$

при этом локальная ошибка $\delta_{n,3}$ формулы (7) имеет вид $\delta_{n,3}=(1/6-b)h^3f'^2f+\mathrm{O}(h^4)$. Из сравнения (4) и (8) следует также, что при выполнении (9) и при $b=1/6$ численная схема (7) имеет третий порядок точности. Выбирая значение b, близкое к 1/6, можно коэффициент при главном члене локальной ошибки сделать как угодно малым. Но это может привести к тому, что начнут доминировать члены порядка $\mathrm{O}(h^4)$ и характер поведения ошибки уже не будет определяться членом $\mathrm{O}(h^3)$.

Исследуем совместность нелинейной системы (9) при условии $b=\beta_{21}\beta_{32}p_3$. Сначала рассмотрим линейную относительно p_2 и p_3 систему:

$$\alpha_2 p_2+\alpha_3 p_3=1/2,\ \alpha_2^2 p_2+\alpha_3^2 p_3=1/3,\ \alpha_2\beta_{32}p_3=b.$$

Для ее совместности необходимо обращение в нуль определителя расширенной матрицы. Раскрывая определитель, получим $6b\alpha_2(\alpha_3-\alpha_2)=\alpha_2\beta_{32}(2-3\alpha_2)$. Выберем b, α_2, α_3 и β_{32} так, чтобы они удовлетворяли данному соотношению. Тогда коэффициенты p_i, $1\le i\le 3$ можно найти из линейной системы $\alpha_2\beta_{32}p_3=b$, $\alpha_2 p_2+\alpha_3 p_3=0{,}5$, $p_1+p_2+p_3=1$. Неравенство для контроля точности построим по аналогии [4]. Учитывая вид локальной ошибки $\delta_{n,3}=(1/6-b)h^3f'^2f+\mathrm{O}(h^4)$ и равенство $k_2-k_1=\alpha_2h^2f_n'f_n+O(h^3)$ видим, что для контроля точности (7) можно использовать неравенство $\|k_2-k_1\|\le\alpha_2\varepsilon/|1/6-b|$. Так как k_1 зависит от размера шага линейно, то возврат приводит всего лишь к одному дополнительному вычислению функции f. Дополнительное неравенство для выбора величины шага интегрирования построим так же, как и для схемы (6). Учитывая вид разности $hf(t_{n+1})-k_1$, при выборе шага дополнительно будем контролировать неравенство $\|hf(t_{n+1})-k_1\|\le\varepsilon/|1/6-b|$.

Свободные коэффициенты численной схемы (7) можно использовать для улучшения свойств устойчивости. Для определения влияния величины параметра b на размер интервала устойчивости применим метод (7) для решения линейной задачи $y'=\lambda y$. Получим $y_{n+1}=Q_3(z)y_n$, где функция устойчивости $Q_3(z)$ имеет вид $Q_3(z)=1+z+0{,}5z^2+bz^3$. Известно [2], что максимальная длина 6,26 интервала устойчивости достигается при $b=1/16$. Однако при данном значении b имеет место $Q(-4)=1$, что приводит к «почти» многосвязной области устойчивости. Это означает, что небольшие возмущения, например, за счет ошибок округлений, могут приводить к сокращению области устойчивости. Если исходить из требования, чтобы длина интервала устойчивости была достаточно велика, то b можно выбрать равным 1/15. При этом на одно вычисление правой части дифференциальной задачи приходится почти две единицы длины интервала устойчивости, то есть с точки зрения устойчивости данный метод и метод Эйлера различаются незначительно. В то же время формула (7) обладает вторым порядком точности и снабжается алгоритмом контроля точности вычислений. Поэтому она может быть полезней метода Эйлера.

Если $Q_3(z)$ обладает монотонностью на интервале устойчивости, а таким свойством обладают известные методы Мерсона [6] и Фельберга [7], то можно ожидать, что небольшие возмущения не будут приводить к сокращению области устойчивости. Требование монотонности эквивалентно тому, что производная $Q'_3(z)=1+z+3bz^2$ не меняет знак на интервале устойчивости. Нетрудно видеть, что это равносильно неравенству $b\geq 1/12$.

