Аддитивный метод второго порядка для решения жестких задач*

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

Построен метод второго порядка точности для решения жестких аддитивных систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Получены оценка ошибки и неравенства для контроля точности вычислений. Приведены результаты расчетов.

A method of accuracy order 2 has been constructed stiff additive systems of Ordinary Differential Equations. An error estimate and control inequalities for computation accuracy have been obtained. The calculation results are given.

Введение. Для численного решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений

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

обычно применяются L-устойчивые методы. Здесь y и f – вещественные N-мерные вектор-функции, t – независимая переменная. В случае большой размерности задачи (1) для методов с неограниченной областью устойчивости общие вычислительные затраты фактически полностью определяются временем вычисления и декомпозиции матрицы Якоби системы (1). Во многих алгоритмах используется замораживание матрицы Якоби, то есть применение одной матрицы на нескольких шагах интегрирования. Это позволяет значительно уменьшить вычислительные затраты. Наиболее естественно это осуществляется в итерационных методах решения обыкновенных дифференциальных уравнений, где данная матрица не влияет на порядок точности численной схемы, а только определяет скорость сходимости итерационного процесса. Такой подход широко применяется при реализации полуявных и неявных методов типа Рунге-Кутта, многошаговых методов типа Адамса и Гира (см., например, [1]). Однако для безытерационных методов [2–4] вопрос о замораживании или какой-либо другой аппроксимации матрицы Якоби значительно более сложный. В таких методах матрица Якоби влияет на порядок точности численной схемы, и поэтому какие-либо ее возмущения могут приводить к потере порядка точности. Следует отметить, что безитерационные методы просты с точки зрения реализации на ЭВМ и, как следствие, привлекательны для многих вычислителей. С другой стороны, задачу (1) можно записать в виде [5–6]

$$y' = [f(t,y) - By] + By,\ y(t_0) = y_0,\ t_0 \le t \le t_k, \tag{2}$$

где B есть некоторая аппроксимация матрицы Якоби. Предполагая, что вся жесткость сосредоточена в слагаемом By, выражение в квадратных скобках можно интерпретировать как нежесткую часть. Если при построении безытерационных методов учитывать этот факт, то такая постановка задачи позволяет, в частности, использовать в алгоритмах интегрирования замораживание матрицы Якоби, которая может вычисляться

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

как аналитически, так и численно. Для некоторых задач в качестве матрицы B можно использовать симметричную часть матрицы Якоби или применять ее диагональную аппроксимацию. Здесь построен четырехстадийный метод второго порядка точности, допускающий различные виды аппроксимации матрицы Якоби. Получены оценка ошибки и неравенство для контроля точности вычислений. Приведены результаты расчетов, подтверждающие работоспособность и эффективность алгоритма интегрирования.

Численная схема для автономных задач. Рассмотрим задачу Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений следующего вида

$$y' = \varphi(y) + g(y),\ y(t_0) = y_0,\ t_0 \le t \le t_k, \tag{3}$$

где y, φ и g – вещественные N-мерные вектор-функции, t – независимая переменная. Будем полагать, что вся жесткость сосредоточена в функции $g(y)$, а $\varphi(y)$ есть нежесткая часть. Для численного решения (3) рассмотрим четырехстадийный метод вида

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{4} p_i k_i,\ D_n = E - ahg'_n, \\ k_1 = h\varphi(y_n),\ Dk_2 = h[\varphi(y_n) + g(y_n)],\ Dk_3 = k_2, \\ k_4 = h\varphi(y_n + \beta_{41}k_1 + \beta_{42}k_2 + \beta_{43}k_3), \end{gathered} \tag{4}$$

где E – единичная матрица, $g'_n = \partial g(y_n)/\partial y$, k_i – стадии метода, $a,\ p_i,\ \beta_{4j},\ 1 \le i \le 4, 1 \le j \le 3,$ – числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (4). Для исследования схемы (4) разложим стадии $k_i,\ 1 \le i \le 4$, в ряды Тейлора по степеням h до членов с h^2 включительно и подставим в первую формулу (4). Получим

