Вычислительные технологии **Том 3, № 3, 1998**

$(m,3)$-МЕТОД ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА ДЛЯ ЖЕСТКИХ НЕАВТОНОМНЫХ СИСТЕМ ОДУ

Е. А. Новиков
Институт вычислительного моделирования СО РАН
Красноярск, Россия
М. И. Голушко
Институт вычислительных технологий СО РАН
Новосибирск, Россия
e-mail: golushko@ict.nsc.ru

The L-stable $(m, 3)$-method of the third order for solving the Cauchy problem for stiff non-autonomous systems of ordinary differential equations has been constructed. The results of the calculations, which confirm efficiency of the algorithm of integration, have been adduced.

1. Введение

Почти все известные методы типа Розенброка [1] и их модификации предназначены для численного интегрирования задачи Коши для автономных систем вида

$$x' = g(x), \quad x(t_0) = x_0, \quad t_0 \le t \le t_k, \tag{1}$$

где x и g — гладкие вещественные $(N+1)$-мерные вектор-функции, t — независимая переменная. Такой подход оправдан тем, что неавтономную систему

$$y' = f(t,y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \le t \le t_k \tag{2}$$

введением дополнительной переменной можно привести к виду (1), если положить $x = (y_1, \ldots, y_N, t)^T$, $g = (f_1, \ldots, f_N, 1)^T$.

Использование автономной формы записи существенно упрощает построение схем заданного порядка точности. Однако методы типа Розенброка, предназначенные для решения автономных задач, применительно к (2) имеют вид

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n = E - ah\frac{\partial f(t_n,y_n)}{\partial y},$$

$$D_n k_i = hf(t_n + \sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}k_j) + (a + \sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij})h\frac{\partial f(t_n,y_n)}{\partial t}, \tag{3}$$

в то время как методы решения неавтономных задач —

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n k_i = hf(t_n + c_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \tag{4}$$

где a, p_i, c_i, β_{ij}, $1 \le i \le m$, $1 \le j \le i-1$ — параметры. Как следует из [2], наличие частной производной $\partial f(t_n, y_n)/\partial t$ в расчетной формуле во многих случаях ухудшает устойчивость схемы и, в частности, может приводить к потере D-устойчивости.

В настоящей работе построен L-устойчивый (m,k)-метод [3] третьего порядка точности для численного интегрирования неавтономных задач. Предложен способ контроля точности вычислений и приведены результаты тестовых расчетов.

2. Численная схема

Для решения (2) применим $(3,3)$-метод вида

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ D_n k_1 = hf(t_n, y_n), \\ D_n k_2 = hf(t_n + c_2 h, y_n + \beta_{21} k_1) + \alpha_{21} k_1, \\ D_n k_3 = hf(t_n + c_3 h, y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2), \end{gathered} \tag{5}$$

где $D_n = E - ahf'(t_n, y_n)$, h — шаг интегрирования, E — единичная матрица, $f' = \partial f/\partial y$ — матрица Якоби задачи (2), $a, p_1, p_2, p_3, \beta_{21}, \beta_{31}, \beta_{32}, \alpha_{21}$ — коэффициенты, обеспечивающие заданные свойства точности и устойчивости.

Ниже потребуется разложение точного решения $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n до членов с h^4 включительно, которое имеет вид

$$\begin{gathered} y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + 0.5h^2(f_y f + f_t) + \frac{h^3}{6}(f_y^2 f + f_{yy} f^2 + 2f_{ty} f + \\ + f_y f_t + f_{tt}) + \frac{h^4}{24}(f_y^3 f + f_y f_{yy} f^2 + 3f_{yy} f_y f^2 + f_{yyy} f^3 + \\ + 3f_{yyt} f^2 + 3f_{ytt} f + 3f_{yt} f_y f + 3f_{yt} f_t + 3f_{yy} f_t f + 2f_y f_{yt} f + \\ + f_y^2 f_t + f_y f_{tt} + f_{ttt}) + O(h^5). \end{gathered} \tag{6}$$

Здесь нижний индекс означает соответствующую частную производную, а элементарные дифференциалы вычислены в точке t_n.

