УДК 519.622

М.В. Рыбков

Алгоритм с переменным числом стадий на основе методов первого порядка с согласованными областями устойчивости

An Algorithm of Variable Step Size and Number of Stages Based on the First Order Methods with Conformed Stability Domains

Аннотация. В работе рассматривается задача Коши для жесткой системы ОДУ. Построены явные m-стадийные методы типа Рунге-Кутты первого порядка точности, у которых области устойчивости промежуточных численных формул согласованы с областью устойчивости основной схемы. На базе них построен алгоритм с переменным числом стадий. Построены неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы, а также условия переключения между методами в алгоритме. Приведены результаты расчетов, подтверждающие повышение эффективности расчетов.

Ключевые слова. Методы Рунге-Кутты, контроль точности и устойчивости, согласованные области устойчивости, жесткие задачи

Abstract. The Cauchy problem for a stiff system of ODEs is considered. Explicit m-stage methods of the Runge-Kutta type of the first order are designed with stability domains of intermediate numerical conformed with stability domain of the basic scheme. An algorithm of variable step size and number of stages based on them is developed. Inequalities for accuracy and stability control and the criteria of switching between methods are obtained. Numerical results showing growth of the efficiency are given.

Keywords. Runge-Kutta methods, accuracy and stability control, conformed stability domains, stiff problems

Введение

Математическое моделирование многих процессов, происходящих в различных природных и техногенных системах, приводит к необходимости исследования систем обыкновенных дифференциальных уравнений, которые записываются в виде задачи Коши. Большой класс задач электротехники описывается жесткими системами дифференциальных уравнений, которые возникают ввиду учета факторов, которые как слабо, так и сильно влияют на систему. При численном решении задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений вида

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

в [1-2] предлагается применять явные методы типа Рунге-Кутты

$$y_{n+1} = y_n + \sum\nolimits_{i=1}^{m} p_{mi} k_i, \quad k_i = hf(t_n + \alpha_i h, y_n + \sum\nolimits_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \tag{2}$$

где y и f – гладкие вещественные N-мерные вектор функции, t – независимая переменная, k_i, $1 \le i \le m$, – стадии метода, α_i, p_{mi}, β_{ij}, $1 \le i \le m$, $1 \le j \le i\text{-}1$, – коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости схемы (2). Методы вида (2) эффективны при расчетах нежестких задач. Тем не менее, из результатов расчетов жестких задач алгоритмами на основе явных формул с выбором шага по точности следует, что на участке установления (на котором производные решения малы) возникает большое число повторных вычислений решения из-за возникающей неустойчивости численной схемы.

В [2-3] построен алгоритм получения коэффициентов многочленов устойчивости, с помощью которых можно построить явные методы с заданными формой и размером области устойчивости. Там же численно показано значительное повышение эффективности алгоритмов интегрирования за счет комбинирования численных формул с различными характеристиками устойчивости в процессе вычислений на основании критерия устойчивости. При этом в [2] не рассмотрен вопрос о выборе коэффициентов β_{ij}, которые влияют на устойчивость промежуточных (внутренних) численных схем и, в конечном счете, на эффективность алгоритма интегрирования. Авторы ограничились замечанием, что устойчивости промежуточных формул можно добиться за счет выбора β_{ij} достаточно малыми.

Здесь предложен способ выбора коэффициентов β_{ij} для согласования промежуточных численных схем метода с основной. Построены методы первого порядка с согласованными областями устойчивости, на основе которых создан алгоритм интегрирования с переменным числом стадий для решения умеренно жестких задач, и приведены результаты расчетов.