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + (p_1 + p_2 + p_3 + p_4)h\varphi_n + (p_2 + p_3)hg_n + \\ +(\beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43})p_4 h^2 \varphi'_n \varphi_n + (\beta_{42} + \beta_{43})p_4 h^2 \varphi'_n g_n + \\ +a(p_2 + 2p_3)h^2 g'_n \varphi_n + a(p_2 + 2p_3)h^2 g'_n g_n + O(h^3), \end{gathered}$$

где элементарные дифференциалы $\varphi_n = \varphi(y_n)$, $g_n = g(y_n)$, $\varphi'_n = \partial\varphi(y_n)/\partial y$, и $g'_n = \partial g(y_n)/\partial y$ вычислены на приближенном решении y_n. Представление точного решения $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n в виде ряда Тейлора по степеням h имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h(\varphi + g) + 0.5h^2(\varphi'\varphi + \varphi' g + g'\varphi + g'g) + O(h^3),$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$.

Сравнивая полученные ряды до членов с h^2 включительно при условии $y_n = y(t_n)$, получим условия второго порядка точности схемы (4), то есть:

$$p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1,\ p_2 + p_3 = 1,\ a(p_2 + 2p_3) = 0.5,$$

$$(\beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43})p_4 = 0.5,\ (\beta_{42} + \beta_{43})p_4 = 0.5.$$

Отсюда сразу следует

$$\beta_{41} = 0,\ p_2 = \frac{4a-1}{2a},\ p_3 = \frac{1-2a}{2a},\ p_1 + p_4 = 0,\ (\beta_{42} + \beta_{43})p_4 = \frac{1}{2}. \tag{5}$$

Исследуем устойчивость схемы (4). Применение тестового уравнения $y' = \lambda y$ с комплексным λ, $\Re(\lambda) < 0$, в данном случае неправомерно, поскольку в этом случае теряется смысл в разделении правой части системы дифференциальных уравнений на жесткую и нежесткую часть. Поэтому в (3) положим $\varphi(y) = \lambda_1 y$ и $g(y) = \lambda_2 y$, где λ_1 и λ_2 есть произвольные комплексные числа, причем $\Re(\lambda_2) < 0$. Смысл λ_1 и λ_2 – некоторые собственные числа матриц Якоби функций $\varphi(y)$ и $g(y)$, соответственно.

Применяя (4) для решения задачи

$$y' = \lambda_1 y + \lambda_2 y,\ y(0) = y_0,\ t \geq 0, \tag{6}$$

и обозначая $x = h\lambda_1$ и $z = h\lambda_2$, имеем $y_{n+1} = Q(x,z)y_n$, где

$$Q(x,z) = \{1 + (1-2a)z + x + [-2ap_1 - ap_2 + (\beta_{42} + \beta_{43} - 2a)p_4]xz + 0.5x^2 -$$

$$-a\beta_{42}p_4x^2z + [a^2p_1 + a^2p_4 - a\beta_{42}p_4]xz^2 + (a^2 - ap_2)z^2\}/(1-az)^2.$$

Необходимым условием L-устойчивости численной формулы (4) относительно функции $g(y) = \lambda_2 y$ является выполнение соотношения $Q(x,z) \to 0$ при $z \to -\infty$. Из вида $Q(x,z)$ следует, что это требование будет выполнено, если $p_2 = a$ и $\beta_{42} = 0$. В результате, учитывая (5), получим набор коэффициентов схемы (4) второго порядка точности

$$\beta_{41} = \beta_{42} = 0,\ p_2 = a,\ p_3 = 1 - a\ p_4 = -p_1 = 0.5\beta_{43}^{-1},$$

