



дельной цепи Δ совпадают, поэтому способ вычисления стационарного распределения цепи Δ является также и одним из способов определения стационарного распределения сети N . Преимуществом этого способа является возможность его применения для вычисления стационарного распределения достаточно широкого класса сетей обслуживания, а недостатком — необходимость выполнения большого объема вычислений даже для сетей обслуживания средней размерности. Для сетей обслуживания, обладающих свойством локального равновесия, к которым относится сеть N , эффективным в отношении объема вычислений является способ вычисления стационарного распределения с использованием мультипликативной формы стационарного распределения. При решении практических задач анализа сетей обслуживания не всегда требуется определение стационарного распределения. Поэтому в статье предложен также способ вычисления стационарных характеристик сети N с использованием рекурсивного метода анализа сетей обслуживания.

Библиографический список

1. Kelly F.P. Reversibility and stochastic networks. London: Wiley, 1979. 230 p.
2. Уолренд Дж. Введение в теорию сетей массового обслуживания. М.: Мир, 1993. 335 с.
3. Митрофанов Ю.И. Анализ сетей массового обслуживания. Саратов: Научная книга, 2005. 177 с.
4. Henderson W., Pearce C.E.M., Taylor P.G., Dijk N.M. Closed queueing networks with batch services // Queueing Systems. 1990. Vol. 6. P. 59–70.
5. Henderson W., Taylor P.G. Product form in networks of queues with batch arrivals and batch services // Queueing Systems. 1990. Vol. 6. P. 71–88.
6. Boucherie R. J., Dijk N. M. Product forms for queueing networks with state-dependent multiple job transitions // Advances in Applied Probability. 1991. Vol. 23, № 1. P. 152–187.
7. Serfozo R. F. Queueing networks with dependent nodes and concurrent movements // Queueing Systems. 1993. Vol. 13. P. 143–182.
8. Miyazawa M. Structure-reversibility and departure functions of queueing networks with batch movements and state dependent routing // Queueing Systems. 1997. Vol. 25. P. 45–75.
9. Woodward M. E. Towards the accurate modelling of high-speed communication networks with product-form discrete-time networks of queues // Computer Communications. 1998. Vol. 21. P. 1530–1543.
10. Гурьянов А.И., Митрофанов Ю.И. Определение параметров замкнутых линейных сетей систем массового обслуживания // Системное моделирование. Новосибирск, 1970. Вып. 1. С. 39–49.

УДК 519.622

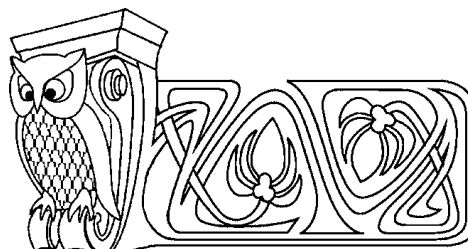
АЛГОРИТМ ПЕРЕМЕННОГО ПОРЯДКА И ШАГА НА ОСНОВЕ ЯВНОГО ТРЕХСТАДИЙНОГО МЕТОДА ТИПА РУНГЕ – КУТТА

Е. А. Новиков

Институт вычислительного моделирования СО РАН,
Красноярск,
отдел вычислительной математики
E-mail: novikov@icm.krasn.ru

Получено неравенство для контроля устойчивости трехстадийного метода Рунге – Кутта третьего порядка точности. Построен метод первого порядка с расширенной областью устойчивости. Сформулирован алгоритм интегрирования переменного порядка. Приведены результаты расчетов жестких задач, подтверждающие повышение эффективности алгоритма с переменным порядком по сравнению с расчетами по фиксированной схеме.

Ключевые слова: жесткие задачи, явный метод, контроль точности и устойчивости, переменный порядок.



Variable Order and Step Algorithm Based on a Stages of Runge – Kutta Method of Third Order of Accuracy

E. A. Novikov

Institute of Computational Modeling SB RAS, Krasnoyarsk,
Department of Calculus Mathematics
E-mail: novikov@icm.krasn.ru

An inequality for the stability control of 3-stage Runge – Kutta method of 3th order of accuracy is obtained. Method of first order with expanded stability domain is constructed. Algorithm of variable order is formulated. The results of stiff system computations are provided, which confirm an increase in efficiency for the variable order method as compared to a calculation with fixed scheme.