Для построения метода третьего порядка точности запишем разложения k_1, k_2 и k_3 в ряды Тейлора в окрестности точки t_n до членов с h^3 включительно:

$$\begin{gathered} k_1 = hf + ah^2 f_y f + a^2 h^3 f_y^2 f + O(h^4), \\ k_2 = (1 + \alpha_{21})hf + h^2[(a + \beta_{21} + 2a\alpha_{21}) f_y f + c_2 f_t] + \\ + h^3[(a^2 + 2a\beta_{21} + 3a^2\alpha_{21}) f_y^2 f + 0.5\beta_{21}^2 f_{yy} f^2 + c_2 \beta_{21} f_{ty} f + ac_2 f_y f_t + 0.5c_2^2 f_{tt}] + O(h^4), \\ k_3 = hf + h^2[(a + \beta_{31} + \beta_{32} + \alpha_{21}\beta_{32}) f_y f + c_3 f_t] + \\ + h^3[(a^2 + 2a\beta_{31} + 2a\beta_{32} + \beta_{21}\beta_{32} + 3a\alpha_{21}\beta_{32}) f_y^2 f + 0.5(\beta_{31} + \beta_{32} + \alpha_{21}\beta_{32})^2 f_{yy} f^2 + \\ + c_3(\beta_{31} + \beta_{32} + \alpha_{21}\beta_{32}) f_{ty} f + (ac_3 + c_2\beta_{32}) f_y f_t + 0.5c_3^2 f_{tt}] + O(h^4). \end{gathered} \tag{7}$$

Подставляя (7) в первую формулу (5) и сравнивая ряды Тейлора для точного и приближенного решений до членов с h^3 включительно, получим соотношения на параметры схемы (5), обеспечивающие третий порядок точности, т. е.

$$\begin{aligned}
&1)\ p_1 + (1+\alpha_{21})p_2 + p_3 = 1,\\
&2)\ ap_1 + (a+\beta_{21}+2a\alpha_{21})p_2 + (a+\beta_{31}+\beta_{32}+\alpha_{21}\beta_{32})p_3 = 0.5,\\
&3)\ c_2p_2 + c_3p_3 = 0.5,\\
&4)\ a^2p_1 + (a^2+2a\beta_{21}+3a^2\alpha_{21})p_2 + (a^2+2a\beta_{31}+2a\beta_{32}+\\
&\qquad +\beta_{21}\beta_{32}+3a\alpha_{21}\beta_{32})p_3 = 1/6,\\
&5)\ \beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31}+\beta_{32}+\alpha_{21}\beta_{32})^2p_3 = 1/3,\\
&6)\ c_2\beta_{21}p_2 + c_3(\beta_{31}+\beta_{32}+\alpha_{21}\beta_{32})p_3 = 1/3,\\
&7)\ ac_2p_2 + (ac_3+c_2\beta_{32})p_3 = 1/6,\\
&8)\ c_2^2p_2 + c_3^2p_3 = 1/3.
\end{aligned} \tag{8}$$

Пользуясь произволом при выборе коэффициентов, положим $c_2 = \beta_{21}$, $c_3 = \beta_{31} + \beta_{32} + \alpha_{21}\beta_{32}$. Тогда (8) можно записать в виде:

$$\begin{aligned}
&1)\ p_1 + (1+\alpha_{21})p_2 + p_3 = 1,\\
&2)\ ap_1 + (a+\beta_{21}+2a\alpha_{21})p_2 + (a+\beta_{31}+\beta_{32}+\alpha_{21}\beta_{32})p_3 = 0.5,\\
&3)\ \beta_{21}p_2 + (\beta_{31}+\beta_{32}+\alpha_{21}\beta_{32})p_3 = 0.5,\\
&4)\ a^2p_1 + (a^2+2a\beta_{21}+3a^2\alpha_{21})p_2 + (a^2+2a\beta_{31}+2a\beta_{32}+\\
&\qquad +\beta_{21}\beta_{32}+3a\alpha_{21}\beta_{32})p_3 = 1/6,\\
&5)\ \beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31}+\beta_{32}+\alpha_{21}\beta_{32})^2p_3 = 1/3,\\
&6)\ a\beta_{21}p_2 + [a(\beta_{31}+\beta_{32}+\alpha_{21}\beta_{32})+\beta_{21}\beta_{32}]p_3 = 1/6.
\end{aligned} \tag{9}$$

Исследуем совместность нелинейной системы алгебраических уравнений (9). Из первого, второго и четвертого уравнений (9) имеем

$$(\beta_{21}\beta_{32} + a\alpha_{21}\beta_{32})p_3 = 1/6 - a - a^2. \tag{10}$$

Из третьего и шестого уравнений (9) получим

$$\begin{aligned}
\beta_{32}p_3 &= (1/6 - 0.5a)/\beta_{21},\\
\alpha_{21}p_2 &= -1.
\end{aligned} \tag{11}$$

С учетом (10) и (11) выразим α_{21} и p_2:

$$\begin{aligned}
\alpha_{21} &= 3\beta_{21}(2a-1)/(1-3a),\\
p_2 &= (1-3a)/(3\beta_{21} - 6a\beta_{21}).
\end{aligned} \tag{12}$$

