Явно-неявный алгоритм интегрирования жестких задач второго порядка точности*

Е.А. Новиков
Институт вычислительного моделирования СО РАН
e-mail: novikov@icm.krasn.ru

Построены явная двухстадийная схема типа Рунге-Кутты и L-устойчивый (2,1)-метод второго порядка точности. На основе стадий явного метода создана численная формула первого порядка с расширенным до 8 интервалом устойчивости. Разработан алгоритм интегрирования переменного порядка и шага, в котором выбор наиболее эффективной численной схемы осуществляется на каждом шаге с применением неравенства для контроля устойчивости. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность построенного алгоритма.

An L-stable (2,1)-method and an explicit two-stage Runge-Kutta type scheme are constructed, both schemes of order two. A numerical formula of order one is developed that is based on the stages of the explicit method and its stability interval is extended to 8. An integration algorithm of variable order and step is constructed that is based on the stages of the three schemes. The most effective numerical scheme is chosen for each step by means of stability control inequality. The results are given that confirm the effectiveness of the algorithm.

Введение. При моделировании кинетики химических реакций, расчете электронных схем, электрических цепей и других важных приложениях возникает проблема численного решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Основные тенденции при построении численных методов связаны с расширением их возможностей для решения систем высокой размерности. Математические постановки практических задач постоянно уточняются, что приводит к росту размерности и к усложнению правой части системы дифференциальных уравнений. Сложность задач, возникающих в практике, опережает развитие вычислительной техники, что приводит к возрастающим требованиям к вычислительным алгоритмам. Во многих случаях расчеты требуется проводить с невысокой точностью – порядка 1% и ниже, потому что измерение констант, входящих в правую часть системы дифференциальных уравнений, часто проводится достаточно грубо. Иногда такая точность расчетов является удовлетворительной с точки зрения поставленной цели. Известно, что порядок аппроксимации численной схемы следует сочетать с требуемой точностью расчетов. Поэтому ниже ограничимся рассмотрением методов не выше второго порядка.

Современные методы решения жестких задач, как правило, используют вычисление и обращение матрицы Якоби системы дифференциальных уравнений. В случае достаточно большой размерности системы эффективность численных методов фактически полностью определяется временем декомпозиции этой матрицы. Для повышения эффективности расчетов в ряде алгоритмов используется замораживание матрицы Якоби, то есть применение одной матрицы на нескольких шагах интегрирования [1]. Наиболее успешно этот подход применяется в алгоритмах на основе многошаговых методов [2].

*Работа поддержана РФФИ (проекты 11-01-00106 и 11-01-00224).

Не вызывает эта проблема особых трудностей и при построении алгоритмов интегрирования на основе других численных схем, если в них стадии вычисляются с участием матрицы Якоби в некотором итерационном процессе. Хуже обстоит дело в алгоритмах интегрирования на основе известных безытерационных методов, к которым относятся методы типа Розенброка [3] и их различные модификации [1, 4–5]. Следует отметить, что безытерационные методы просты с точки зрения реализации. Однако в таких методах матрица Якоби влияет на порядок точности численной схемы, и поэтому возникают трудности с применением одной матрицы на нескольких шагах. Некоторым аналогом замораживания матрицы Якоби является применение в расчетах алгоритмов интегрирования на основе явных и L-устойчивых методов с автоматическим выбором численной схемы. В этом случае эффективность алгоритма может быть повышена за счет расчета переходного участка, соответствующего максимальному собственному числу матрицы Якоби, явным методом. В качестве критерия выбора эффективной численной формулы естественно применять неравенство для контроля устойчивости [6]. Здесь на основе явных методов типа Рунге-Кутты первого и второго порядков, а также L-устойчивого (2,1)-метода второго порядка построен алгоритм переменной структуры, в котором допускается замораживание как численной, так и аналитической матрицы Якоби. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность построенного алгоритма.