где β_{43} – свободный параметр, а коэффициент a есть корень уравнения $a^2 - 2a + 0.5 = 0$. Тогда функция устойчивости $Q(x,z)$ схемы (4) имеет вид

$$Q(x,z) = [1 + x + 0.5x^2 + (1-2a)z + (1-2a)xz]/(1-az)^2.$$

Заметим, что если $\varphi(y) \equiv 0$, то схема (4) с полученными коэффициентами совпадает с L-устойчивым $(2,1)$-методом [7]

$$y_{n+1} = y_n + ak_2 + (1-a)k_3,$$

функция устойчивости $Q(0,z)$ которого имеет вид $Q(0,z) = [1 + (1-2a)z]/(1-az)^2$, а локальная ошибка δ_n — следующий:

$$\delta_n = (a - 1/3)h^3 g'^2 g + h^3 g'' g^2/6 + O(h^4).$$

Уравнение $a^2 - 2a + 0.5 = 0$ имеет два вещественных корня $a_1 = 1 - 0.5\sqrt{2}$ и $a_2 = 1 + 0.5\sqrt{2}$. Выберем $a = a_1$, потому что в этом случае меньше коэффициент в главном члене локальной ошибки (2,1)-схемы. Если $g(y) \equiv 0$, то численная формула (4) вырождается в явный двухстадийный метод типа Рунге-Кутта вида

$$y_{n+1} = y_n + (1 - 0.5/\beta_{43})k_1 + 0.5k_4/\beta_{43},$$

Нетрудно видеть, что локальную ошибку δ_n этой схемы можно записать в виде $\delta_n = h^3\varphi'^2\varphi/6 + (1/6 - 0.25\beta_{43}^{-1})\varphi''\varphi^2 + O(h^4)$. Отсюда следует, что локальная ошибка явной формулы будет минимальной, если $\beta_{43} = 2/3$. Теперь окончательно имеем набор коэффициентов схемы (4) второго порядка точности, то есть

$$a = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2},\ \beta_{41} = \beta_{42} = 0,\ \beta_{43} = \frac{2}{3},\ p_4 = -p_1 = \frac{3}{4},\ p_2 = a,\ p_3 = 1 - a.$$

Контроль точности вычислений. Контроль вычислений численной схемы (4) будем осуществлять с помощью метода первого порядка точности. С использованием стадий (4) можно построить семейство численных формул первого порядка вида

$$y_{n+1,1} = y_n + \sum_{i=1}^{5} b_i k_i, \tag{7}$$

где $k_5 = hg(y_n)$, b_i, $1 \leq i \leq 5$, – числовые коэффициенты. Применяя разложения стадий в ряды Тейлора, видим, что (7) будет иметь первый порядок точности, если $b_1 + b_2 + b_3 + b_4 = 1$ и $b_2 + b_3 + b_5 = 1$. Тогда оценку ошибки ε_n схемы (4) можно вычислить по формуле $\varepsilon_n = y_{n+1} - y_{n+1,1}$. При выборе коэффициентов b_i, $1 \leq i \leq 5$, можно руководствоваться различными соображениями. Если, например, в функции $g(y)$ полностью сосредоточена жесткость задачи (3), что для многих задач (2) имеет место при $B = \partial f(y)/\partial y$, то имеет смысл выбрать набор коэффициентов $b_1 = b_3 = b_4 = b_5 = 0$ и $b_2 = 1$ или $b_1 = b_2 = b_4 = b_5 = 0$ и $b_3 = 1$. Такой способ оценки ошибки успешно использовался при реализации (2,1)-метода с аналитическим вычислением матрицы Якоби. Однако, если, например, в задаче (2) используется диагональная аппроксимация матрицы Якоби, то для многих задач (3) функцию $\varphi(y)$ нельзя считать нежесткой частью. В такой ситуации данная оценка может приводить к потере точности вычислений из-за возникающей неустойчивости явной части численной формулы (4). Исходя из этих соображений в (7) выбраны коэффициенты $b_1 = b_5 = 1$ и $b_2 = b_3 = b_4 = 0$. В этом случай (7) преобразуется к виду $y_{n+1,1} = y_n + h[\varphi(y_n) + g(y_n)]$. Как показывают расчеты, применение данной схемы в оценке приводит к более надежному контролю точности вычислений.