Численные схемы

Для упрощения выкладок далее рассмотрим задачу Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \le t \le t_k, \tag{3}$$

для решения которой применим методы типа Рунге-Кутты, записанные в следующем виде

$$y_{n,i} = y_n + \sum_{j=1}^{i} \beta_{i+1,j} k_j, \quad 1 \le i \le m-1, \quad y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_{mi} k_i, \tag{4}$$

где $k_i=hf(y_{n,i-1})$, $1\le i\le m$, $y_{n,0}= y_n$, а $y_{n,\mathrm{i}}$ определяются из формул (2). Все полученные ниже результаты можно использовать для неавтономных задач, если в (2) положить

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}, \quad 2 \le i \le m, \quad \alpha_1 = 0. \tag{5}$$

В дальнейшем потребуется матрица B_m с элементами b_{ij} вида [2]

$$
\begin{aligned}
&b_{1i} = 1,\ 1 \le i \le m, \quad b_{ki} = 0,\ 2 \le k \le m,\ 1 \le i \le k-1, \\
&b_{ki} = \sum_{j=k-1}^{i-1} \beta_{ij} b_{k-1,j},\ 2 \le k \le m,\ k \le i \le m,
\end{aligned} \tag{6}
$$

где β_{ij} – коэффициенты схемы (2) или (4).

Далее исследуем устойчивость на линейном скалярном уравнении Дальквиста

$$
y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0, \quad t \ge 0, \tag{7}
$$

с комплексным λ, $Re(\lambda)<0$. Применяя вторую формулу (4) к (7), получим

$$
y_{n+1} = Q_m(z) y_n,\ z = h\lambda,\ Q_m(z) = 1 + \sum_{i=1}^{m} c_{mi} z^i,\ c_{mi} = \sum_{j=i}^{m} b_{ij} p_{mj},\ 1 \le i \le m. \tag{8}
$$

Обозначая $C_m=(c_{m1}, \ldots, c_{mm})^{\mathrm{T}}$ и $P_m=(p_{m1}, \ldots, p_{mm})^{\mathrm{T}}$, последнее соотношение (8) можно переписать в виде

$$
B_m P_m = C_m, \tag{9}
$$

где элементы матрицы B_m определены соотношениями (6). Для промежуточных численных схем (4) имеем

$$
y_{n,k} = Q_k(z) y_n,\ Q_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^{k} c_{ki} z^i,\ c_{ki} = \sum_{j=i}^{k} b_{ij} \beta_{k+1,j},\ 1 \le k \le m-1. \tag{10}
$$

Используя обозначения $\beta_{\mathrm{k}}=(\beta_{k+1,1}, \ldots, \beta_{k+1,k})^{\mathrm{T}}$ и $c_k=(c_{k1}, \ldots, c_{kk})^{\mathrm{T}}$ получим, что коэффициенты β_{ij} промежуточных схем (4) и коэффициенты соответствующих многочленов устойчивости связаны соотношениями

$$
B_k \beta_k = c_k, \quad 1 \le k \le m-1. \tag{11}
$$

Заметим, что из сравнения (6) и (10) следует, что $b_{ki} = c_{i-1,k-1}$, то есть элементы $(k+1)$-го столбца матрицы B_m совпадают с коэффициентами многочлена устойчивости $Q_k(z)$. Таким образом, если заданы коэффициенты многочленов устойчивости основной и промежуточной численных схем, то коэффициенты методов (4) однозначно определяются из линейных систем (9) и (11) с верхними треугольными матрицами B_i, $1 \le i \le m$. Ниже этот факт будет использоваться при определении коэффициентов численных формул (4) при условии, что области устойчивости промежуточных численных схем согласованы с основной.

Разлагая точное и приближенное решения в ряды Тейлора по степеням h, можно записать

$$
\begin{aligned}
&y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + \frac{h^2}{2} f'f + O(h^3),\\
&y_{n+1} = y_n + (\sum_{j=1}^{m} b_{1j} p_{mj}) hf + (\sum_{j=2}^{m} b_{2j} p_{mj}) h^2 f'_n f_n + O(h^3),
\end{aligned}
\tag{12}
$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном $y(t_n)$ и приближенном y_n решениях, соответственно. Из сравнения соотношений (12) в предположении, что $y(t_n) = y_n$, получаем, что численная формула (4) будет иметь первый порядок точности, если $\sum_{j=1}^{m} b_{1j} p_{mj} = 1$. Отсюда следует, что для построения m-стадийных методов первого порядка точности в линейной системе (9) следует положить $c_{m1}=1$.

