

УДК 519.622

(m, k) -схемы решения дифференциально-алгебраических и жестких систем*

А.И. Левыкин^{1,4}, А.Е. Новиков², Е.А. Новиков^{2,3}

¹Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

²Сибирский федеральный университет, просп. Свободный, 79, Красноярск, 660041

³Институт вычислительного моделирования Красноярского научного центра Сибирского отделения Российской академии наук, ул. Академгородок, 50/44, Красноярск, 660036

⁴Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ), ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090

E-mails: lai@osmf.sccc.ru (Левыкин А.И.), aenovikov@bk.ru (Новиков А.Е.), novikov@icm.krasn.ru (Новиков Е.А.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 1, Vol. 13, 2020.

Левыкин А.И., Новиков А.Е., Новиков Е.А. (m, k) -схемы решения дифференциально-алгебраических и жестких систем // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2020. — Т. 23, № 1. — С. 39–51.

В статье представлена оптимальная форма записи методов типа Розенброка с точки зрения числа ненулевых параметров и вычислительных затрат на шаге. Обоснована процедура получения (m, k) -методов из общеизвестных методов типа Розенброка. Приведены формулы преобразования параметров (m, k) -схем для двух канонических форм записи и нахождения вида функции устойчивости схем. Разработан L -устойчивый $(3, 2)$ -метод третьего порядка, для которого требуются два вычисления функции, одно вычисление матрицы Якоби и одна LU -декомпозиция на шаге. На базе метода сформулирован алгоритм интегрирования переменного шага, позволяющий решать как явные, так и неявные системы ОДУ. Приведены численные результаты, подтверждающие эффективность нового алгоритма.

DOI: 10.15372/SJNM20200103

Ключевые слова: методы типа Розенброка, дифференциально-алгебраические уравнения, жесткие системы ОДУ.

Levykin A.I., Novikov A.E., Novikov E.A. (m, k) -schemes for stiff systems of ODEs and DAEs // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2020. — Vol. 23, № 1. — P. 39–51.

This paper deals with the derivation of the optimal form of the Rosenbrock-type methods in terms of the number of non-zero parameters and computational costs per step. A technique of obtaining (m, k) -methods from the well-known Rosenbrock-type methods is justified. There are given formulas for the (m, k) -schemes parameters transformation for their two canonical representations and obtaining the form of a stability function. The authors have developed L -stable $(3, 2)$ -method of order 3 which requires two evaluations of a function: one evaluation of the Jacobian matrix and one LU -decomposition per step. Moreover, in this paper there is formulated an integration algorithm of the alternating step size based on $(3, 2)$ -method. It provides the numerical solution for both explicit and implicit systems of ODEs. The numerical results confirming the efficiency of the new algorithm are given.

Keywords: Rosenbrock-type methods, differential-algebraic equations, stiff systems of ODEs.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 17-07-01513 А) и поддержке первого автора в рамках государственного задания ИВМиМГ СО РАН (проект № 0315-2019-0002).

Введение

Задача Коши для жестких явных

$$x' = f(x, t), \quad x(t_0) = x_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

и неявных систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) большой размерности

$$F(x, x', t) = 0, \quad x(t_0) = x_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (2)$$

возникает при моделировании динамических процессов в электротехнике, химической кинетике и других приложениях [1]. Здесь x , f и F — достаточно гладкие вещественные N -мерные вектор-функции, t — независимая переменная. Вместо изучения неавтономной задачи (1) мы можем рассматривать автономную задачу

$$F(x, x') = 0, \quad x(t_0) = x_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (3)$$

поскольку (2) может быть приведена к форме (3) добавлением к системе уравнения $t' = 1$. Если использовать обозначение $y = x'$, задача (3) примет вид

$$\begin{cases} x' = y, \\ 0 = F(x, y), \end{cases} \quad (4)$$

где $x(t_0) = x_0$, $y(t_0) = y_0$, $t_0 \leq t \leq t_k$. Значение y_0 может быть получено, например, методом установления. Заметим, что если матрица $F_y = \partial F / \partial y$ является вырожденной, то при выполнении некоторых дополнительных условий [1] система дифференциально-алгебраических уравнений (ДАУ) (4) имеет индекс 1.

