АЛГОРИТМ НА НЕОДНОРОДНЫХ СХЕМАХ ВТОРОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

Новиков Евгений Александрович

Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск

E-mail: novikov@icm.krasn.ru

Работа поддержана грантом РФФИ 11-01-00106

Основные тенденции при построении численных методов связаны с расширением их возможностей для решения задач вида **(1)** высокой размерности

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

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

В некоторых случаях расчеты требуется проводить с невысокой точностью - порядка **1%**. Это связано с тем, что измерение констант, входящих в правую часть системы, часто проводится достаточно грубо. Иногда такая точность расчетов устраивает с точки зрения поставленной цели.

Порядок аппроксимации численной схемы следует сочетать с требуемой точностью расчетов.

Современные методы решения жестких задач, как правило, используют обращение матрицы Якоби системы **(1)**. При большой размерности эффективность методов определяется временем декомпозиции этой матрицы. Для повышения эффективности расчетов в ряде алгоритмов используется замораживание матрицы Якоби.

Еще одно важное требование - возможность численной аппроксимации матрицы Якоби. Это связано с тем, что правая часть системы **(1)** часто имеет достаточно сложный вид. Проблемы замораживания и численной аппроксимации в некотором смысле близки друг к другу и поэтому могут быть разрешены одновременно.

Некоторым аналогом замораживания матрицы Якоби является применение в расчетах алгоритмов на основе явных и ***L***-устойчивых методов с автоматическим выбором численной схемы. Эффективность может быть повышена за счет расчета переходных участков явным методом. **В качестве критерия выбора эффективной численной формулы естественно применять неравенство для контроля устойчивости.**

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.

L-устойчивый (2,1)-метод

Для решения **(1)** рассмотрим **(2,1)**-схему вида **(2)**

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2$$

$$D_n k_1 = hf(y_n) \qquad \textbf{(2)}$$

$$D_n k_2 = k_1$$

где $D_n = E - ahA_n$, A_n – некоторая матрица, представимая в виде **(3)**

$$A_n = f_n' + hB_n + O(h^2) \qquad \textbf{(3)}$$

B_n – не зависящая от шага интегрирования матрица. Использование матрицы A_n вида **(3)** позволяет применять **(2)** с замораживанием как аналитической, так и численной матрицы Якоби. В случае использования матрицы Якоби f_{n-k}', вычисленной k шагов назад, имеем **(3a)**

$$B_n = -kf_n'' f_n. \qquad \textbf{(3a)}$$

Если матрица Якоби вычисляется численно с шагом $r_j = c_j h$, то элементы $b_{n,ij}$ матрицы B_n имеют вид **(3b)**

$$b_{n,ij} = 0.5 c_j \partial^2 f_i(y_n) / \partial y_j^2. \qquad \textbf{(3b)}$$

В случае замораживания численной матрицы Якоби B_n есть сумма этих матриц.

В расчетах шаг $\boldsymbol{r_j}$ выбирался по формуле **(4)**

$$\boldsymbol{r_j} = \max(10^{-14}, 10^{-7} \,|\, \boldsymbol{y_j} \,|). \qquad \textbf{(4)}$$

Требования второго порядка и ***L***-устойчивости схемы **(2)** приводят к коэффициентам **(5)**

$$\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{a}, \quad \boldsymbol{p}_2 = 1 - \boldsymbol{a}, \qquad \textbf{(5)}$$

где $\boldsymbol{a}$ определяется из условия ***L***-устойчивости **(6)**

$$\boldsymbol{a}^2 - 2\boldsymbol{a} + 0.5 = 0, \; \boldsymbol{a} = 1 - 0.5\sqrt{2} \qquad \textbf{(6)}$$

2-х стадийная формула типа Розенброка **(7)**

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}+1} &= \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}} + \boldsymbol{a}\boldsymbol{k}_1 + (1-\boldsymbol{a})\boldsymbol{k}_2 \\ \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{n}}\boldsymbol{k}_1 &= \boldsymbol{h}\boldsymbol{f}\,(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}}) \qquad \textbf{(7)} \\ \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{n}}\boldsymbol{k}_2 &= \boldsymbol{h}\boldsymbol{f}\,(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}} + \boldsymbol{a}\boldsymbol{k}_1) \end{aligned}$$

Эта схема лучшая среди 2х стадийных.