Из третьего уравнения (9) имеем

$$(\beta_{31} + \beta_{32} + \alpha_{21}\beta_{32})p_3 = 1/(6-12a). \tag{13}$$

Тогда из третьего, пятого и первого уравнений (9) получим

$$\begin{aligned}
p_3 &= 1/[(6-12a)(2-4a-2\beta_{21}+6a\beta_{21})],\\
p_1 &= 1 - (1+\alpha_{21})p_2 - p_3.
\end{aligned} \tag{14}$$

С учетом (11), (13) и первого соотношения (14) запишем

$$\beta_{32} = (1-3a)(1-2a)(2-4a-2\beta_{21}+6a\beta_{21})/\beta_{21},$$
$$\beta_{31} = 4(3a^2-3a+1)(2-4a-2\beta_{21}+6a\beta_{21}) - \beta_{32}. \quad (15)$$

В итоге получим следующий набор параметров схемы (5):

$$c_2 = \beta_{21}, \quad \alpha_{21} = 3\beta_{21}(2a-1)/(1-3a),$$
$$p_2 = (1-3a)/(3\beta_{21}-6a\beta_{21}), \quad c_3 = \beta_{21} + (1-2a)(2-3\beta_{21}),$$
$$p_3 = 1/(6c_3 - 12ac_3), \quad p_1 = 1-(1+\alpha_{21})p_2 - p_3,$$
$$\beta_{32} = c_3(1-3a)(1-2a)/\beta_{21}, \quad \beta_{31} = 4(3a^2-3a+1)c_3 - \beta_{32}, \quad (16)$$

при которых формула (5) имеет третий порядок точности. Здесь коэффициенты a и β_{21} произвольные.

Исследуем устойчивость схемы (5) на линейном скалярном уравнении

$$y' = \lambda y \quad (17)$$

с комплексным λ, $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$. Применяя (5) к (17), получим

$$y_{n+1} = Q(x)y_n, \quad x = \lambda h,$$

где функция устойчивости $Q(x)$ задается формулой

$$Q(x) = \{1 + x(p_1+p_2+p_3+\alpha_{21}p_2 - 3a) + x^2[3a^2 - 2a(p_1+p_2+p_3)+$$
$$+\beta_{21}p_2 + (\beta_{31}+\beta_{32})p_3 - a\alpha_{21}p_2 + \alpha_{21}\beta_{32}p_3]+$$
$$+x^3[-a^3 + a^2(p_1+p_2+p_3) - a(\beta_{21}p_2 + (\beta_{31}+\beta_{32})p_3) + \beta_{21}\beta_{32}p_3]\}/(1-ax)^3.$$

Учитывая значения коэффициентов (16), ее можно переписать в виде

$$Q(x) = [1 - x(3a-1) + 0.5x^2(6a^2-6a+1) - x^3(a^3-3a^2+1.5a-1/6)]/(1-ax)^3. \quad (18)$$

Необходимым условием L-устойчивости формулы (5) является выполнение соотношения

$$|Q(x)| \to 0 \quad \text{при} \quad x \to -\infty.$$

Из (18) следует, что данное требование будет выполнено, если параметр a есть корень уравнения

$$a^3 - 3a^2 + 1.5a - 1/6 = 0. \quad (19)$$

Известно [4], что при $1/3 \le a \le 1.0685790230270$ схема (5) будет обладать свойством -устойчивости. Поэтому среди корней уравнения (19) выберем $a = 0.43586652150902$, при котором (5) является L-устойчивой.

3. Алгоритм интегрирования

Локальная ошибка δ_n схемы (5) с параметрами (16) имеет вид

$$\delta_n = \gamma_1 h^4 f_y^3 f + O(h^4), \quad (20)$$

где

$$\gamma_1 = 1/24 - a^3 - 3a^2(\beta_{21} + a\alpha_{21})p_2 - 3a(ac_3 + a\alpha_{21}\beta_{32} + \beta_{21}\beta_{32})p_3. \quad (21)$$

Выберем коэффициенты $b_i, 1 \leq i \leq 4$ из условия выполнения соотношения

$$b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3 + b_4hf(t_n + c_2h, y_n + \beta_{21}k_1) = \gamma_2h^3f_y^2f + \gamma_3h^3f_yf_t + O(h^4). \tag{22}$$

Тогда согласно [5] для контроля точности вычислений и при выборе шага интегрирования можно использовать оценку ошибки ε_n, вычисленную по формуле

$$\varepsilon_n = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}[b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3 + b_4hf(t_n + c_2h, y_n + \beta_{21}k_1)]. \tag{23}$$

Отметим, что определение ε_n по (23) к существенным дополнительным вычислительным затратам не приводит, потому что в этой формуле применяются ранее вычисленные стадии.