Для современных методов решения задачи Коши обычно требуется явная форма записи системы ОДУ (1). Сведение системы (2) к виду (1) приводит к дополнительным вычислительным затратам, связанным с декомпозицией матрицы F_y , которая может быть вырожденной. Поэтому многие алгоритмы, предназначенные для решения системы (2), основаны на неявных схемах.

Задача усложняется еще и тем, что разрешенная задача является жесткой. Поэтому необходимо применять специальные методы, при реализации которых используется декомпозиция матрицы Якоби.

Данная статья посвящена безытерационным схемам типа Розенброка, в которых решение задачи (2) и вычисление приближенного решения осуществляются одновременно. Этот подход позволяет избежать двойной декомпозиции N -мерной матрицы и получить схемы с известными до начала расчетов вычислительными затратами на шаге. Исследуемые методы показывают высокую эффективность при решении явных (1) и неявных (2) жестких систем.

Схемы основаны на (m, k) -методах решения явных систем [2]. Основное отличие (m, k) -схем от известных безытерационных методов [3–7] заключается в том, что вычисление стадии не обязательно связано с вычислением функции. Данная особенность (m, k) -схем позволяет оптимально планировать вычислительные затраты на шаге и минимизировать число параметров схемы с целью упрощения исследования условий порядка схемы.

Заметим, что (m, k) -схемы позволяют решить проблему замораживания матриц (т. е. использования одной матрицы на нескольких шагах интегрирования), что невозможно для методов Розенброка, записанных в форме, приведенной в [3]. Замораживание

матрицы снижает число декомпозиций регуляризующей матрицы схемы. В статье рассматривается общая форма (m, k) -схем, алгебраическая структура их записи, приведены формулы перевычисления параметров для двух различных представлений схем: более удобного при исследовании условий согласованности и более экономичного при реализации вычислений.

Построен и исследован L -устойчивый $(3, 2)$ -метод третьего порядка. На основе этого метода сформулирован новый алгоритм интегрирования переменного шага, позволяющий вычислять не только решение, но и его первую производную. Метод предназначен для явных и неявных систем ОДУ. Приведены численные результаты, подтверждающие эффективность нового алгоритма.

1. Алгебраическая форма записи методов типа Розенброка и (m, k) -схем

Работы [3–9] посвящены различным представлениям безытерационных методов типа Розенброка решения жестких систем вида (1). В частности, в работах [3, 4] рассматриваются методы Розенброка, в [5] — ROW-методы, в [6] — W-методы. В работе [2] описаны так называемые (m, k) -методы, в которых вычисление стадии не обязательно связано с вычислением функции. Наиболее общая форма рассматриваемых схем приведена в [7]. Если эти методы применить к автономной системе, они примут вид

$$\begin{aligned}
 x_{n+1} &= x_n + \sum_{i=1}^m \mu_i b_i, \\
 D_n b_i &= h \sum_{j=1}^i \eta_{ij} f \left(x_n + \sum_{m=1}^{j-1} \beta_{jm} b_m \right) + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} b_j + hA \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} b_j, \quad 1 \leq i \leq m, \\
 D_n &= E - ahA.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Здесь координаты вектор-строки $\mu = (\mu_i)$, элементы нижнетреугольных матриц $\alpha = (\alpha_{ij})$, $\beta = (\beta_{ij})$, $\gamma = (\gamma_{ij})$, $\eta = (\eta_{ij})$ и скаляр a — параметры, определяющие свойства точности и устойчивости схемы (5); h — шаг интегрирования; матрицы: E — единичная, A — аппроксимирующая производную $f_x = \partial f(x_n)/\partial x$; b_i — стадийные приращения решения схемы.