L-устойчивый (2,1)-метод. В [4] для численного решения жестких задач

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

где y и f – вещественные N-мерные вектор-функции, t – независимая переменная, предложен класс (m,k)-методов. С точки зрения реализации на ЭВМ (m,k)-методы столь же просты, как и схемы типа Розенброка. Однако в данном классе значительно проще решается проблема замораживания матрицы Якоби. В отличие от традиционных методов (m,k)-схемы описываются двумя постоянными: m – число стадий и k – количество вычислений правой части системы (1). Для решения (1) рассмотрим (2,1)-схему вида

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

где k_1 и k_2 – стадии метода, $D_n = E - ahA_n$, E – единичная матрица, h – шаг интегрирования, A_n – некоторая матрица, представимая в виде $A_n = f'_n + hB_n + O(h^2)$, $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ – матрица Якоби системы (1), B_n – не зависящая от шага интегрирования произвольная матрица, a, p_1 и p_2 – числовые коэффициенты. Использование матрицы A_n позволяет применять (2) с замораживанием как аналитической, так и численной матрицы Якоби [7]. В случае использования матрицы Якоби f'_{n-k}, вычисленной k шагов назад, имеем $B_n = -kf''_n f_n$, $f''_n f_n = \partial^2 f(y_n)/\partial y^2$. Если матрица Якоби вычисляется численно с шагом $r_j = c_j h$, то элементы $b_{n,ij}$ матрицы B_n имеют вид $b_{n,ij} = 0.5c_j \partial^2 f_i(y_n)/\partial y_j^2$. В расчетах шаг r_j выбирался по формуле $r_j = \max(10^{-14}, 10^{-7}|y_j|)$.

Получим коэффициенты L-устойчивой численной схемы (2) второго порядка и построим неравенство для контроля точности вычислений. Разложение точного решения $y(t_{n+1})$ в ряд Тейлора в окрестности точки t_n до членов с h^3 имеет вид

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

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$. Для нахождения коэффициентов a, p_1 и p_2 схемы (2) запишем разложения стадий k_1 и k_2 в ряды Тейлора в окрестности точки y_n до членов с h^3 и подставим в (2). Получим

$$y_{n+1} = y_n + (p_1 + p_2)hf_n + a(p_1 + 2p_2)h^2 f'_n f_n + a^2(p_1 + 3p_2)h^3 f'^2_n f_n +$$

$$+a(p_1+2p_2)h^3B_nf_n+O(h^4), \tag{4}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n. Полагая $y_n=y(t_n)$ и сравнивая (3) и (4) до членов с h^2 включительно, получим условия второго порядка точности схемы (2), то есть $p_1+p_2=1$ и $ap_1+2ap_2=0.5$.

Исследуем устойчивость численной формулы (2). Применяя ее к задаче

$$y'=\lambda y,\ y(0)=y_0,\ \Re(\lambda)<0, \tag{5}$$

получим $y_{n+1}=Q(x)y_n$, где $x=h\lambda$, а функция устойчивости $Q(x)$ имеет вид $Q(x)=[1+(p_1+p_2-2a)x+a(a-p_1)x^2]/(1-ax)^2$. Тогда схема (2) будет L-устойчивой, если $p_1=a$. Подставляя это соотношение в условия порядка, получим набор коэффициентов $p_1=a$ и $p_2=1-a$, где a определяется из условия L-устойчивости $a^2-2a+0.5=0$. Сравнивая (3) и (4) до членов с h^3 включительно получим, что локальная ошибка δ_n численной схемы (2) имеет вид

$$\delta_n=h^3\left[(a-1/3)f'^2f+f''f^2/6-B_nf/2\right]+O(h^4).$$

Уравнение $a^2-2a+0.5=0$ имеет два корня $a_1=1-0.5\sqrt{2}$ и $a_2=1+0.5\sqrt{2}$. Выберем $a=a_1$, так как в этом случае меньше коэффициент в главном члене $(a-1/3)h^3f'^2f$ локальной ошибки. Рассмотрим одновременно численную формулу типа Розенброка с двумя вычислениями функции f на каждом шаге

$$y_{n+1}=y_n+p_1k_1+p_2k_2,\ D_nk_1=hf(y_n),\ D_nk_2=hf(y_n+\beta k_1). \tag{6}$$