Контроль точности построен с применением схемы 1-го порядка. Неравенство для контроля точности **(8)**

$$\| \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{n}}^{1-j_n} (\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_1) \| \le \boldsymbol{\varepsilon},\ 1 \le \boldsymbol{j_n} \le 2, \qquad \textbf{(8)}$$

Оценку максимального собственного числа $\boldsymbol{w}_{\boldsymbol{n},0} = \boldsymbol{h}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{max}}$ матрицы Якоби вычислим через ее норму **(9)**

$$\boldsymbol{w}_{\boldsymbol{n},0} = \boldsymbol{h} \| \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{y}} \| = \boldsymbol{h} \max_{1 \le \boldsymbol{i} \le \boldsymbol{N}} \sum_{\boldsymbol{j}=1}^{\boldsymbol{N}} | \frac{\partial \boldsymbol{f}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}})}{\partial \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{j}}} | \qquad \textbf{(9)}$$

Данная оценка будет применяться для переключения на явные методы.

Метод типа Рунге-Кутты второго порядка

Для решения **(1)** рассмотрим **(10)**

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}+1} = \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}} + \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{k}_2, \\ &\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{hf}(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}}), \\ &\boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{hf}(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}} + \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{k}_1). \end{aligned} \qquad \textbf{(10)}$$

Условия второго порядка точности **(11)**

$$\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 = 1, \ \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{p}_2 = 0.5. \qquad \textbf{(11)}$$

Оценка аналога глобальной ошибки $\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{n},2}$ **(12)**

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{n},2} = \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}+1} - \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}+1,1} = \boldsymbol{p}_2(\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_1). \qquad \textbf{(12)}$$

Для повышения надежности данной оценки выберем $\boldsymbol{\beta} = 1$. Тогда стадия $\boldsymbol{k}_1$ вычисляется в точке $\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{n}}$, а $\boldsymbol{k}_2$ - в точке $\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{n}+1}$. Неравенство для контроля точности имеет вид **(13)**

$$0.5 \| \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_1 \| \le \boldsymbol{\varepsilon}. \qquad \textbf{(13)}$$

Контроль устойчивости

Рассмотрим вспомогательную стадию $\boldsymbol{k}_3 = \boldsymbol{hf}(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}+1})$, которая совпадает со стадией $\boldsymbol{k}_1$ для следующего шага. Записывая стадии метода на задаче **(14)**

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y} \qquad \textbf{(14)}$$

получим **(15)**

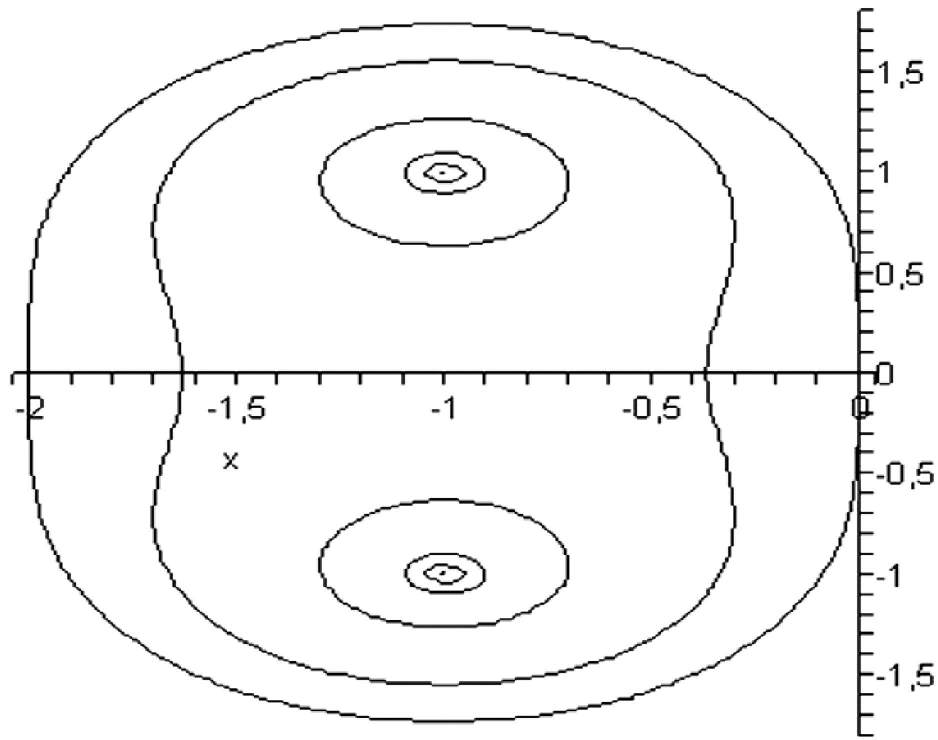
$$\begin{aligned} \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_1 &= \boldsymbol{X}^2 \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}}, \\ 2(\boldsymbol{k}_3 - \boldsymbol{k}_2) &= \boldsymbol{X}^3 \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{n}} \end{aligned} \qquad \textbf{(15)}$$