Подчеркнем важную особенность построенной оценки ошибки. В силу L-устойчивости схемы (4) следует, что для функции устойчивости $Q(x,z)$ выполняется $Q(x,z) \to 0$ при $z \to -\infty$. Так как для точного решения $y(t_{n+1}) = \exp(x+z)y(t_n)$ задачи (6) выполняется аналогичное свойство, то естественным будет требование стремления к нулю оценки ошибки ε_n при $z \to -\infty$. Однако для построенной оценки имеем $\varepsilon_n = O(z)$. Поэтому с целью исправления асимптотического поведения, вместо ε_n рассмотрим оценки $\varepsilon_n(j_n)$ вида $\varepsilon_n(j_n) = D^{1-j_n}\varepsilon_n$, $1 \leq j_n \leq 3$. Нетрудно видеть, что в смысле главного члена, то есть первого члена при разложении ошибок в ряды Тейлора по степеням h, оценки ε_n и $\varepsilon_n(j_n)$ совпадают при любом значении j_n, причем $\varepsilon_n(3) \to 0$ при $z \to -\infty$. Теперь для контроля точности вычислений можно применять неравенство $\|\varepsilon_n(j_n)\| \leq \varepsilon$, $1 \leq j_n \leq 3$, где ε – требуемая точность расчетов. Отметим, что применение $\varepsilon_n(j_n)$ вместо ε_n не приводит к существенному увеличению вычислительных затрат. При $z \to 0$ оценка $\varepsilon_n(1) = \varepsilon_n$ правильно отражает поведение ошибки и нет смысла проверять 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 для контроля точности используется следующим образом. При каждом фиксированном n выбирается наименьшее значение j_n, при котором выполняется неравенство . Если оно не выполняется ни при каком j_n, то шаг уменьшается и решение вычисляется повторно.

Численная схема для неавтономных задач. Рассмотрим задачу Коши для неавтономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений следующего вида

$$y' = \varphi(t,y) + g(t,y),\ y(t_0) = y_0,\ t_0 \leq t \leq t_k,$$

где y, φ и g – вещественные N-мерные вектор-функции, t – независимая переменная. Далее снова будем предполагать, вся жесткость сосредоточена в функции $g(t,y)$, а $\varphi(t,y)$ есть нежесткая часть. Для численного решения неавтономной задачи рассмотрим четырехстадийный метод вида

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{4} p_i k_i,\ D = E - ahg'_n,\ k_1 = h\varphi(t_n, y_n),$$

$$Dk_2 = h[\varphi(t_n, y_n) + g(t_n + ch, y_n)],\ Dk_3 = k_2, \tag{8}$$

$$k_4 = h\varphi(t_n + (\beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43})h, y_n + \beta_{41}k_1 + \beta_{42}k_2 + \beta_{43}k_3),$$

где E – единичная матрица, $g'_n = \partial g(t_n, y_n)/\partial y$, k_i – стадии метода, c, a, p_i, β_{4j}, $1 \le i \le 4, 1 \le j \le 3$, – числовые коэффициенты. Для исследования схемы (8) разложим стадии k_i, $1 \le i \le 4$, в ряды Тейлора по степеням h до членов с h^2 включительно. Подставляя эти ряды в первую формулу (8), получим

$$y_{n+1} = y_n + (p_1 + p_2 + p_3 + p_4)h\varphi_n + (p_2 + p_3)hg_n +$$
$$+(\beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43})p_4 h^2 \varphi'_{tn} + c(p_2 + p_3)g'_{tn} +$$
$$+(\beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43})p_4 h^2 \varphi'_n \varphi_n + (\beta_{42} + \beta_{43})p_4 h^2 \varphi'_n g_n +$$
$$+a(p_2 + 2p_3)h^2 g'_n \varphi_n + a(p_2 + 2p_3)h^2 g'_n g_n + O(h^3),$$