Рассмотрим множества $M_m = \{1, 2, \dots, m\}$ и $M_k = \{m_i \in M_m \mid m_1 = 1, m_{i-1} \leq m_i, 2 \leq i \leq k, m_k \leq m\}$. Множество M_k содержит номера стадий, на которых вычисляются новые значения функции. Введем множества $J_i = \{j \in M_m \mid j+1 \in M_k, j < i\}$, $1 \leq i \leq m$, и $\bar{M}_k = M_m \setminus M_k$ — дополнение множества M_k . Используя введенные обозначения, (m, k) -схемы можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 x_{n+1} &= x_n + \sum_{i=1}^m \mu_i b_i, \\
 D_n b_i &= hf \left(x_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} b_j \right) + \theta \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} b_j + (1 - \theta) hA \sum_{j \in J_i} \gamma_{ij} b_j, \quad i \in M_k, \\
 D_n b_i &= \theta b_{i-1} + \theta \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} b_j + (1 - \theta) hA b_{i-1} + (1 - \theta) hA \sum_{j \in J_i} \gamma_{ij} b_j, \quad i \in \bar{M}_k, \\
 D_n &= E - ahA.
 \end{aligned} \tag{6}$$

Параметр θ может быть равен 0 или 1. Запись схемы при $\theta = 0$ предпочтительней для исследования свойств точности схемы, а при $\theta = 1$, как видно из (6), схема более эффективна, поскольку в этом случае число произведений матриц на векторы меньше. Заметим, что число параметров равно $mk + 1$, где m — число стадий, k — число вычислений функции на шаге.

Утверждение. Каждая схема вида (5) с помощью алгебраических преобразований стадийных приращений и уравнений на них может быть приведена к виду (6).

Доказательство. Для перехода от схемы вида (5) к соответствующей (m, k) -схеме (6) запишем (5) в матричном виде с использованием кронекерова произведения [8]:

$$x_{n+1} = x_n + (\mu \otimes E_N)b, \quad (7)$$

$$(E_m \otimes (E_N - ahA))b = h(\eta \otimes E_N)f + (\alpha \otimes E_N)b + h(\gamma \otimes A)b, \quad (8)$$

где E_m, E_N — единичные матрицы размерностей m и N соответственно; $b = (b_1^\top, \dots, b_m^\top)^\top$; $f = (f_1^\top, \dots, f_m^\top)^\top$,

$$f_i = \begin{cases} f(x_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}b_j), & i \in M_k, \\ 0, & i \in \bar{M}_k. \end{cases}$$

Рассмотрим следующие преобразования схемы (8):

П1) умножение (8) на матрицу $(S \otimes E_N)$ слева;

П2) подстановка $(Q \otimes E_N)k = b$, где $k = (k_1^\top, \dots, k_m^\top)^\top$ — вектор новых стадийных приращений.

Выбирая матрицы S и Q нижнетреугольными, получим, что при преобразовании стадийных приращений и уравнений на них используются только ранее вычисленные стадии. При выполнении условия

$$\text{diag}(SQ) = E$$

получаем снова схему вида (6), в чем легко убедиться прямым применением П1 и П2 к записи схемы (7), (8). Матрицы параметров в уравнениях на стадийные приращения k_i и решение новой схемы $y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m \tilde{\mu}_i k_i$ преобразуются по формулам:

$$\begin{aligned} \tilde{\eta} &= S\eta, \\ \tilde{\beta} &= \beta Q, \\ \tilde{\alpha} &= S\alpha Q - SQ + E, \\ \tilde{\gamma} &= S\gamma Q + aSQ - aE, \\ \tilde{\mu} &= \mu Q. \end{aligned} \quad (9)$$

Это можно непосредственно проверить, применяя П1 и П2 к матричной записи данных уравнений в форме (8). Для столбцов матрицы $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_m)$ получаем запись

$$\eta_i = \begin{cases} (0, \dots, 0, \eta_{ii}, \dots, \eta_{mi})^\top, & i \in M_k, \\ (0, \dots, 0)^\top, & i \in \bar{M}_k. \end{cases}$$

Рассмотрим элементарные матрицы d_r , $r \in M_k$, которые отличаются от единичной только поддиагональными элементами $d_{sr} = \eta_{sr}/\eta_{rr}$, $s \geq r$. Выберем матрицы преобразований схемы: диагональную матрицу Q с элементами

$$Q = \begin{cases} \eta_{ii}, & i \in M_k, \\ 1, & i \in \bar{M}_k, \end{cases}$$