С использованием разложений в ряды Тейлора нетрудно убедиться, что требование (22) будет выполнено, если

$$\begin{aligned}
&1)\ b_1 + (1+\alpha_{21})b_2 + b_3 + b_4 = 0,\\
&2)\ ab_1 + (a + \beta_{21} + 2a\alpha_{21})b_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + \alpha_{21}\beta_{32})b_3 + \beta_{21}b_4 = 0,\\
&3)\ c_2b_2 + c_3b_3 + c_2b_4 = 0,\\
&4)\ \beta_{21}^2b_2 + (\beta_{31} + \beta_{32} + \alpha_{21}\beta_{32})^2b_3 + \beta_{21}^2b_4 = 0,\\
&5)\ c_2\beta_{21}b_2 + c_3(\beta_{31} + \beta_{32} + \alpha_{21}\beta_{32})b_3 + c_2\beta_{21}b_4 = 0,\\
&6)\ c_2^2b_2 + c_3^2b_3 + c_2^2b_4 = 0.
\end{aligned} \tag{24}$$

Учитывая, что в (16) коэффициент β_{21} является произвольным, положим $c_2 = c_3 = \beta_{21}$. В этом случае (24) можно переписать в виде

$$\begin{gathered}
b_1 + (1+\alpha_{21})b_2 + b_3 = -b_4,\\
b_2 + b_3 = -b_4,\\
b_2 = b_4/\alpha_{21}.
\end{gathered} \tag{25}$$

Пусть $b_4 = (4a-2)/(a-1)$. Тогда параметры (16) имеют вид

$$\begin{gathered}
c_2 = c_3 = \beta_{21} = 2/3, \quad \alpha_{21} = (4a-2)/(1-3a),\\
p_1 = 5/4, \quad p_2 = (1-3a)/(2-4a), \quad p_3 = 1/(4-8a),\\
\beta_{31} = 2a_2 - 3a + 5/3, \quad \beta_{32} = 6a^2 - 5a + 1,
\end{gathered} \tag{26}$$

а коэффициенты $b_i,\ 1 \leq i \leq 4$, —

$$\begin{gathered}
b_1 = (2-4a)/(a-1), \quad b_2 = (1-3a)/(a-1),\\
b_3 = -1, \quad b_4 = (4a-2)/(a-1),
\end{gathered} \tag{27}$$

при этом имеют место соотношения

$$\begin{gathered}
\gamma_1 = (48a^4 - 96a^3 + 60a^2 - 14a + 1)/(24 - 48a),\\
\gamma_2 = (24a^4 - 48a^3 + 38a^2 - 14a + 2)/(3a - 3),\\
\gamma_3 = (-12a^3 + 14a^2 - 8a + 2)/(3a - 3).
\end{gathered} \tag{28}$$

Теперь для контроля точности (5), (26) можно применять неравенство

$$||\varepsilon_n|| \le \varepsilon, \tag{29}$$

где $||\cdot||$ — некоторая норма в R^N, ε — требуемая точность интегрирования, а ε_n вычисляется по формуле (23) с коэффициентами (27), (28).

Отметим одну особенность использования (29) для контроля точности вычислений и при выборе шага интегрирования. В случае решения задачи (17) имеет место соотношение

$$\varepsilon_n = \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{\gamma_2 x^3 + \gamma_4 x^4}{(1-ax)^3} y_n, \quad x = \lambda h, \tag{30}$$

где γ_2 вычисляется по второй формуле (28), а γ_4 — по следующей:

$$\gamma_4 = (-12a^4 + 14a^3 - 4a^2)/(3a-3).$$

Численная схема (5), (26) является L-устойчивой, и, следовательно, для нее выполняется $|Q(x)| \to 0$ при $x \to -\infty$ (см. (18) и (19)). Так как для точного решения $y(t_{n+1}) = \exp(x)y(t_n)$ задачи (17) выполняется аналогичное свойство $\exp(x) \to 0$ при $x \to -\infty$, то естественным является требование стремления к нулю ошибки при $x \to -\infty$. Из (30) видно, что для ε_n это требование не выполняется, что может приводить к неоправданному уменьшению шага и, как следствие, к понижению эффективности алгоритма интегрирования. Это связано с тем, что в [5] при получении ε_n все рассуждения проведены для главного члена ошибки.

