

АЛГОРИТМ НА НЕОДНОРОДНЫХ СХЕМАХ ВТОРОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

Новиков Евгений Александрович

Институт вычислительного моделирования СО РАН,
Красноярск

E-mail: novikov@icm.krasn.ru

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

$$y' = f(y), y(t_0) = y_0, t_0 \leq t \leq t_k \quad (1a)$$

$$y' = f(t, y), y(t_0) = y_0, t_0 \leq t \leq t_k \quad (1b)$$

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)

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 \\ D_n k_1 &= h f(y_n) \\ D_n k_2 &= k_1\end{aligned} \quad (2)$$

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

$$A_n = f'_n + hB_n + O(h^2) \quad (3)$$

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)

$$B_n = -k f''_n f_n. \quad (3a)$$

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

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

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

В расчетах шаг r_j выбирался по формуле (4)

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

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

$$p_1 = a, \quad p_2 = 1 - a, \quad (5)$$

где a определяется из условия L -устойчивости (6)

$$a^2 - 2a + 0.5 = 0, \quad a = 1 - 0.5\sqrt{2} \quad (6)$$

2-х стадийная формула типа Розенброка (7)

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + ak_1 + (1-a)k_2 \\ D_n k_1 &= hf(y_n) \\ D_n k_2 &= hf(y_n + ak_1) \end{aligned} \quad (7)$$

Эта схема лучшая среди 2-х стадийных.

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

$$\|D_n^{1-j_n}(k_2 - k_1)\| \leq \varepsilon, \quad 1 \leq j_n \leq 2, \quad \mathbf{(8)}$$

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

$$w_{n,0} = h \left\| \frac{\partial f}{\partial y} \right\| = h \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N \left| \frac{\partial f_i(y_n)}{\partial y_j} \right| \quad \mathbf{(9)}$$

Данная оценка будет применяться для переключения на явные методы.

МЕТОД ТИПА РУНГЕ-КУТТЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Для решения (1) рассмотрим (10)

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2, \\k_1 &= hf(y_n), \\k_2 &= hf(y_n + \beta k_1).\end{aligned}\tag{10}$$

Условия второго порядка точности (11)

$$p_1 + p_2 = 1, \quad \beta p_2 = 0.5.\tag{11}$$

Оценка аналога глобальной ошибки $\varepsilon_{n,2}$ (12)

$$\varepsilon_{n,2} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = p_2(k_2 - k_1).\tag{12}$$

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} . Неравенство для контроля точности имеет вид (13)

$$0.5 \|k_2 - k_1\| \leq \varepsilon.\tag{13}$$

КОНТРОЛЬ УСТОЙЧИВОСТИ

Рассмотрим вспомогательную стадию $k_3 = hf(y_{n+1})$, которая совпадает со стадией k_1 для следующего шага. Записывая стадии метода на задаче (14)

$$y' = Ay \quad (14)$$

получим (15)

$$\begin{aligned} k_2 - k_1 &= X^2 y_n, \\ 2(k_3 - k_2) &= X^3 y_n \end{aligned} \quad (15)$$

где $X = hA$

Оценку максимального собственного числа $w_{n,2} = h\lambda_{n,max}$ матрицы Якоби можно вычислить по формуле (16)

$$w_{n,2} = 2 \max_{1 \leq i \leq N} \frac{|k_3^i - k_2^i|}{|k_2^i - k_1^i|}. \quad (16)$$

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

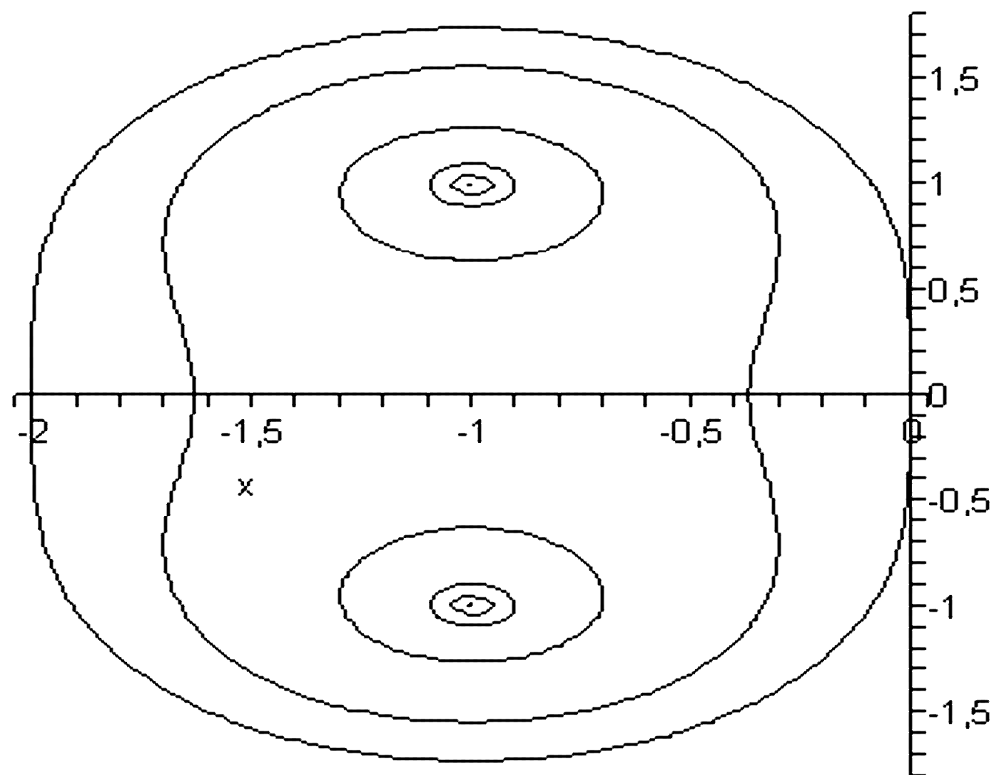


Рис. 1. Область устойчивости схемы (10)