Согласно [5] при $\beta=a$ коэффициенты $p_1=a$ и $p_2=1-a$ обеспечивает второй порядок точности (6), а условие $a^2-2a+0.5=0$ – ее L-устойчивость. Из [5] следует, что численная формула (2) является одной из наиболее удачных среди методов типа Розенброка с двумя вычислениями правой части задачи (1) на шаге интегрирования. Локальная ошибка δ_n^{roz} численной формулы (6) имеет вид

$$\delta_n^{roz}=h^3\left[(a-1/3)f'^2f+(1/6+0.5(1-\sqrt{2})a)f''f^2-aB_nf\right]+O(h^4).$$

Построенная здесь схема (2), также как и (6), обладает вторым порядком точности и L-устойчивостью, а их локальные ошибки различаются незначительно. В тоже время (2) требует на каждом шаге на одно вычисление функции f меньше (6) при прочих равных затратах, что делает ее предпочтительнее.

Контроль точности вычислений численной схемы (2) построим по аналогии [8]. Для этого введем обозначение $v(j_n)=D_n^{1-j_n}(k_2-k_1)$, где k_1 и k_2 вычисляются по формулам (2). Тогда согласно [8] для контроля точности вычислений на каждом шаге нужно проверять неравенство $||v(j_n)||\le\varepsilon$, $1\le j_n\le 2$, где ε – требуемая точность расчетов, $||\cdot||$ – некоторая норма в R^N, а целочисленная переменная j_n выбирается наименьшей, при которой выполняется данное неравенство. Оценку максимального собственного числа $w_{n,0}=h\lambda_{n,max}$ матрицы Якоби системы (1), необходимую для перехода на явную формулу, оценим через ее норму $w_{n,0}=h||\partial f(y_n)/\partial y||$. Ниже данная оценка будет применяться для автоматического выбора численной схемы.

Метод типа Рунге-Кутты второго порядка точности. Теперь для решения задачи (1) рассмотрим явный двухстадийный метод типа Рунге-Кутта [9]

$$y_{n+1}=y_n+p_1k_1+p_2k_2,\ k_1=hf(y_n),\ k_2=hf(y_n+\beta k_1). \tag{7}$$

Получим соотношения на коэффициенты метода (7) второго порядка точности. Для этого разложим стадии k_1 и k_2 в ряды Тейлора по степеням h до членов с h^3 включительно и подставим в первую формулу (7). В результате получим $y_{n+1} = y_n + (p_1 + p_2)hf_n + \beta p_2 h^2 f'_n f_n + 0.5\beta^2 p_2 h^3 f''_n f_n^2 + O(h^4)$, где элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n. Сравнивая данное выражение с (3) до членов с h^2 включительно при условии $y_n = y(t_n)$, запишем условия второго порядка точности схемы (7), которые имеют вид $p_1 + p_2 = 1$ и $\beta p_2 = 0.5$. При данных соотношениях локальная ошибка δ_n метода (7) записывается следующим образом: $\delta_n = h^3[2f'^2 f + (2-3\beta) f'' f^2]/12 + O(h^4)$.

Построим неравенство для контроля точности вычислений. Для этого рассмотрим вспомогательную схему $y_{n+1,1} = y_n + k_1$ первого порядка точности. С помощью идеи вложенных методов оценку ошибки $\varepsilon_{n,2}$ метода второго порядка можно вычислить по формуле $\varepsilon_{n,2} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = p_2(k_2 - k_1)$ [8]. Для повышения надежности данной оценки выберем $\beta = 1$. Тогда стадия k_1 вычисляется в точке t_n, а k_2 – в точке t_{n+1}. Как показывают расчеты, использование информации в крайних точках шага приводит к более надежным вычислениям. При $\beta = 1$ коэффициенты метода второго порядка определяются однозначно $p_1 = p_2 = 0.5$, а локальная ошибка и неравенство для контроля точности имеют, соответственно, вид $\delta_n = h^3(2f'^2 f - f'' f]/12 + O(h^4)$ и $0.5||k_2 - k_1|| \leq \varepsilon$.