где $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{h}\boldsymbol{A}$

Оценку максимального собственного числа $\boldsymbol{w}_{\boldsymbol{n},2} = \boldsymbol{h}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{n},\boldsymbol{max}}$ матрицы Якоби можно вычислить по формуле **(16)**

$$\boldsymbol{w}_{\boldsymbol{n},2} = 2 \max_{1 \le \boldsymbol{i} \le \boldsymbol{N}} |\boldsymbol{k}_3^{\boldsymbol{i}} - \boldsymbol{k}_2^{\boldsymbol{i}}| \,/\, |\boldsymbol{k}_2^{\boldsymbol{i}} - \boldsymbol{k}_1^{\boldsymbol{i}}|. \qquad \textbf{(16)}$$

Область устойчивости схемы **(10)** приведена на рис. 1.



Неравенство для контроля устойчивости **(17)**

$$w_{n,2} \leq 2. \quad \textbf{(17)}$$

Выбор шага по точности и устойчивости **(18)**

$$h_{n+1} = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})]. \quad \textbf{(18)}$$

Метод первого порядка

Рассмотрим схему вида **(19)**

$$y_{n+1} = y_n + r_1 k_1 + r_2 k_2,$$
$$k_1 = hf(y_n), k_2 = hf(y_n + k_1). \quad \textbf{(19)}$$

Стадии k_1 и k_2 из метода второго порядка.

Функция устойчивости $Q(x)$ имеет вид **(20)**

$$Q(x) = 1 + (r_1 + r_2)x + r_2 x^2, \quad x = h\lambda. \quad \textbf{(20)}$$

Условия первого порядка **(21)**

$$r_1 + r_2 = 1 \quad \textbf{(21)}$$

В качестве функции устойчивости выберем многочлен Чебышева **(22)**

$$T_2(x) = 1 - 8x/\gamma + 8x^2/\gamma^2, \; \gamma = -8 \quad \textbf{(22)}$$

Имеем коэффициенты **(23)**

$$r_1 = 7/8, \; r_2 = 1/8 \quad \textbf{(23)}$$

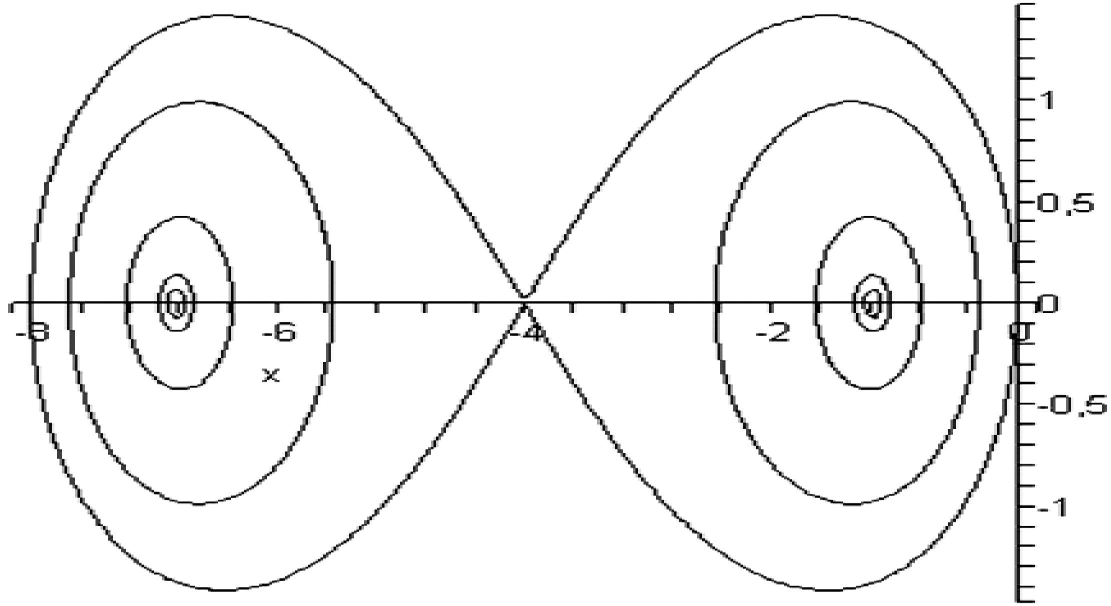
Неравенство для контроля точности **(24)**

$$\| k_2 - k_1 \| \le 8\varepsilon/3 \quad \textbf{(24)}$$

Оценка максимального собственного числа $w_{n,1} = h\lambda_{n,max}$ **(25)**

$$w_{n,1} = 8 \max_{1 \le i \le N} |k_3^i - k_2^i| / |k_2^i - k_1^i|. \quad \textbf{(25)}$$