Неравенство для контроля устойчивости (17)

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

Выбор шага по точности и устойчивости (18)

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

МЕТОД ПЕРВОГО ПОРЯДКА

Рассмотрим схему вида (19)

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

Стадии k_1 и k_2 из метода второго порядка.

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

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

Условия первого порядка (21)

$$r_1 + r_2 = 1 \quad (21)$$

В качестве функции устойчивости выберем многочлен Чебышева (22)

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

Имеем коэффициенты (23)

$$r_1 = 7/8, \quad r_2 = 1/8 \quad (23)$$

Неравенство для контроля точности (24)

$$\|k_2 - k_1\| \leq 8\varepsilon / 3 \quad (24)$$

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

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

Область устойчивости приведена на рис. 2.

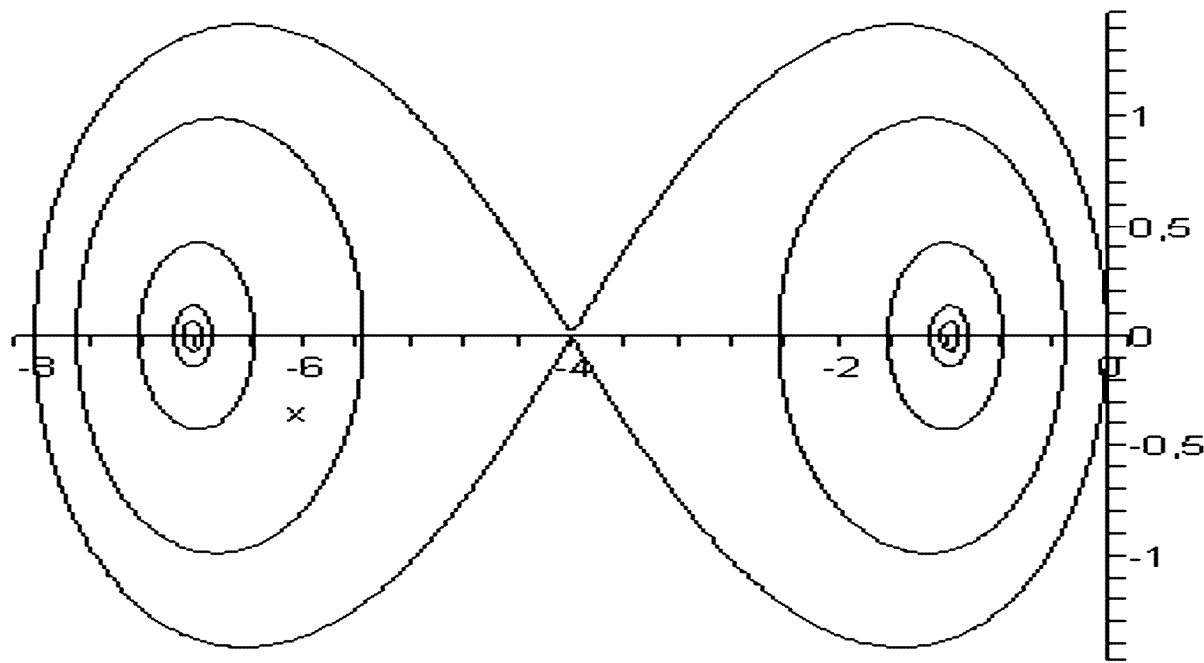


Рис. 2. Область устойчивости

Неравенство для контроля устойчивости (26)

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

АЛГОРИТМЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ С ВЫБОРОМ МЕТОДА

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 $w_{n,1} \leq 2$.

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

Нарушение неравенства $w_{n,1} \leq 8$ вызывает переход на L -устойчивую схему (2). Передача управления явным методам происходит в случае выполнения неравенства $w_{n,0} \leq 8$.

Алгоритм РКМК2 предназначен для расчетов с точностью порядка 1% и хуже. В этом случае достигается его максимальная эффективность.

В РКМК2 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)**

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

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

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

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

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

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)

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

где N – задаваемый пользователем параметр. Функция f определяется формулами (28)

$$\begin{aligned} f_{2j-1} &= \alpha_j \frac{y_{2j+1} - y_{2j-3}}{2\Delta\zeta} + \\ &+ \beta_j \frac{y_{2j-3} - 2y_{2j-1} + y_{2j+1}}{(\Delta\zeta)^2} - ky_{2j-1}y_{2j}, \quad (28) \\ f_{2j} &= -ky_{2j}y_{2j-1} \end{aligned}$$

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.

**СПАСИБО
ЗА
ВНИМАНИЕ**