Согласование областей устойчивости

Будем полагать, что заданы коэффициенты многочленов устойчивости

$$
Q_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^{k} c_{ki} z^i, \quad 1 \le k \le m. \tag{13}
$$

Описанным в [3] способом выберем коэффициенты многочлена таким образом, чтобы область устойчивости растянулась вдоль мнимой оси и стала односвязной. Это обеспечит лучшие свойства устойчивости метода к ошибкам округления при несущественном сокращении длины интервала устойчивости.

Для каждого k, $1 \le k \le m$, обозначим через γ_k длину такого максимального интервала $[\gamma_k,0]$, что для всех $z \in [\gamma_k,0]$ имеет место неравенство $|Q_k(z)| \le 1$. Учитывая, что $z=h\lambda$, в (13) для каждого $Q_k(z)$, $1 \le k \le m$ проведем замену h на $(h\gamma_k/\gamma_m)$. В результате вместо (13) получим

$$Q'_k(z) = 1 + \sum_{i=1}^{k} c'_{ki} z^i, \quad c'_{ki} = (\gamma_k / \gamma_m)^i c_{ki}, \quad 1 \le k \le m. \tag{14}$$

Замена h на $(h\gamma_k/\gamma_m)$ означает, что приближенное решение по промежуточным схемам (4) вместо точек $(t_n+c_{k1}h)$ $1\le k\le m$-1, будет вычисляться в точках $(t_n+c'_{k1}h)$ $1\le k\le m$-1.

Определение коэффициентов методов (4) будем осуществлять по следующему алгоритму. С использованием [1] вычислим коэффициенты полиномов (13), удовлетворяющие некоторым заданным свойствам. Затем вычислим коэффициенты многочленов (14) с применением соответствующей замены переменных. Учитывая, что элементы $(k$+1)-го столбца матрицы B_m совпадают с коэффициентами многочлена устойчивости $Q'_k(z)$, сформируем матрицу B_m, которая имеет вид

$$B_m = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & c'_{11} & c'_{21} & \dots & c'_{m-1,1} \\ 0 & 0 & c'_{22} & \dots & c'_{m-1,2} \\ & & \dots & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c'_{m-1,m-1} \end{pmatrix}, \tag{15}$$

Используя в (11) вектор $c'_k=(c'_{k1}, \dots, c'_{kk})^{\mathrm{T}}$ вместо c_k, все коэффициенты методов (4) с согласованными областями устойчивости однозначно определяются из линейных систем (9) и (11).

Контроль точности и устойчивости вычислений

В [3] описан алгоритм построения многочленов с заданными свойствами на промежутке $[-1,1]$, который позволяет вычислить коэффициенты многочленов устойчивости, соответствующих методам первого порядка, до степени m=27. Если параметры схемы (2) и коэффициенты полинома (13) связаны соотношениями (9) при условии c_{m1}=1, то решение (9) дает параметры m-стадийной схемы (2) первого порядка точности. При заданных β_{ij}, $2\le i\le m$, $1\le j\le i-1$, и c_{ij}, $2\le i\le m$, задача (13) имеет единственное решение в силу невырожденности матрицы B_m. При выборе β_{ij} будем использовать описанные выше соотношения.

Получим неравенства для контроля точности и устойчивости. Схемы первого порядка предполагается использовать на участке установления, где шаг ограничен устойчивостью, а не точностью. Контроль точности в этом случае носит вспомогательный характер, и для получения соответствующего неравенства будем использовать оценку локальной ошибки.