Область устойчивости приведена на рис. 2.



Неравенство для контроля устойчивости **(26)**

$$w_{n,1} \leq 8. \quad \textbf{(26)}$$

Алгоритмы интегрирования с выбором метода

Расчеты всегда начинаются методом второго порядка как более точным.

Переход на схему первого порядка осуществляется при нарушении неравенства $\boldsymbol{w}_{\boldsymbol{n},2} \le 2$.

Обратный переход на метод второго порядка происходит в случае выполнения неравенства $\boldsymbol{w}_{\boldsymbol{n},1} \le 2$.

В случае использования ***L***-устойчивой схемы формулировка алгоритма интегрирования также не вызывает трудностей.

Нарушение неравенства $\boldsymbol{w}_{\boldsymbol{n},1} \le 8$ вызывает переход на схему (2).

Передача управления явным методам происходит в случае выполнения неравенства $\boldsymbol{w}_{\boldsymbol{n},0} \le 8$.

Алгоритм RKMK2 предназначен для расчетов с точностью порядка 1% и хуже. 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.

Результаты расчетов

Ниже расчеты проводились с точностью $\varepsilon = 10^{-2}$. Сравнение эффективности проводилось с методом Гира в реализации А. Хиндмарша DLSODE.

Ниже через **if (ij)** обозначены, соответственно, суммарное число вычислений правой части и количество декомпозиций матрицы Якоби задачи **(1)**.

В качестве первого тестового примера выбрана простейшая модель реакции Белоусова – Жаботинского **(26)**

$$y'_1 = 77.27(y_2 - y_1 y_2 + y_1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1^2),$$

$$y'_2 = (-y_2 - y_1 y_2 + y_3) / 77.27,$$

$$y'_3 = 0.161(y_1 - y_3), \quad \textbf{(26)}$$

$$t \in [0, 300], h_0 = 2 \cdot 10^{-3}$$

$$y_1(0) = 4, y_2(0) = 1.1, y_3(0) = 4$$

Табл. 1

RKMK2(0)	RKMK2(1)	RKMK2(3)	DLSODE
1 214(65)	**2 112 678**	**13 721 414**	**1 129(107)**

Второй пример описывается системой двух уравнений в частных производных с начальными и граничными условиями.

Задача исследования проникновения помеченных радиоактивной меткой антител в пораженную опухолью ткань живого организма.

После дискретизации по пространственной переменной, получим **(27)**

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{y}), \\ &\boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{g}, \boldsymbol{y} \in \boldsymbol{R}^{2\boldsymbol{N}}, 0 \le \boldsymbol{t} \le 20, \end{aligned} \quad \textbf{(27)}$$

где N – задаваемый пользователем параметр. Функция $\boldsymbol{f}$ определяется формулами **(28)**

$$\boldsymbol{f}_{2\boldsymbol{j}-1} = \boldsymbol{\alpha}_{\boldsymbol{j}} \frac{\boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}+1} - \boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}-3}}{2\triangle\zeta} +$$

$$+\boldsymbol{\beta}_{\boldsymbol{j}} \frac{\boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}-3} - 2\boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}-1} + \boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}+1}}{(\triangle\zeta)^2} - \boldsymbol{k}\boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}-1}\boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}}, \textbf{(28)}$$

$$\boldsymbol{f}_{2\boldsymbol{j}} = -\boldsymbol{k}\boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}}\boldsymbol{y}_{2\boldsymbol{j}-1}$$

Табл. 2

RKMK2(0)	RKMK2(1)	RKMK2(3)	DLSODE
14 106(38)	51 014	315 954	25 358(62)

Алгоритм на основе явных схем с переменным порядком и шагом по времени счета более чем в 2 раза эффективнее других методов, что является следствием достаточно большой размерности задачи **(27)**.

С ростом N преимущество явных методов по времени расчетов возрастает.