С целью исправления асимптотического поведения ошибки вместо построенной выше оценки ε_n будем рассматривать величину $\varepsilon_n(j_n)$, определенную по формуле

$$\varepsilon_n(j_n) = D_n^{1-j_n}\varepsilon_n, \quad 1 \le j_n \le 3, \tag{31}$$

а вместо контроля (29) станем проверять следующее неравенство:

$$||\varepsilon_n(j_n)|| \le \varepsilon, \quad 1 \le j_n \le 3. \tag{32}$$

Учитывая, что

$$D_n^{-1} = E + ahf_y + O(h^2), \tag{33}$$

нетрудно видеть, что в смысле главного члена, т. е. в смысле первого члена при разложении ошибок в ряды Тейлора по степеням h, ε_n и $\varepsilon_n(j_n)$ совпадают при всех $j_n, 1 \le j_n \le 3$.

Отметим, что использование (32) вместо (29) к существенному увеличению вычислительных затрат не приводит. При $x \to 0$ оценка $\varepsilon_n(1) = \varepsilon_n$ правильно отражает поведение ошибки, и нет смысла проверять (32) при других значениях j_n. При резком увеличении шага поведение ε_n может оказаться неудовлетворительным, что проявляется в неоправданном уменьшении шага и в повторных вычислениях решения (возвратах). Проверка (32) при $j_n \ne 1$ осуществляется редко. Однако, как показывают расчеты, использование (32) вместо (29) позволяет сократить вычислительные затраты на 10–20 %.

4. Результаты вычислений

Построенный алгоритм численно исследовался на задаче Коши [6], которая в автономной форме имеет вид

$$y_1' = 0.2(y_2 - y_1), \quad y_1(0) = 0,$$

$$y_2' = 10y_1 - (60 - 0.125y_3)y_2 + 0.125y_3, \quad y_2(0) = 0,$$

$$y_3' = 1, \quad y_3(0) = 0, \tag{34}$$

а в неавтономной —

$$y_1' = 0.2(y_2 - y_1), \quad y_1(0) = 0,$$

$$y_2' = 10y_1 - (60 - 0.125t)y_2 + 0.125t, \quad y_2(0) = 0. \tag{35}$$

Начальный шаг интегрирования $h_0 = 0.017$, интервал интегрирования $[0, 400]$, решение в конечной точке $y_1 = 22.2422201$, $y_2 = 27.1107133$, $y_3 = 400$, собственные числа матрицы Якоби $\lambda_1 = -60 \to -10$, $\lambda_2 = -0.17 \to 0$.

Из анализа результатов расчетов следует, что построенным алгоритмом решение (34) по сравнению с (35) при любой задаваемой точности осуществляется примерно на 15 % быстрее. Однако в конце интервала интегрирования фактическая точность соответствует задаваемой только при решении (35), в то время как для (34) она почти на порядок хуже. Следует отметить, что в конце интервала интегрирования имеет место достаточно быстрое изменение решения.

При точности расчетов $\varepsilon = 10^{-3}$ и грубее построенный алгоритм эффективнее метода Гира (LSODE) [7] примерно 1.5 раза, в то время как при более высокой точности расчетов эффективнее программа LSODE, причем при $\varepsilon = 10^{-6}$ более чем в 2 раза. Это естественно, так как в LSODE используются численные формулы до пятого порядка точности включительно, а построенный алгоритм основан на схеме третьего порядка.

Список литературы

[1] Rosenbrock H. H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations. *Computer*, №5, 1963, 329–330.

[2] Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Под ред. Дж. Холла и Дж. Уатта. Мир, М., 1979.

[3] Новиков Е. А., Шитов Ю. А., Шокин Ю. И. Одношаговые безытерационные методы решения жестких систем. *Докл. АН СССР*, **301**, №6, 1988, 1310–1314.

[4] Демидов Г. В., Юматова Л. А. Исследование некоторых аппроксимаций в связи с -устойчивостью полунеявных методов. В *“Численные методы механики сплошной среды”*. ИТПМ СО АН СССР, Новосибирск, **8**, №3, 1977, 68–79.

[5] Демидов Г. В., Новиков Е. А. Оценка ошибки одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. *Там же*, **16**, №1, 1985, 27–39.

[6] Enright W. H., Hull T. E. Comparing numerical methods for the solutions of stiff systems ODE's. *BIT*, No. 15, 1975, 10–48.

[7] Byrne G. D., Hindmarsh A. C. Stiff ODE solvers: a review of current and comming attractions. *J. Comput. Phys.*, No. 70, 1986, 1–62.

Поступила в редакцию 28 июля 1997 г.,
в переработанном виде 16 апреля 1998 г.