Теперь построим неравенство для контроля устойчивости (7) предложенным в [9] способом. Для этого рассмотрим вспомогательную стадию $k_3 = hf(y_{n+1})$. Заметим, что k_3 совпадает со стадией k_1, которая применяется на следующем шаге интегрирования, и поэтому ее использование не приводит к дополнительным вычислениям правой части системы (1). Запишем стадии k_1, k_2 и k_3 применительно к задаче $y' = Ay$, где A есть матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим $k_1 = Xy_n$, $k_2 = (X + X^2)y_n$ и $k_3 = (X + X^2 + 0.5X^3)y_n$, где $X = hA$. Легко видеть, что $k_2 - k_1 = X^2 y_n$ и $2(k_3 - k_2) = X^3 y_n$. Тогда согласно [6] оценку максимального собственного числа $w_{n,2} = h\lambda_{n,max}$ матрицы Якоби системы (1) можно вычислить по формуле

$$w_{n,2} = 2 \max_{1 \leq i \leq N} \left\{ |k_3^i - k_2^i| / |k_2^i - k_1^i| \right\}. \tag{8}$$

Интервал устойчивости схемы (7) второго порядка точности приблизительно равен двум. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $w_{n,2} \leq 2$. В случае применения данного неравенства для выбора шага следует учитывать грубость оценки (8), потому что вовсе не обязательно максимальное собственное число 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 h_{n+1} будем вычислять следующим образом. Новый шаг h^{ac} по точности определим по формуле $h^{ac} = qh_n$, где h_n есть последний успешный шаг интегрирования, а q, учитывая соотношение $k_2 - k_1 = O(h_n^2)$, задается уравнением $q^2||k_2 - k_1|| = \varepsilon$. Шаг h^{st} по устойчивости зададим формулой $h^{st} = dh_n$, где d, учитывая соотношение $w_{n,2} = O(h)$, определяется из равенства $dw_{n,2} = 2$. Тогда прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max \left[h_n, \min(h^{ac}, h^{st}) \right]. \tag{9}$$

Заметим, что формула (9) 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 (9). 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.

Метод типа Рунге-Кутты первого порядка точности. Для численного решения задачи (1) рассмотрим схему вида

$$y_{n+1} = y_n + r_1 k_1 + r_2 k_2,\ k_1 = hf(y_n),\ k_2 = hf(y_n + k_1). \tag{10}$$

Заметим, что при $r_1 = r_2 = 0.5$ численная формула (10) имеет второй порядок точности и совпадает с (7) с коэффициентами $p_1 = p_2 = 0.5$. Построим менее точную схему с максимальным интервалом устойчивости. Для этого применим (10) для решения скалярного тестового уравнения (5). Получим $y_{n+1} = Q(x)y_n$, где $Q(x)$ имеет вид $Q(x) = 1 + (r_1 + r_2)x + r_2x^2$, $x = h\lambda$. Требование первого порядка точности приводит к соотношению $r_1 + r_2 = 1$, которое ниже будем считать выполненным. Теперь выберем r_2 таким образом, чтобы метод (10) имел максимальный интервал устойчивости. Для этого рассмотрим многочлен Чебышева $T_2(z) = (2z^2 - 1)$ на промежутке $[-1, 1]$. Проведем замену переменных, полагая $z = 1 - 2x/\gamma$. Получим $T_2(x) = 1 - 8x/\gamma + 8x^2/\gamma^2$, при этом отрезок $[\gamma, 0]$ отображается на $[-1, 1]$. Нетрудно показать, что среди всех многочленов вида $P_2(x) = 1 + x + c_2x^2$ для $T_2(x)$ неравенство $|T_2(x)| \le 1$ выполняется на максимальном интервале $[\gamma, 0]$, $\gamma = -8$. Потребуем совпадения коэффициентов $Q(x)$ и $T_2(x)$ при $\gamma = -8$. Это приводит к соотношениям $r_1 + r_2 = 1$ и $r_2 = 1/8$. В результате имеем коэффициенты $r_1 = 7/8$ и $r_2 = 1/8$ метода первого порядка точности с максимальным интервалом устойчивости, локальная ошибка δ_n которого имеет вид $\delta_n = 3h^2f'f/8 + O(h^3)$. Для контроля точности численной формулы первого порядка будем использовать оценку локальной ошибки. Учитывая, что $k_2 - k_1 = h^2 f'_n f_n + O(h^3)$ и вид локальной ошибки, неравенство для контроля точности записывается в виде $||k_2 - k_1|| \le 8\varepsilon/3$, где $||\cdot||$ – некоторая норма в R^N, ε – требуемая точность расчетов.