Вычислим оценку локальной ошибки $\delta_{n,1}$ для m-стадийного метода и описанным в [4] способом проведем оценку $\varepsilon_{n,1}$ данной ошибки, разлагая k_i, $1 \le k \le m$ в ряды Тейлора. В результате получим:

$$\varepsilon_{n,1} = [(0.5 - c_{m2}) / (\alpha_i - \alpha_j)](k_i - k_j),\ 1 \le i, j \le m,\ i \ne j. \qquad (16)$$

Там же с целью повышения эффективности расчетов предложено в качестве предварительной оценки будем применять величину

$$\varepsilon'_{n,1} = [(0.5 - c_{m2}) / \alpha_2](k_2 - k_1), \qquad (17)$$

А окончательное решение по точности будем принимать на основе неравенства $||\varepsilon''_{n,1}|| \le \varepsilon$, где

$$\varepsilon''_{n,1} = (0.5 - c_{m2})(hf(y_{n+1}) - k_1). \qquad (18)$$

Неравенство для контроля устойчивости m-стадийного метода (4) имеет вид $h\lambda_n^{max} \le |\gamma_m|$, где $|\gamma_m|$ есть длина интервала устойчивости m-стадийной схемы, а через λ_n^{max} обозначено максимальное собственное число матрицы Якоби задачи (3). Используем оценку максимального собственного числа λ_n^{max} матрицы Якоби $\partial f(y_n)/\partial y$ задачи (3), построенную в [4]

$$h\lambda_n^{\max} = |\alpha_2\beta_{32}|^{-1} \max_{1 \le j \le N} |[\alpha_2 k_3 + \alpha_3 k_2 - (\alpha_2 + \alpha_3)k_1]_j / [k_2 - k_1]_j|. \qquad (19)$$

Таким образом, задача о построении явных методов Рунге-Кутты первого порядка точности с заданной областью устойчивости сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений (9) с невырожденной матрицей B_m, где компоненты вектора c_m определяют размер и форму области устойчивости. Ниже с помощью построенных численных схем сформулируем алгоритм интегрирования, в котором допускаются расчеты, как по фиксированной схеме, так и с переменным числом стадий.

Алгоритм с переменным числом стадий

Пусть имеется набор m-стадийных методов, длины интервалов устойчивости которых равны $\gamma_{m,1}$, $3 \le m \le M$, $M \ge 3$. Ниже будем полагать, что при первом входе m=3. Алгоритм интегрирования с переменным числом стадий на основе методов первого порядка записывается следующим образом.

Шаг 1. Вычислить стадию k_1 по формуле (2).

Шаг 2. Вычислить стадию k_2 по формуле (2).

Шаг 3. Вычислить оценку локальной ошибки $\delta_{n,1}$ по первой формуле (17).

Шаг 4. Вычислить значение q по формуле

$$q^2 \cdot \left\| \delta_{n,1} \right\| = \varepsilon. \tag{20}$$

Шаг 5. Если $q<1$, то h положить $q \cdot h$ и перейти на шаг 2 (возврат).

Шаг 6. Вычислить стадии k_i, $3 \le i \le m$, по формулам (2).

Шаг 7. Вычислить значение $f(y_{n+1})$.

Шаг 8. Вычислить оценку локальной ошибки $\delta_{n,1}$ по второй формуле (18).

Шаг 9. Перевычислить значение q по формуле (20).

Шаг 10. Если $q<1$, то h присвоить $q \cdot h$ и перейти на шаг 2 (возврат).

Шаг 11. Вычислить приближенное решение y_{n+1} по схеме (2).

Шаг 12. Вычислить значение v_n по формуле (19).

Шаг 13. Вычислить значение r по формуле $r \cdot v_n = \gamma_{m,1}$.

Шаг 14. Вычислить прогнозируемый шаг h_{n+1} по формуле

$$h_{n+1} = \max\left\{ h_n, \min\left[q, r \right] \cdot h_n \right\}.$$

Шаг 15. Если $h_{n+1} > 2 \cdot h_n$, то положить $h_{n+1} = 2 \cdot h_n$.

Шаг 16. Если $q \cdot v_n > \gamma_{m,1}$ и $m<M$, то положить m равным $(m+1)$.