где элементарные дифференциалы $\varphi_n = \varphi(t_n, y_n)$, $g_n = g(t_n, y_n)$, $\varphi'_{tn} = \partial\varphi(t_n, y_n)/\partial t$, $g'_{tn} = \partial g(t_n, y_n)/\partial t$, $\varphi'_n = \partial\varphi(t_n, y_n)/\partial y$, $g'_n = \partial g(t_n, y_n)/\partial y$ вычислены на приближенном решении y_n. Представление точного решения $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n в виде ряда Тейлора по степеням h имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h(\varphi + g) + 0.5h^2(\varphi'_t + g'_t + \varphi'\varphi + \varphi' g + g'\varphi + g' g) + O(h^3),$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$.

Сравнивая полученные ряды до членов с h^2 включительно при условии $y_n = y(t_n)$, получим условия второго порядка точности схемы (7), то есть: $p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1$, $p_2 + p_3 = 1$, $(\beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43})p_4 = 0.5$, $c(p_2 + p_3) = 0.5$, $(\beta_{42} + \beta_{43})p_4 = 0.5$, $a(p_2 + 2p_3) = 0.5$. Отсюда сразу следует $c = 0.5$. Теперь рассуждая по аналогии с исследованием схемы (4), получим коэффициенты численной формулы (8), которые имеют вид

$$a = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2},\ \beta_{41} = \beta_{42} = 0,\ c = \frac{1}{2},\ \beta_{43} = \frac{2}{3},\ p_1 = -\frac{3}{4},\ p_2 = a,\ p_3 = 1 - a,\ p_4 = \frac{3}{4}.$$

Неравенство для контроля точности вычислений построим по аналогии со схемой (4), где в оценке ε_n используется приближение к решению, полученное методом второго порядка точности (8), и приближенное решение, вычисленное методом первого порядка вида $y_{n+1,1} = y_n + h[\varphi(t_n, y_n) + g(t_n + 0.5h, y_n)]$. Выбор шага по точности осуществляется точно также, как и в случае автономной системы.

Анализ результатов расчетов. Далее построенный алгоритм будем называть ASODE2. Замораживание матрицы Якоби, то есть применение матрицы $D = E - ahg'_n$ на нескольких шагах интегрирования, проводилось по следующему правилу. Если матрица Якоби не пересчитывалась, то для сохранения устойчивости численной схемы величина шага интегрирования тоже не менялась. Попытка применения старой матрицы осуществлялась после каждого успешного шага интегрирования. Три причины приводили к размораживанию: 1) нарушение неравенства для контроля точности вычислений, 2) превышение количество шагов с замороженной матрицей числа q_f, 3) превышение прогнозируемого шага интегрирования последнего успешного шага в q_h раз. Параметры q_f и q_h можно использовать для настройки метода на решение конкретных задач. Если $q_f \to \infty$ и $q_h \to \infty$, то число шагов с одной матрицей Якоби возрастает. Если $q_f = 0$ и $q_h = 0$, то замораживание матрицы не происходит. Поэтому в случае большой размерности системы обыкновенных дифференциальных уравнений имеет смысл выбирать q_f и q_h достаточно большими. В приведенных ниже расчетах $q_f = 20$ и $q_h = 2$.

Все рассматриваемые ниже примеры приводились к виду (2). Вычисления осуществлялись с требуемой точностью $\varepsilon = 10^{-2}$. Расчеты проводились на PC Intel(R) Core(TM) i7-3770S CPU@3.10GHz с двойной точностью. Схема (4) имеет второй порядок точности и поэтому проводить с ее помощью расчеты с более высокой точностью нецелесообразно. В расчетах левая часть неравенства для контроля точности вычислялась по формуле $\|\varepsilon_n(j_n)\| = \max\limits_{1\le i\le N} \left\{|\varepsilon_n^i(j_n)|/\Big(|y_n^i| + r\Big)\right\}$, где i – номер компоненты, r – положительный параметр. Если по i-й компоненте решения выполняется неравенство $|y_n^i| < r$, то контролируется абсолютная ошибка εr, в противном случае – относительная ошибка ε. В расчетах параметр r выбирался таким образом, чтобы по всем компонентам решения фактическая точность была не хуже задаваемой. Ниже через is, if, idec, isol обозначены, соответственно, суммарное число шагов интегрирования, правых частей системы (1), декомпозиций матрицы Якоби и число обратных ходов в методе Гаусса.