Построим неравенство для контроля устойчивости метода первого порядка. Для этого рассмотрим вспомогательную стадию $k_3 = hf(y_{n+1})$. Запишем k_1, k_2 и k_3 применительно к задаче $y' = Ay$, где A есть матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим $k_1 = Xy_n$, $k_2 = (X + X^2)y_n$ и $k_3 = (X + X^2 + 0.125X^3)y_n$, где $X = hA$. Легко видеть, что имеют место соотношения

$$k_2 - k_1 = X^2 y_n,\ 8(k_3 - k_2) = X^3 y_n.$$

Тогда согласно [6] оценку максимального собственного числа $w_{n,1} = h\lambda_{n,max}$ матрицы Якоби системы (1) можно вычислить по формуле $w_{n,1} = 8\max_{1\le i\le N}\left\{|k_3^i - k_2^i|/|k_2^i - k_1^i|\right\}$. Интервал устойчивости численной схемы (10) равен восьми. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $w_{n,1} \le 8$.

Алгоритм интегрирования с автоматическим выбором численной схемы. 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 $w_{n,2} \leq 2$. Обратный переход на метод второго порядка происходит в случае выполнения неравенства $w_{n,1} \leq 2$. При расчетах по методу первого порядка наряду с точностью контролируется устойчивость, а выбор прогнозируемого шага производится по аналогии с методом второго порядка точности по формуле типа (9).

В случае использования схемы (2) формулировка алгоритма интегрирования также не вызывает трудностей. Нарушение неравенства $w_{n,1} \leq 8$ вызывает переход на схему (2). Передача управления явным методам происходит в случае выполнения неравенства $w_{n,0} \leq 8$. 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. Попытка замораживания матрицы D_n осуществляется после каждого успешного шага. Размораживание матрицы происходит в следующих случаях: 1) нарушение точности расчетов, 2) если число шагов с замороженной матрицей достигло заданного максимального числа iqh, 3) если прогнозируемый шаг больше последнего успешного в qh раз. Числами iqh и qh можно влиять на перераспределение вычислительных затрат. При $iqh = 0$ и $qh = 0$ замораживания не происходит, при увеличении iqh и qh число вычислений правой части возрастает, а количество обращений матрицы Якоби убывает.

Норма в левой части неравенств для контроля точности вычисляется по формуле

$$||k_2 - k_1|| = \max_{1 \leq i \leq N} \left\{ |k_2^i - k_1^i| / (|y_n^i| + r) \right\},$$

где i – номер компоненты, r – положительный параметр. Если по i-й компоненте решения выполняется неравенство $|y_n^i| < r$, то контролируется абсолютная ошибка $r\varepsilon$, в противном случае – относительная ошибка ε.

Ниже построенный алгоритм переменного порядка и шага, а также с автоматическим выбором явной или L-устойчивой численной схемы будем называть RKMK2.