и матрицу $S = d_{m(k)}^{-1} \dots d_{m(1)}^{-1} Q^{-1}$, где $m(i) \in M_k$. Условие $\text{diag}(SQ) = E$ выполняется, а из (9) получаем для элементов диагональной матрицы параметров новой схемы $\tilde{\eta} = S\eta$:

$$\tilde{\eta}_{ii} = \begin{cases} 1, & i \in M_k, \\ 0, & i \in \bar{M}_k. \end{cases}$$

Дальнейшие действия при выборе преобразований

$$S = E_m, \quad Q = (E_m - \alpha)$$

позволяют избавиться от матрицы $\tilde{\alpha}$, поскольку из (9) следует, что $\tilde{\alpha} = 0$. Выбор матриц преобразования

$$S = E_m, \quad Q = a(\tilde{\gamma} - aE_m)^{-1} \quad (10)$$

дает $\tilde{\gamma} = 0$.

Рассмотрим процедуру дальнейшей минимизации числа ненулевых параметров матрицы $\tilde{\alpha}$ схемы, которая получается из (10), т.е. при условии $\tilde{\gamma} = 0$. Случай $\alpha = 0$ может быть рассмотрен аналогично. Для вектора $P = (0, \dots, 0, p_r, \dots, p_m)^\top$ с первыми $r - 1$ ненулевыми координатами и матрицей S_r , которая отличается от единичной матрицы только поддиагональными элементами r -го столбца и имеет вид

$$S_r = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \dots & & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & & & \\ \vdots & & 1 & 0 & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & s_{rr} & \ddots & \\ \vdots & & \vdots & s_{r+1,r} & 1 & 0 \\ & & & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & s_{mr} & 0 & & 1 \end{pmatrix}$$

с элементами: $s_{rr} = 1/p_r$, $s_{ir} = -p_i/p_r$, $r + 1 \leq i \leq m$, получаем $S_r P = e_r$, где e_r — r -й координатный вектор. Определим последовательность преобразований матриц параметров схемы для стадий с номерами $r = l_i$, $l_i \in \bar{M}_k$, $l_i < l_{i+1}$, $i = 1, \dots, m - k$: $\alpha^{(0)} = \alpha$, $\alpha^{(i)} = S_{l_i} \alpha^{(i-1)} Q_{l_i}$, $i = 1, \dots, m - n$, где в качестве P взят $l_i - 1$ -й столбец матрицы $\alpha^{(i-1)}$, $Q_{l_i} = S_{l_i}^{-1}$. Заметим, что $S_r e_i = e_i$ при $i < r$, и что первые $l_i - 1$ столбцов матрицы $\alpha^{(i-1)} Q_{l_i}$ совпадают с соответствующими столбцами матрицы $\alpha^{(i-1)}$. В результате описанных выше преобразований для столбцов матрицы $\tilde{\alpha} = \alpha^{(m-k)}$ получаем $\tilde{\alpha}_i = e_{i+1}$ при $(i + 1) \in M_m \setminus M_k$. Последнее соотношение приводит к записи (6) (m, k) -схем решения (1) и множеств J_i . Доказательство завершено. \square

Замечание 1. В случае $k < m$, когда число стадий m больше количества вычислений функций k , форма (6) записи схем типа Розенброка позволяет избавиться от линейно зависимых параметров. Это осуществляется с учетом структуры уравнений на стадии и облегчает в дальнейшем анализ условий согласованности. По числу параметров (m, k) -схемы минимальны в общем случае в классе схем типа Розенброка. Решение нелинейных алгебраических уравнений согласованности и устойчивости и других требований к (m, k) -методам может допускать возможность равенства нулю части параметров, что не отменяет утверждение об оптимальности их записи.

Замечание 2. Если вычисление функций происходит на каждой стадии, структура и число параметров (а именно $m^2 + 1$) (m, k) -схем при $\theta = 1$ и ROW-методов совпадают.