Пример 1 [8].

$$y_1' = -0.013y_1 - 1000y_1y_3,\ y_2' = -2500y_2y_3,$$
$$y_3' = -0.013y_1 - 1000y_1y_3 - 2500y_2y_3, \tag{9}$$
$$t \in [0, 50],\ y_1(0) = 1,\ y_2(0) = 1,\ y_3(0) = 0,\ h_0 = 2.9 \cdot 10^{-4}.$$

Решение задачи (9) осуществлялось методом (4) с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби, то есть в численной формуле (4) использовалась диагональная матрица D_n с элементами d_{ii} на диагонали вида $d_{11} = -0.013 - 1000y_3$, $d_{22} = -2500y_3$ и $d_{33} = -1000y_1 - 2500y_2$. Так как в этом случае вычислительные затраты метода (4) практически такие же, как и в явных методах, то сравнение эффективности проводилось с известным явным методом Мерсона [9] четвертого порядка точности. Для вычисления приближенного решения с точностью $\varepsilon = 10^{-2}$ алгоритмом ASODE2 потребовалось 687 шагов, остальные затраты вычисляются из вида схемы (4). Для решения данной задачи методу Мерсона потребовалось 400627 вычислений правой части.

В случае использования полной матрицы Якоби системы (9) алгоритму ASODE2 без замораживания матрицы Якоби для решения задачи (9) потребовалось 38 шагов, 38 декомпозиций матрицы Якоби и 108 обратных ходов в методе Гаусса, остальные затраты вычисляются из вида схемы (4). При расчетах с замораживанием матрицы Якоби вычислительные затраты следующие: is=98, idec=15, isol=288.

Пример 2 [8].

$$y_1' = -55y_1 + 65y_2 - y_1y_2,$$
$$y_2' = 0.0785(y_1 - y_2),\ y_3' = 0.1y_1, \tag{10}$$
$$t \in [0, 500],\ y_1(0) = 1,\ y_2(0) = 1,\ y_3(0) = 0,\ h_0 = 2 \cdot 10^{-2}.$$

Решение задачи (10) осуществлялось методом (4)с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби, причем $d_{11} = -55 - y_3$, $d_{22} = -0.0785y_3$ и $d_{33} = 0$. Приближенное решение с точностью $\varepsilon = 10^{-2}$ алгоритмом ASODE2 вычислено за 4 953 шага. Для решения данной задачи методу Мерсона потребовалось 80 713 вычислений правой части.

В случае использования полной матрицы Якоби системы (10) алгоритму ASODE2 без замораживания матрицы Якоби потребовалось 81 шаг, 81 декомпозиция матрицы Якоби и 388 обратных хода в методе Гаусса. При расчетах с замораживанием матрицы вычислительные затраты следующие: is=338, idec=24, isol=1 124.

Пример 3([8]).

$$\begin{gathered} y_1' = 77.27(y_1(1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1 - y_2) + y_2), \\ y_2' = (y_3 - (1 + y_1)y_2)/77.27,\ y_3' = 0.161(y_1 - y_3), \\ t \in [0, 360],\ y_1(0) = 1,\ y_2(0) = 2,\ y_3(0) = 3,\ h_0 = 10^{-6}. \end{gathered} \tag{11}$$

Решение задачи (11) осуществлялось методом (4) с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби, причем $d_{11} = 77.27(1 - 1.675 \cdot 10^{-7} y_1 - y_2)$, $d_{22} = -(1 + y_1)/77.27$ и $d_{33} = -0.161$. Приближенное решение с точностью $\varepsilon = 10^{-2}$ алгоритмом ASODE2 вычислено за 19 964 шага. Для решения данной задачи методу Мерсона потребовалось 2 3700 664 вычислений правой части.