Результаты расчетов Расчеты проводились на PC Intel(R) Core(TM) i7-3770S CPU@3.10GHz 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 $\varepsilon = 10^{-2}$. Это связано с тем, что в построенном алгоритме применяются схемы низкого порядка точности, и поэтому данным методом осуществлять расчеты с более высокой точностью нецелесообразно. Сравнение эффективности проводилось с известным методом Гира в реализации А. Хиндмарша DLSODE из коллекции ODEPACK [10]. Ниже через ifu и ija обозначены, соответственно, суммарное число вычислений правой части и количество декомпозиций матрицы Якоби задачи (1), которые позволяют объективно оценить эффективность алгоритма интегрирования. В качестве первого тестового примера выбрана простейшая модель реакции Белоусова - Жаботинского [11]

$$\begin{gathered}
y_1' = 77.27(y_2 - y_1 y_2 + y_1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1^2), \\
y_2' = \frac{1}{77.27}(-y_2 - y_1 y_2 + y_3), \qquad (11) \\
y_3' = 0.161(y_1 - y_3), \\
t \in [0, 300],\ y_1(0) = 4,\ y_2(0) = 1.1,\ y_3(0) = 4,\ h_0 = 2 \cdot 10^{-3}.
\end{gathered}$$

Расчеты проводились с численной матрицей Якоби. Решение данной задачи алгоритмом RKMK2 вычислено с затратами ifu = 1 214 и ija = 65. При расчетах только по L-устойчивой схеме (2) затраты ifu = 926 и ija = 88. Фактическая точность расчетов в конце интервала интегрирования не хуже задаваемой. Решение (11) удалось вычислить явными методами переменного порядка и шага с затратами ifu = 2 112 678. Данная задача слишком жесткая для явных методов. Однако результаты расчетов приведены здесь с целью демонстрации принципиальной возможности применения явных методов для решения достаточно жестких примеров, которые на некоторых задачах большой размерности могут быть эффективнее L-устойчивых методов.

При расчетах программой DLSODE требуемая точность 10^{-2} достигается при задаваемой точности 10^{-4} с затратами ifu = 1 129 и ija = 107. При более высокой точности расчетов DLSODE эффективнее разработанного алгоритма. Это является следствием низкого порядка точности построенных численных формул. При задаваемой точности 10^{-2} алгоритм RKMK2 более чем в 1.5 раз эффективнее известного метода DLSODE по числу декомпозиций матрицы Якоби, в то время как количество вычислений правой части задачи (11) для RKMK2 и DLSODE различается незначительно. В случае большой размерности задачи (1) построенный алгоритм интегрирования по времени счета может быть эффективнее DLSODE.

Заключение. Построенный алгоритм RKMK2 предназначен для расчетов с небольшой точностью – порядка 1% и ниже. В этом случае достигается его максимальная эффективность.

В RKMK2 с помощью признака можно задавать различные режимы расчета:

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 как аналитической, так и 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 числа 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 алгоритма.

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 числа оценивается следующее по порядку. Шаг интегрирования становится больше максимально допустимого и 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 повторятся 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 4 раза 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. 685 с.

[2] Byrne G.D., Hindmarsh A.C. ODE solvers: a review of current and coming attractions // J. of Comput. Physics. 1987. №70. P. 1–62.

[3] Rosenbrock H.H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. 1963. №5. P. 329–330.

[4] Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И. Одношаговые методы решения жестких систем // ДАН СССР. 1988. Т. 301, № 6. С. 1310–1314.

[5] Новиков Е.А., Шорников Ю.В. Компьютерное моделирование жестких гибридных систем. Новосибирск: НГТУ, 2012. 450 с.

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

[7] Новиков Е.А., Шитов Ю.А. Алгоритм интегрирования жестких систем на основе (m,k)-метода второго порядка точности с численным вычислением матрицы Якоби. Красноярск, 1988 (Препр. РАН. Сиб. отд-ние. ИВМ. № 20).

[8] Демидов Г.В., Новиков Е.А. Оценка ошибки одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // Числ. методы механики сплош. среды. 1985. Т. 16, № 1. С. 27–42.

[9] Кнауб Л.В., Лаевский Ю.М., Новиков Е.А. Алгоритм интегрирования переменного порядка и шага на основе явного двухстадийного метода Рунге-Кутты // СибЖВМ. 2007. Т. 10, №2. С. 177–185.

[10] Hindmarsh A.C. ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. Lawrence Livermore National Laboratory, 1982 (Preprint UCRL-88007).

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