Используя (10), выпишем рекуррентные формулы для пересчета матриц коэффициентов схемы (6) при переходе от случая $\theta = 0$ к случаю $\theta = 1$:

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha}_{ij} &= \sum_{l=1}^{i-1} \gamma_{il}(\delta_{lj} - \alpha_{lj})/a, & \tilde{\beta}_{ij} &= \sum_{l=1}^{i-1} \beta_{ij}(\delta_{lj} - \alpha_{lj}), \\ \tilde{\mu}_i &= \sum_{l=1}^m \mu_l(\delta_{lj} - \alpha_{lj}), \quad i, j = 1, \dots, m,\end{aligned}$$

где δ_{lj} — символ Кронекера. Получим выражения для функции устойчивости $R(z)$ и коэффициента затухания $R(\infty)$ (m, k) -схем в случае $\theta = 1$. Применяя (6) для решения тестового уравнения Дальквиста $x' = \lambda x$, получим

$$(1 - az)k_i = z \left(\delta_i + \sum_{l=1}^{i-1} (\beta_{il} + \gamma_{il}) \right), \quad (11)$$

где $z = h\lambda$,

$$\delta_i = \begin{cases} 1, & i \in M_k, \\ 0, & i \in \bar{M}_k. \end{cases}$$

Выражение (11) в матричной форме имеет вид $(E_m - \frac{z}{1-az}G)k = \frac{z}{1-az}\delta$, где $G = (g_{il})$, $g_{il} = \beta_{il} + \gamma_{il}$, $k = (k_1, \dots, k_m)^\top$, $\delta = (\delta_1, \dots, \delta_m)^\top$. Разрешая последнее уравнение относительно вектора k и подставляя его в (6), получаем

$$R(z) = 1 + \mu k = 1 + \sum_{l=1}^m \left(\frac{z}{1-az} \right)^l \mu G^{(l-1)} \delta.$$

Следовательно,

$$R(\infty) = 1 + \sum_{l=1}^m (-1)^l \left(\frac{1}{a} \right)^l \mu G^{l-1} \delta.$$

Если порядок схемы p больше или равен числу стадий m , то, следуя [9], имеем следующее представление функции устойчивости:

$$R(z) = \sum_{l=0}^m \frac{z^l}{(1-az)^m} \sum_{i=0}^l C_m^i \frac{(-a)^i}{(l-i)!}.$$

Отсюда

$$R(\infty) = \sum_{i=0}^m C_m^i \frac{(-a)^{i-m}}{(m-i)!},$$

где C_m^i — биномиальные коэффициенты Ньютона.

2. (m, k) -методы решения неявных систем

Рассмотрим задачу (4) и применим к ней метод ε -вложения [1]. При $\varepsilon \rightarrow 0$ система (4) может трактоваться как предельный случай системы

$$\begin{cases} x' = y, \\ \varepsilon y' = F(x, y). \end{cases} \quad (12)$$

Применяя схему (6) к (12) и осуществляя в записи схемы предельный переход при $\varepsilon \rightarrow 0$, получаем (m, k) -схемы решения неявных систем (3):

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^m \mu_i k_i^x, \quad y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m \mu_i k_i^y,$$

где k_i^x и k_i^y обозначают стадии схемы, которые при $i \in M_k$ вычисляются по формулам:

$$D_n = A_2 + ahA_1,$$

$$D_n k_i^x = h \left[A_2 \left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j^y \right) - F \left(x_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j^x, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j^y \right) \right] + \theta A_2 \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j^x + (1 - \theta) h A_1 \sum_{j \in J_i} \gamma_{ij} k_j^x,$$

$$k_i^y = \frac{1}{ah} \left[k_i^x - h \left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j^y \right) - \theta \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j^x - (1 - \theta) h \sum_{j \in J_i} \gamma_{ij} k_j^y \right],$$

а при $i \in \bar{M}_k$ по формулам:

$$D_n k_i^x = \theta A_2 \left(k_{i-1}^x + \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j^x \right) + (\theta - 1) h A_1 \left(k_{i-1}^x + \sum_{j \in J_i} \gamma_{ij} k_j^x \right),$$

$$k_i^y = \frac{1}{ah} \left[k_i^x - \theta \left(k_{i-1}^x + \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j^x \right) - (1 - \theta) h \left(k_{i-1}^y + \sum_{j \in J_i} \gamma_{ij} k_j^y \right) \right].$$

Здесь $\mu_i, \beta_{ij}, \alpha_{ij}, \gamma_{ij}, a$ — те же параметры, что в (7), (8); A_1, A_2 — матрицы, аппроксимирующие производные $F_{ny} = \partial F(x_n, y_n) / \partial y$ и $F_{nx} = \partial F(x_n, y_n) / \partial x$. Общий подход к исследованию условий порядка таких схем приведен в работе [10].