Далее, в процессе вычислений по формуле (7) приходится определять приближенное решение в двух промежуточных точках $y_{n+1,1}=y_n+\beta_{21}k_1$, $y_{n+1,2}=y_n+\beta_{31}k_1+\beta_{32}k_2$. Если области устойчивости промежуточных численных схем уже области устойчивости основной схемы, то приближение к решению в промежуточных точках может искажаться за счет усиления ошибок округлений. Потребуем, чтобы интервалы устойчивости этих схем были не меньше, чем у основной схемы. Нетрудно убедиться, что при $\beta_{21}=1/3$ и $\alpha_3=2\beta_{32}$ длины интервалов устойчивости промежуточных численных схем не меньше шести. Теперь, полагая значение параметра b равным 1/12, 1/15 и 1/16 получим наборы коэффициентов:

$$b=1/12\,,\ \beta_{21}=\beta_{31}=\beta_{32}=1/3,\ p_1=1/4,\ p_2=0,\ p_3=3/4;$$

$$b=1/15\,,\ \beta_{21}=1/3,\ \beta_{31}=\beta_{32}=3/8,\ p_1=1/6,\ p_2=0{,}3,\ p_3=8/15;$$

$$b=1/16\,,\ \beta_{21}=1/3,\ \beta_{31}=\beta_{32}=7/18,\ p_1=1/7,\ p_2=3/8,\ p_3=27/56\,.$$

Ниже алгоритмы интегрирования при b = 1/12, 1/15 и 1/16, будем соответственно называть RK_12, RK_15 и RK_16.

Результаты расчетов. Расчеты проводились на IBM PC Athlon(tm)XP 2000 с двойной точностью. Норма в неравенствах для контроля точности вычисления и при выборе величины шага интегрирования вычислялась по формуле:

$$\|\varphi_n\|=\max_{1\le i\le N}|\varphi_n^i|/\left(|y_n^i|+r\right),$$

где r — положительный параметр. Если по i–й компоненте решения $|y_n^i|<r$, то контролируется абсолютная ошибка $r\cdot\varepsilon$; в противном случае относительная ошибка ε. В расчетах параметр r выбирался таким образом, чтобы по всем компонентам решения фактическая точность была не хуже задаваемой. Расчеты проводились с точностью $\varepsilon=10^{-2}$, при которой наиболее эффективны методы второго порядка. Численные эксперименты проводились с целью определения влияния размера области устойчивости на эффективность алгоритма интегрирования. В качестве критерия эффективности выбрано число вычислений *if* правой части задачи (1). Данный критерий позволяет объективно оценить эффективность алгоритма интегрирования.

В качестве тестового примера выбрана достаточно жесткая задача, соответствующая простейшей модели реакции Белоусова–Жаботинского [13]

$$y'_1=77{,}27\left(y_2-y_1y_2+y_1-8{,}375\cdot10^{-6}\,y_1^2\right),$$

$$y'_2=(-y_2-y_1y_2+y_3)/77{,}27\,,$$

$$y'_3=0{,}161(y_1-y_3)\,,$$

$$t\in[0{,}300],\ y_1(0)=4,\ y_2(0)=1{,}1,\ y_3(0)=4,\ h_0=2\cdot10^{-3}.$$

Вообще говоря, данный пример слишком жесткий для явных методов. Однако на нем удобно проследить влияние размера области устойчивости на эффективность расчетов. Решение данной задачи двухстадийным методом RK_05 удалось вычислить с затратами *if*=7 275 883, для алгоритма RK_12 имеем *if*=5 705 658, для алгоритма RK_15 затраты *if*=5 675 730, для алгоритма RK_16 имеем *if*=7 086 567.

Выводы. Из результатов расчетов можно сделать следующие выводы. По эффективности алгоритмы RK_05 и RK_16 практически не отличаются, хотя интервал устойчивости RK_16 в 3 раза шире интервала метода RK_05. Причина этого заключается в том, что область устойчивости RK_16 почти многосвязная. В результате ошибок округлений, которые приводят к появлению небольших мнимых частей собственных чисел матрицы Якоби, область устойчивости сокращается.

Алгоритм RK_15 незначительно эффективнее RK_12, хотя RK_15 имеет более широкую область устойчивости. Этот недостаток в алгоритме RK_12 компенсируется монотонностью функции устойчивости.

Во всех трех алгоритмах осуществляется около 1 000 000 повторных вычислений решения (возвратов). Для избежания таких возвратов при решении жестких задач явными методами необходимо наряду с точностью вычислений контролировать устойчивость численной схемы [2]; [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.

2. Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997. 197 с.

3. Новиков В.А., Новиков Е.А. Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // ДАН СССР, 1984. Т. 277. № 5. С. 1058–1062.

4. Новиков А.Е. Оценка глобальной ошибки явных методов типа Рунге–Кутты // Вестник ТюмГУ. 2008. № 6. С. 129-138.

5. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла и Дж. Уатта. М.: Мир, 1979. 312 с.

6. Merson, R.H. An operational methods for integration processes // Proc. of Symp. on Data Processing, Salisbury, Australia, 1957. P. 329-330.

7. Fehlberg, E. Classical fifth, sixth, seventh and eight order Runge–Kutta formulas with stepsize control // Computing. 1970. V. 6. P. 61-71.

8. Enright, W.H., Hull, T.E. Comparing numerical methods for the solutions of systems of ODE's // BIT. 1975. V. 15. P. 10-48.