Key words: stiff problems, explicit method, stability and accuracy control, variable order.



ВВЕДЕНИЕ

При решении задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности в ряде случаев возникает необходимость применения алгоритмов на основе явных методов. Алгоритмы интегрирования на основе неявных или полуявных формул, как правило, используют обращение (декомпозицию с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице) матрицы Якоби, что в данном случае есть отдельная трудоемкая задача. Затраты на декомпозицию порядка N^3 арифметических операций, где N есть размерность исходной системы. Кроме того, получение элементов матрицы Якоби и составление подпрограммы ее нахождения требуют от вычислителя больших затрат личного времени. В такой ситуации предпочтительнее применять алгоритмы на основе явных формул, если жесткость задачи позволяет за разумное время получить приближенное решение.

Современные алгоритмы на основе явных методов в большинстве своем не приспособлены для решения жестких задач по следующей причине. Обычно алгоритм управления шагом интегрирования строится на контроле точности численной схемы. Это естественно, потому что основным критерием является точность нахождения решения. Однако при применении алгоритмов интегрирования на основе явных формул для решения жестких задач этот подход приводит к потере эффективности и надежности, потому что на участке установления вследствие противоречивости требований точности и устойчивости шаг интегрирования раскачивается. В лучшем случае это приводит к большому количеству возвратов (повторных вычислений решения), а шаг выбирается значительно меньше допустимого. Этого можно избежать, если наряду с точностью контролировать и устойчивость численной схемы.

В настоящее время можно выделить два подхода к контролю устойчивости [1, 2]. Первый связан с оценкой максимального собственного числа матрицы Якоби f_y через ее норму с последующим контролем (наряду с точностью) неравенства $\|hf_y\| \leq D$ [1], где положительная постоянная D зависит от размера области устойчивости. Ясно, что для явных методов, где матрица Якоби не участвует в вычислительном процессе, это приводит дополнительно к ее нахождению и, следовательно, к значительному увеличению вычислительных затрат. Второй подход основан на оценке максимального собственного числа λ_{\max} матрицы Якоби степенным методом через приращения правой части системы дифференциальных уравнений с последующим контролем неравенства $|h\lambda_{\max}| \leq D$ [2]. Во всех рассмотренных ситуациях такая оценка фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат [3].

Целью данной работы является разработка алгоритма интегрирования переменного порядка и шага на основе трехстадийной схемы типа Рунге – Кутта.

1. МЕТОД ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

Для численного решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

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

рассмотрим явный трехстадийный метод типа Рунге – Кутта вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ k_1 &= hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + \beta_{21} k_1), \quad k_3 = hf(y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2), \end{aligned} \quad (2)$$

где y и f — вещественные N -мерные вектор-функции, t — независимая переменная, h — шаг интегрирования, k_1 , k_2 и k_3 — стадии метода, $p_1, p_2, p_3, \beta_{21}, \beta_{31}, \beta_{32}$ — числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (2). В случае неавтономной системы

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

схема (2) записывается в следующем виде:

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3,$$



$$k_1 = hf(t_n, y_n), \quad k_2 = hf(t_n + \beta_{21}h, y_n + \beta_{21}k_1), \quad k_3 = hf(t_n + [\beta_{31} + \beta_{32}]h, y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2).$$

Ниже для сокращения выкладок будем рассматривать задачу (1). Однако построенные методы можно применять для решения неавтономных задач. Получим соотношения на коэффициенты метода (2) третьего порядка точности. Для этого разложим стадии k_1, k_2 и k_3 в ряды Тейлора до членов с h^4 включительно, т.е.

$$k_1 = hf_n, \quad k_2 = hf_n + \beta_{21}h^2 f'_n f_n + \frac{1}{2}\beta_{21}^2 h^3 f''_n f_n^2 + \frac{1}{6}\beta_{21}^3 h^4 f'''_n f_n^3 + O(h^5),$$

$$k_3 = hf_n + (\beta_{31} + \beta_{32})h^2 f'_n f_n + \beta_{21}\beta_{32}h^3 f''_n f_n^2 + \frac{1}{2}(\beta_{31} + \beta_{32})^2 h^3 f''_n f_n^2 + 0.5\beta_{21}^2\beta_{32}h^4 f'_n f''_n f_n^2 +$$

$$+ \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}h^4 f''_n f'_n f_n^2 + \frac{1}{6}(\beta_{31} + \beta_{32})h^4 f'''_n f_n^3 + O(h^5).$$