Шаг 17. Если $m>3$ и $q \cdot v_n < \gamma_{m-1,1}$, то положить m равным $(m-1)$.

Результаты расчетов

Расчеты проводились с точностью $\varepsilon=10^{-3}$ на Intel(R) Core(TM) i3-5010U CPU с двойной точностью.

Сравнение эффективности алгоритма с переменным числом стадий $M=9$ проводилось с 9-стадийным методом Рунге-Кутты первого порядка с согласованными областями устойчивости [4] с контролем точности и устойчивости.

В качестве тестового примера выбрана жесткая задача (21), представляющая собой осциллятор Ван дер Поля с коэффициентом жесткости примерно 10^6:

$$\begin{aligned} & y_1' = y_2, y_2' = \left((1-y_1^2)y_2 - y_1\right)/10^{-6} \\ & 0 \le t \le 1,\ h_0 = 10^{-3},\ y_1(0)=2,\quad y_2(0)=0, \varepsilon = 10^{-2}, \end{aligned} \tag{21}$$

Ниже через is, iw и if обозначены, соответственно, суммарное число шагов интегрирования, число повторных вычислений решения (вследствие нарушения требуемой точности расчетов) и число вычислений правой части задачи.

Алгоритмом с переменным числом стадий решение вычислено с затратами is = 15 069, iw = 182 и if = 130 324. Для 9-стадийного метода первого порядка с согласованными областями устойчивости и с контролем точности и устойчивости затраты равны is = 14 523, iw = 231 и if = 145 853.

Из сравнения результатов расчетов следует, что переключение между методами внутри алгоритма с переменным числом стадий приводит к повышению эффективности приблизительно на 10% за счет сокращения вычислений правой части на тех участках, где шаг ограничен по устойчивости. В этом случае переключение происходит по критерию устойчивости на схему с меньшим числом стадий, а значит и с меньшим числом вычислений правой части дифференциальной задачи. Дополнительно к этому согласование областей устойчивости приводит к более стабильному поведению шага интегрирования. Тенденция сохраняется при интегрировании других примеров.

Заключение

В работе явные m-стадийные методы типа Рунге-Кутты первого порядка точности, у которых области устойчивости промежуточных численных формул согласованы с областью устойчивости основной схемы. На их основе создан алгоритм с переменным числом стадий Количество стадий в алгоритма варьируется от m=3 до M=9.

Приведенные результаты расчетов показывают, что комбинирование схем с разным числом стадий внутри одного алгоритма приводит к повышению эффективности, так как при одинаковом максимальном числе стадий алгоритм, где реализована возможность снижать число стадий, на переходных участках показывает меньшие затраты, чем алгоритм, где фиксировано вычисляются все стадии. Показано, что с ростом максимально числа стадий M эффективность повышается. При этом согласование численных схем приводит к примерно 30-процентному повышению эффективности алгоритма интегрирования и обеспечивает более оправданное поведение шага на участке установления.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 17-07-01513).

Литература

1. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999. – 685 с.
2. Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем. – Новосибирск: Наука, 1997. – 195 с.

3. Новиков Е.А., Рыбков М.В. Численный алгоритм построения многочленов устойчивости методов первого порядка // Вестник Бурятского государственного университета. – 2014. – № 9-2. – С. 80–85.
4. Rybkov M.V., Novikov A.E.,Knaub L.V., Litvinov P.S., Solving Problems of Moderate Stiffness Using Methods of the First Order with Conformed Stability Domains // Университетский научный журнал. – 2016. – №22. – С. 49–58.

Сведения об авторах

Рыбков Михаил Викторович
Сибирский федеральный университет
Рабочий адрес: 660074, Красноярск, ул. Киренского, 26а, ауд. 514
Ученая степень, звание: –
Должность: старший преподаватель
Электронная почта: mixailrybkov@yandex.ru
SPIN-код: 7559-5903

Rybkov Mikhail Viktorovich
Siberian Federal University
Postal address: 26a, Kirenskogo St., Krasnoyarsk, 660074, Russia