В случае использования полной матрицы Якоби системы (11) алгоритму ASODE2 без замораживания матрицы Якоби потребовалось 2 449 шагов, 2 652 декомпозиции матрицы Якоби и 6 964 обратных хода в методе Гаусса. При расчетах с замораживанием матрицы вычислительные затраты следующие: is=19 807, idec=3 431, isol=50 924.

Заключение. Предложенный алгоритм интегрирования создавался для численного решения задач механики сплошной среды после дискретизации по пространству методом конечных элементов или с помощью конечных разностей. В этом случае в задаче (3) разделение на функции $g(y)$ и $\varphi(y)$ происходит естественным образом — $g(y)$ есть симметричная часть, описываемая оператором дифференцирования второго порядка, а $\varphi(y)$ есть несимметричная часть (конвективные слагаемые), описываемые оператором дифференцирования первого порядка. При реализации численной формулы (4) необходимо дважды решать линейную систему алгебраических уравнений. В задачах механики сплошной среды эффективность алгоритма интегрирования может быть достигнута за счет специальных методов решения линейных систем с симметричной матрицей, которая во многих случаях положительно определенная.

Схему (4) можно применять также для решения локально-неустойчивых задач, причем $\varphi(y)$ в этом случае отвечает за собственные числа матрицы Якоби с положительными вещественными частями. В отличие от A-устойчивых или L-устойчивых методов, у которых область неустойчивости обычно небольшая и которые являются A-устойчивыми или L-устойчивыми не только в левой, но и в правой полуплоскости плоскости $\{h\lambda\}$, явные методы типа Рунге-Кутта являются неустойчивыми практически во всей правой полуплоскости и поэтому более предпочтительны при определении неустойчивого решения. Для локально-неустойчивых задач в ряде случаев разделение правой части системы обыкновенных дифференциальных уравнений на функции $\varphi(y)$ и $g(y)$ из физических соображений тоже не вызывает особых трудностей.

Приведенные результаты численных экспериментов не ориентированы на решение задач механики сплошной среды или локально-неустойчивых задач, а направлены на исследование возможностей алгоритма интегрирования при решении некоторых общепринятых тестовых примеров. Тестовые примеры выбирались таким образом, чтобы продемонстрировать разные нюансы работы алгоритма интегрирования. Если поведение алгоритма на нескольких тестовых задачах совпадало, то выбирался наиболее простой из них. Цель расчетов заключалась в проверке работоспособности алгоритма с переменным шагом и с замораживанием матрицы Якоби, надежности неравенства для контроля точности вычислений, а также в исследовании возможности расчетов с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби. В последнем случае вычислительные затраты на шаг в явных методах и построенном алгоритме различаются незначительно. В частности из анализа результатов расчетов жестких задач следует, что в случае невозможности применения методов с неограниченной областью устойчивости, алгоритм (4) существенно эффективнее метода Мерсона — наиболее распространенного среди явных численных схем типа Рунге-Кутта.

Список литературы

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

[2] Rosenbrock H.H. General implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer J. 1963. №5. P. 329-330.

[3] Kaps P., Rentrop P. Generalized Runge-Kutta methods of order four with stepsize control for stiff ordinary differential equations // Numer. Math. 1979. №33. P. 55-68.

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

[5] Cooper G.J., Sayfy A. Additive Runge-Kutta Methods for Stiff Ordinary Differential Equations // Mathematics of Computation, 1983. V. 40, №161. P. 207-218.

[6] Новикова Е.А. Аддитивный метод третьего порядка для решения жестких неавтономных задач // СибЖИМ. Т. XIII, №1(41). 2010. С. 84–94.

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

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

[9] Merson R.H. An operational methods for integration processes // Proc. Symp. on Data Proc. Weapons Research Establishment, Salisbury, Australia, 1957.