Подставим полученные разложения в первую формулу (2). В результате получим

$$y_{n+1} = y_n + (p_1 + p_2 + p_3)hf_n + [\beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3]h^2 f'_n f_n + h^3[\beta_{21}\beta_{32}p_3 f''_n f_n^2 + 0.5(\beta_{21}^2 p_2 +$$

$$+ (\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3) f''_n f_n^2] + h^4[0.5\beta_{21}^2\beta_{32}p_3 f'_n f''_n f_n^2 + \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3 f''_n f'_n f_n^2 + \frac{1}{6}(\beta_{31} + \beta_{32})^3 p_3 f'''_n f_n^3] + O(h^5).$$

Здесь элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении $y_n, f'_n = \partial f(y_n)/\partial y, f''_n = \partial^2 f(y_n)/\partial y^2, f'''_n = \partial^3 f(y_n)/\partial y^3$. Точное решение $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + 0.5h^2 f' f + \frac{h^3}{6}[f'^2 f + f'' f^2] + \frac{h^4}{24}[f'^3 f + f' f'' f^2 + 3f'' f' f^2 + f''' f^3] + O(h^4),$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$. Сравнивая полученные ряды для точного и приближенного решений до членов с h^3 включительно при условии $y_n = y(t_n)$, запишем условия третьего порядка точности схемы (2), которые имеют вид

$$p_1 + p_2 + p_3 = 1, \quad \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 = \frac{1}{2}, \quad \beta_{21}^2 p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3 = \frac{1}{3}, \quad \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6}. \quad (3)$$

Локальную ошибку δ_n численной формулы (2) можно вычислить по формуле $\delta_n = y(t_{n+1}) - y_{n+1}$. Учитывая представления $y(t_{n+1})$ и y_{n+1} в виде рядов Тейлора, получим

$$\delta_n = h^4 \left\{ \frac{1}{24} f'^3 f + \left[\frac{1}{24} - \frac{1}{2}\beta_{21}^2\beta_{32}p_3 \right] f' f'' f^2 + \left[\frac{1}{8} - \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3 \right] f'' f' f^2 + \right.$$

$$\left. + \left[\frac{1}{24} - \frac{1}{6}\beta_{21}^3 p_2 - \frac{1}{6}(\beta_{31} + \beta_{32})^3 p_3 \right] f''' f^3 \right\} + O(h^5). \quad (4)$$

В нелинейной системе алгебраических уравнений (3) присутствуют два свободных коэффициента. Исследуем три варианта.

Вариант 1. Положим $\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ и $\beta_{31} = \beta_{32}$. Это означает, что приращения k_2 и k_3 будут вычислены в одной и той же точке $t_n + \beta_{21}h$, причем вклад k_1 и k_2 при определении k_3 учитывается одинаково. Тогда нелинейную систему (3) можно переписать в виде

$$1) p_1 + p_2 + p_3 = 1, \quad 2) \beta_{21}(p_2 + p_3) = \frac{1}{2}, \quad 3) \beta_{21}^2(p_2 + p_3) = \frac{1}{3}, \quad 4) \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6}.$$

Из второго и третьего уравнений имеем $\beta_{21} = 2/3$. Из соотношений $\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ и $\beta_{31} = \beta_{32}$ запишем $\beta_{31} = \beta_{32} = 1/3$. Из четвертого уравнения системы получим $p_3 = 3/4$. Из равенства $p_2 + p_3 = 3/4$ имеем $p_2 = 0$. Наконец, из первого соотношения системы получим $p_1 = 1/4$. В результате коэффициенты схемы (2) определяются однозначно и имеют вид

$$\beta_{21} = \frac{2}{3}, \quad \beta_{31} = \beta_{32} = \frac{1}{3}, \quad p_1 = \frac{1}{4}, \quad p_2 = 0, \quad p_3 = \frac{3}{4}. \quad (5)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_n схемы (2) можно записать следующим образом:

$$\delta_n = \frac{1}{24} h^4 f'^3 f + \frac{1}{216} h^4 f''' f^3 - \frac{1}{72} h^4 f' f'' f^2 + \frac{1}{72} h^4 f'' f' f^2 + O(h^5).$$



Вариант 2. Минимизируем локальную ошибку (4). Для этого, учитывая вид (4), вместо (3) рассмотрим следующую расширенную нелинейную систему:

$$\begin{aligned} 1) p_1 + p_2 + p_3 = 1, \quad 2) \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 = \frac{1}{2}, \quad 3) \beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2p_3 = \frac{1}{3}, \\ 4) \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6}, \quad 5) \beta_{21}^2\beta_{32}p_3 = \frac{1}{12}, \quad 6) \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3 = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (6)$$

При $1.5\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ два последних уравнения (6) совпадают. Из четвертого и пятого соотношений (6) имеем $\beta_{21} = 0.5$. Из второго и третьего равенств получим $p_2 = 1/3$ и $p_3 = 4/9$. Из первого уравнения (6) запишем $p_1 = 2/9$, а из четвертого имеем $\beta_{32} = 3/4$. Наконец, из соотношения $\beta_{31} + \beta_{32} = 3/4$ запишем $\beta_{31} = 0$. В результате коэффициенты метода (2) с минимальной локальной ошибкой можно записать в виде

$$\beta_{21} = \frac{1}{2}, \quad \beta_{31} = 0, \quad \beta_{32} = \frac{3}{4}, \quad p_1 = \frac{2}{9}, \quad p_2 = \frac{1}{3}, \quad p_3 = \frac{4}{9}. \quad (7)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_n схемы (2) можно записать следующим образом:

$$\delta_n = \frac{h^4}{24}f'^3f - \frac{h^4}{288}f'''f^3 + O(h^5).$$

При использовании (2) с наборами коэффициентов (5) и (7) ни одна стадия не вычисляется в точке t_{n+1} . При быстром изменении решения это может приводить к понижению точности расчетов.

Вариант 3. Положим $\beta_{21} = 0.5$ и $\beta_{31} + \beta_{32} = 1$. Тогда на каждом шаге приращения k_1 , k_2 и k_3 вычисляются в точках t_n , $t_n + h/2$ и $t_n + h$ соответственно. В этом случае условия третьего порядка записываются в виде

$$1) p_1 + p_2 + p_3 = 1, \quad 2) \frac{1}{2}p_2 + p_3 = \frac{1}{2}, \quad 3) \frac{1}{4}p_2 + p_3 = \frac{1}{3}, \quad 4) \beta_{32}p_3 = \frac{1}{3}.$$

Из второго и третьего уравнения данной системы имеем $p_2 = 2/3$ и $p_3 = 1/6$. Из первого и последнего уравнений имеем $p_1 = 1/6$ и $\beta_{32} = 2$. Из равенства $\beta_{31} + \beta_{32} = 1$ следует $\beta_{31} = -1$. В результате коэффициенты метода (2) можно записать в следующем виде:

$$\beta_{21} = \frac{1}{2}, \quad \beta_{31} = -1, \quad \beta_{32} = 2, \quad p_1 = \frac{1}{6}, \quad p_2 = \frac{2}{3}, \quad p_3 = \frac{1}{6}. \quad (8)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_n схемы (2) можно записать следующим образом:

$$\delta_n = \frac{h^4}{24} \left[f'^3f - f''f'f^2 - \frac{1}{3}f'''f^3 \right] + O(h^5).$$

2. КОНТРОЛЬ ТОЧНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Неравенство для контроля точности вычислений метода третьего порядка построим с использованием идеи вложенных методов. Для этого рассмотрим вспомогательную схему

$$y_{n+1,1} = y_n + r_1k_1 + r_2k_2,$$

где k_1 и k_2 определены в (2). Потребуем, чтобы данный метод имел второй порядок точности. Разложение приближенного решения $y_{n+1,1}$ в виде ряда Тейлора по степеням h до членов с h^2 включительно имеет вид

$$y_{n+1,1} = y_n + (r_1 + r_2)hf_n + \beta_{21}r_2h^2f'_nf_n + O(h^3).$$

Сравнивая ряды для $y(t_{n+1})$ и $y_{n+1,1}$, видим, что данное требование будет выполнено, если $r_1 + r_2 = 1$, $\beta_{21}r_2 = 0.5$. Отсюда получим $r_2 = 0.5\beta_{21}$, $r_1 = 1 - r_2$, где значение β_{21} определено в (5), (7) или (8).

С помощью идеи вложенных методов оценку ошибки $\varepsilon_{n,3}$ метода третьего порядка можно оценить по формуле $\varepsilon_{n,3} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = (p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3k_3$ [3]. Тогда неравенство для контроля точности вычислений имеет вид

$$\|(p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3k_3\| \leq \varepsilon,$$

где $\|\cdot\|$ — некоторая норма в R^N , ε — требуемая точность интегрирования. В конкретных расчетах применялся метод (2) с коэффициентами (8), как наиболее надежный. Тогда неравенство для контроля точности имеет вид

$$\frac{1}{6}\|k_1 - 2k_2 + k_3\| \leq \varepsilon.$$



3. КОНТРОЛЬ УСТОЙЧИВОСТИ ЧИСЛЕННОЙ СХЕМЫ

Неравенство для контроля устойчивости численной формулы (2) построим предложенным в [3] способом. Запишем стадии k_1 , k_2 и k_3 применительно к задаче $y' = Ay$, где A есть матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим

$$k_1 = Xy_n, \quad k_2 = (X + \beta_{21}X^2)y_n, \quad k_3 = [X + (\beta_{31} + \beta_{32})X^2 + \beta_{21}\beta_{32}X^3]y_n,$$

где $X = hA$. Найдем коэффициенты d_1 , d_2 и d_3 из условия выполнения равенства

$$d_1k_1 + d_2k_2 + d_3k_3 = X^3y_n.$$

Легко видеть, что данное требование выполняется при следующих значениях:

$$d_1 = \frac{\beta_{31} + \beta_{32} - \beta_{21}}{\beta_{21}^2\beta_{32}}, \quad d_2 = -\frac{\beta_{31} + \beta_{32}}{\beta_{21}^2\beta_{32}}, \quad d_3 = \frac{1}{\beta_{21}\beta_{32}}.$$

Нетрудно видеть также, что

$$\frac{1}{\beta_{21}}(k_2 - k_1) = X^2y_n.$$

Тогда согласно [3] оценку максимального собственного числа $v_{n,3} = h\lambda_{n \max}$ матрицы Якоби системы (1) можно вычислить по формуле

$$v_{n,3} = \beta_{21} \max_{1 \leq i \leq N} (|d_1k_1^i + d_2k_2^i + d_3k_3^i|/|k_2^i - k_1^i|). \quad (9)$$

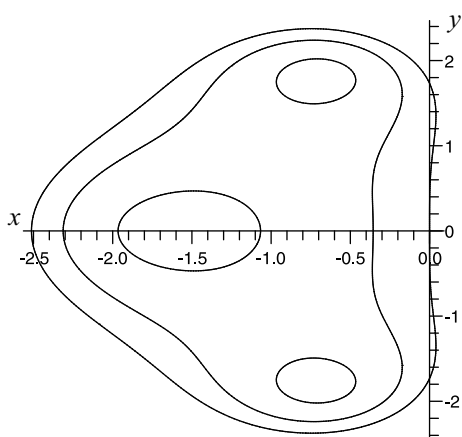


Рис. 1. Область устойчивости метода третьего порядка точности

зададим формулой $h^{st} = q_2h_n$, где q_2 , учитывая равенство $v_{n,3} = O(h_n)$, определяется из уравнения $q_2v_{n,3} = 2.5$. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется по следующей формуле:

$$h_{n+1} = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})]. \quad (10)$$

где h_n есть последний успешный шаг интегрирования. Отметим, что формула (10) применяется для прогноза величины шага интегрирования h_{n+1} после успешного вычисления решения с предыдущим шагом h_n , и поэтому фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат.

Если шаг по устойчивости меньше последнего успешного, то он уменьшен не будет, потому что причиной этого может быть грубость оценки максимального собственного числа. Однако шаг не будет и увеличен, потому что не исключена возможность неустойчивости численной схемы. Если шаг по устойчивости должен быть уменьшен, то в качестве следующего шага будет применяться последний успешный шаг h_n . В результате для выбора шага и предлагается формула (10). Данная формула позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Собственно говоря, именно наличие данного участка существенно ограничивает возможности применения явных методов для решения жестких задач.



4. МЕТОД ПЕРВОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

Для численного решения задачи (1) рассмотрим схему вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + r_1 k_1 + r_2 k_2 + r_3 k_3, \\ k_1 &= hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + \beta_{21} k_1), \quad k_3 = hf(y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2), \end{aligned} \quad (11)$$

где коэффициенты β_{21} , β_{31} и β_{32} заданы при описании метода третьего порядка точности, а r_1 , r_2 и r_3 подлежат определению. Построим менее точную схему с максимальным интервалом устойчивости. Для этого применим (11) для решения скалярного тестового уравнения $y' = \lambda y$, $Re(\lambda) < 0$, где λ интерпретируется как некоторое собственное число матрицы Якоби задачи (1). Получим $y_{n+1} = Q(x)y_n$, где функция устойчивости $Q(x)$ имеет вид

$$Q(x) = 1 + (r_1 + r_2 + r_3)x + [\beta_{21}r_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})r_3]x^2 + \beta_{21}\beta_{32}r_3x^3, \quad x = h\lambda.$$

Требование первого порядка точности приводит к соотношению $r_1 + r_2 + r_3 = 1$, которое будем считать выполненным. Теперь выберем r_2 и r_3 таким образом, чтобы метод (11) имел максимальный интервал устойчивости. Для этого рассмотрим многочлен Чебышева $T_3(z) = (4z^3 - 3z)$ на промежутке $[-1, 1]$. Проведем замену переменных, полагая $z = 1 - 2x/\gamma$. Получим $T_3(x) = 1 - 18x/\gamma + 48x^2/\gamma^2 - 32x^3/\gamma^3$, при этом отрезок $[\gamma, 0]$ отображается на отрезок $[-1, 1]$. Нетрудно показать, что среди всех многочленов вида $P_3(x) = 1 + x + c_2x^2 + c_3x^3$ для $T_3(x)$ неравенство $|T_3(x)| \leq 1$ выполняется на максимальном интервале $[\gamma, 0]$, $\gamma = -18$ [3]. Потребуем совпадения коэффициентов $Q(x)$ и $T_3(x)$ при $\gamma = -18$. Это приводит к соотношениям $r_1 + r_2 + r_3 = 1$, $\beta_{21}r_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})r_3 = 4/27$, $\beta_{21}\beta_{32}r_3 = 4/729$. В результате имеем коэффициенты

$$r_3 = \frac{4}{729\beta_{21}\beta_{32}}, \quad r_2 = \frac{4/27 - (\beta_{31} + \beta_{32})r_3}{\beta_{21}}, \quad r_1 = 1 - r_2 - r_3$$

метода первого порядка точности с максимальным интервалом устойчивости, локальная ошибка $\delta_{n,1}$ которого имеет вид $\delta_{n,1} = \frac{19}{54}h^2 f' f + O(h^3)$. Для контроля точности численной формулы первого порядка будем использовать оценку локальной ошибки. Учитывая, что $k_2 - k_1 = \beta_{21}h^2 f'_n f_n + O(h^3)$ и вид локальной ошибки, неравенство для контроля точности записывается в виде

$$\frac{19}{54|\beta_{21}|} \|k_2 - k_1\| \leq \varepsilon,$$

где $\|\cdot\|$ — некоторая норма в R^N , ε — требуемая точность расчетов.

Построим неравенство для контроля устойчивости метода первого порядка. Область устойчивости метода первого порядка приведена на рис. 2.

Интервал устойчивости численной схемы (11) первого порядка точности равен 18 [3]. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $v_{n,3} \leq 18$, где $v_{n,3}$ определяется по формуле (9).

5. АЛГОРИТМ ПЕРЕМЕННОГО ПОРЯДКА И ШАГА

На основе построенных методов первого и третьего порядков точности легко сформулировать алгоритм переменного порядка и шага. Сначала для расчетов используют метод третьего порядка как дающий более точные результаты. Переход на схему первого порядка осуществляется при нарушении неравенства $v_{n,3} \leq 2.5$. Обратный переход на метод третьего порядка происходит в случае выполнения неравенства $v_{n,3} \leq 2.5$. При расчетах по методу первого порядка наряду с точностью контролируется устойчивость, а выбор прогнозируемого шага производится по аналогии с методом третьего порядка точности по формуле (10).

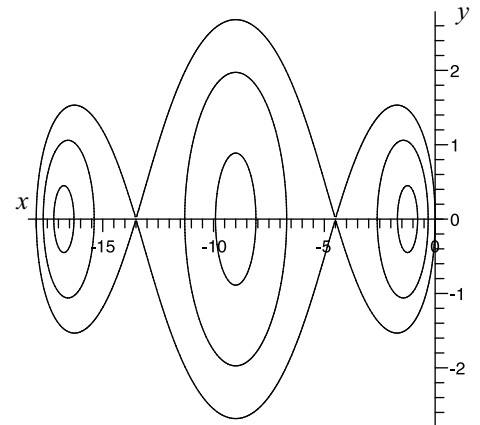


Рис. 2. Область устойчивости метода первого порядка точности



Построенный алгоритм интегрирования будем называть RKЗРР(Ас,St). При значениях параметра Ас, равном 1 или 3, расчеты проводятся соответственно методом первого или третьего порядка точности, при Ас =0 используют расчеты с переменным порядком. Если St = 0, то устойчивость контролируется, при St=1 — не контролируется. При расчетах с переменным порядком устойчивость всегда контролируется.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Расчеты проводились на Intel(R) Core(TM)2 Quad CPU с двойной точностью. В конкретных расчетах левая часть неравенства для контроля точности вычисляется по формуле

$$\|\delta_n\| = \max_{1 \leq i \leq N} \frac{|\delta_n^i|}{|y_n^i| + r},$$

где i — номер компоненты, r — положительный параметр. Если по i -й компоненте решения выполняется неравенство $|y_n^i| < r$, то контролируется абсолютная ошибка $r\varepsilon$, в противном случае — относительная ошибка ε . В расчетах параметр r выбирался таким образом, чтобы по всем компонентам решения фактическая точность соответствовала задаваемой. Значение ε полагалось равным 10^{-3} . При такой точности наиболее эффективны методы третьего порядка.

Сравнение эффективности алгоритма переменного порядка и шага RKЗРР(0,0) проводилось с трехстадийным методом Рунге – Кутты третьего порядка точности с контролем (алгоритм RKЗРР(3,0)) и без контроля (алгоритм RKЗРР(3,1)) устойчивости. Далее через isa , iwo и ifu обозначены соответственно суммарное число шагов интегрирования, число повторных вычислений решения (возвратов) вследствие нарушения требуемой точности расчетов и число вычислений правой части задачи (1).

Пример 1 [4].

$$\begin{aligned} y_1' &= -0.04y_1 + 0.01y_2y_3, & y_2' &= 400y_1 - 100y_2y_3 - 3000y_2^2, & y_3' &= 30y_2^2, \\ t &\in [0, 40], & y_1(0) &= 1, & y_2(0) &= y_3(0) = 0, & h_0 &= 10^{-5}. \end{aligned} \quad (12)$$

Алгоритмом переменного порядка и шага RKЗРР(0,0) решение задачи (12) удалось вычислить с затратами $isa = 6\ 889$, $iwo = 124$, $ifu = 20\ 792$. Для метода третьего порядка RKЗРР(3,1) без контроля устойчивости затраты равны $isa = 44\ 441$, $iwo = 11\ 758$, $ifu = 156\ 839$, а для алгоритма RKЗРР(3,0) с контролем устойчивости — $isa = 44\ 951$, $iwo = 655$, $ifu = 136\ 163$.

Пример 2 [4].

$$\begin{aligned} y_1' &= y_3 - 100y_1y_2, & y_2' &= y_3 + 2y_4 - 100y_1y_2 - 20000y_2^2, & y_3' &= -y_3 + 100y_1y_2, \\ t &\in [0, 20], & y_1(0) &= 0, & y_2(0) &= y_3(0) = 0, & h_0 &= 2.5 \cdot 10^{-5}. \end{aligned} \quad (13)$$

Алгоритмом RKЗРР(0,0) решение задачи (13) вычислено с затратами $isa = 366$, $iwo = 6$, $ifu = 1\ 105$. Для метода третьего порядка RKЗРР(3,1) без контроля устойчивости затраты равны $isa = 2\ 240$, $iwo = 555$, $ifu = 7\ 830$, а для алгоритма RKЗРР(3,0) с контролем устойчивости — $isa = 1\ 032$, $iwo = 20$, $ifu = 3\ 136$.

Пример 3 [4].

$$\begin{aligned} y_1' &= -0.013y_1 - 1000y_2y_3, & y_2' &= -2500y_2y_3, & y_3' &= -0.013y_1 - 1000y_1y_3 - 2500y_2y_3, \\ t &\in [0, 50], & y_1(0) &= 0, & y_2(0) &= y_3(0) = 0, & h_0 &= 2.9 \cdot 10^{-5}. \end{aligned} \quad (14)$$

Алгоритмом RKЗРР(0,0) решение задачи (14) вычислено с затратами $isa = 12\ 689$, $iwo = 106$, $ifu = 38\ 173$. Для метода третьего порядка RKЗРР(3,1) без контроля устойчивости затраты равны $isa = 74\ 281$, $iwo = 19\ 555$, $ifu = 261\ 953$, а для алгоритма RKЗРР(3,0) с контролем устойчивости — $isa = 61\ 047$, $iwo = 1\ 686$, $ifu = 186\ 513$.



Пример 4 [4].

$$y_1' = 77.27(y_2 - y_1 y_2 + y_1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1^2), \quad y_2' = (-y_2 - y_1 y_2 + y_3)/77.27, \quad y_3' = 0.161(y_1 - y_3), \quad (15)$$

$$t \in [0, 300], \quad y_1(0) = 4, \quad y_2(0) = 1.1, \quad y_3(0) = 4, \quad h_0 = 10^{-3}.$$

Задача (15) является простейшей математической моделью с периодическим решением для описания реакции Белоусова – Жаботинского (орегонатор). Она является «слишком» жесткой для явных методов. Тем не менее пример (15) приведен здесь с целью подчеркнуть преимущество методов с контролем устойчивости, а также алгоритма переменного порядка и шага.

Алгоритмом RKЗРР(0,0) решение задачи (15) вычислено с затратами $isa = 438\,941$, $iwo = 965$, $ifu = 1\,317\,819$. Для метода третьего порядка RKЗРР(3,1) без контроля устойчивости затраты $isa = 2\,904\,014$, $iwo = 768\,860$, $ifu = 10\,249\,762$, а для алгоритма RKЗРР(3,0) с контролем устойчивости — $isa = 2\,871\,743$, $iwo = 11\,653$, $ifu = 8\,638\,535$.

Из сравнения результатов расчетов жестких задач следует, что контроль устойчивости всегда приводит к повышению эффективности. Это является следствием устранения некоторых возвратов (повторных вычислений решения), возникающих из-за неустойчивости численной формулы. В конце интервала интегрирования фактическая точность вычислений для всех алгоритмов лучше задаваемой. Такая же тенденция сохраняется при интегрировании всех рассмотренных задач [4–5].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, потому что оценка максимального собственного числа матрицы Якоби системы (1) осуществляется через ранее вычисленные стадии и не приводит к росту числа вычислений функции f . Такая оценка получается грубой. Однако применение контроля устойчивости в качестве ограничителя на рост шага позволяет избежать негативных последствий грубости оценки. Более того, в некоторых случаях это приводит к нестандартно высокому повышению эффективности алгоритма. На участке установления за счет контроля устойчивости старые ошибки стремятся к нулю, а новые невелики за счет малости производных решения. В некоторых случаях вместо оценки максимального собственного числа оценивается следующее по порядку. Шаг интегрирования становится больше максимально допустимого и с таким шагом осуществляется интегрирование до тех пор, пока не нарушается неравенство для контроля точности. Как правило, число таких шагов невелико. Однако величина шага может на порядок превышать максимальный шаг по устойчивости. После нарушения неравенства для контроля точности шаг уменьшается до максимально возможного. Такой эффект может повторяться многократно в зависимости от длины участка установления. В результате средний шаг интегрирования может превышать максимально допустимый.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 11-01-00106 и 11-01-00224).

Библиографический список

<p>1. <i>Shampine L. M.</i> Implementation of Rosenbrock method // ACM Transaction on Mathematical Software. 1982. Vol. 8, № 5. P. 93–113.</p> <p>2. <i>Новиков Е. А., Новиков В. А.</i> Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // Докл. АН СССР. 1984. Т. 277, № 5. С. 1058–1062.</p>	<p>3. <i>Новиков Е. А.</i> Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997. 197 с.</p> <p>4. <i>Erigh W. H., Hull T. E.</i> Comparing numerical methods for the solutions of systems of ODE's // BIT. 1975. № 15. P. 10–48.</p> <p>5. <i>Хайпер Э., Ваннер Г.</i> Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1990. 685 с.</p>
--	---