3. (3, 2)-метод

Параметры схемы, обеспечивающие желаемый порядок точности, можно получить методом неопределенных коэффициентов, используя разложения точного и приближенного решений задачи Коши в ряды Тейлора. Ряды были получены для ДАУ индекса 1 с использованием методологии, основанной на графическом представлении элементарных дифференциалов, аналогичном развитому в [11]. Эти разложения не приводятся здесь ввиду громоздкости. Для (m, k) -схем, в которых используется замораживание матриц производных, условия согласованности до четвертого порядка включительно получены в работе [10]. Условия третьего порядка исследуемой $(3, 2)$ -схемы приведены ниже:

$$\begin{aligned}\mu_1 + \mu_2 &= 1, \\ \mu_2(\gamma_{21} + \beta_{21}) + \mu_3\gamma_{31} + \mu_3 &= 0.5 - a, \\ \mu_2\beta_{21}^2 &= 1/3, \\ \mu_3\gamma_{21} &= a^2 - a + 1/6, \\ (\mu_2a - \mu_3)\beta_{21}^2 &= a^2.\end{aligned}$$

Разрешая эту систему, получаем выражения для параметров схемы:

$$\begin{aligned}\mu_1 &= \frac{3\beta_{21}^2 - 1}{3\beta_{21}^2}, & \mu_2 &= \frac{1}{3\beta_{21}^2}, & \mu_3 &= \frac{-3a^2 + a}{3\beta_{21}^2}, \\ \gamma_{21} &= \frac{-6a^2 + 6a - 1}{6a^2 - 2a}\beta_{21}^2 - \beta_{21}, & \gamma_{31} &= \frac{18a^3 - 21a^2 + 9a - 1}{18a^4 - 12a^3 + 2a^2}\beta_{21}^2 - 1.\end{aligned}$$

Числовые коэффициенты a и β_{21} являются свободными. Если $1/3 < a \leq 1.068579$, то схема будет A -устойчивой, при $a = 0.43586652150845911$ она является L -устойчивой. Мы выбрали значение параметра β_{21} равным 1. Как показывают результаты расчетов в этом случае надежность метода возрастает. Это можно объяснить тем, что стадии в этом случае вычисляются в крайних точках шага.

Ниже приведена запись $(3, 2)$ -метода решения неавтономных неявных систем ОДУ (параметр θ равен 1):

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= x_n + p_1k_1^x + p_2k_2^x + p_3k_3^x, \\ y_{n+1} &= y_n + p_1k_1^y + p_2k_2^y + p_3k_3^y, \\ D_n k_1^x &= h(F_{ny}y_n - F(x_n, y_n, t_n) - ahF_{nt}), \\ k_1^y &= (k_1^x - hy_n)/(ah), \\ D_n k_2^x &= h(F_{ny}(y_n + \beta_{21}k_1^y) - F(x_n + \beta_{21}k_1^x, y_n + \beta_{21}k_1^y, t_n + \beta_{21}h) - ah(1 + \alpha_{21})F_{nt}), \\ k_2^y &= (k_2^x - h(y_n + \beta_{21}k_1^y))/(ah), \\ D_n k_3^x &= F_{ny}(k_2^x + \alpha_{31}k_1^x) - (1 + \alpha_{21} + \alpha_{31})ah^2F_{nt}, \\ k_3^y &= (k_3^x - k_2^x - \alpha_{31}k_1^x)/(ah), \\ D_n &= F_{ny} + ahF_{nx}.\end{aligned}\tag{13}$$

Для контроля точности используется вложенный L -устойчивый $(3, 2)$ -метод, основанный на стадиях метода (13). Параметры \tilde{p}_i , $i = \overline{1, 3}$, вложенного метода имеют вид:

$$\begin{aligned}\tilde{p}_1 &= +9.495683316051624 \cdot 10^{-1}, \\ \tilde{p}_2 &= +2,349274447606073 \cdot 10^{-1}, \\ \tilde{p}_3 &= -2,22287268416089 \cdot 10^{-2}.\end{aligned}$$

Коэффициенты выбраны с учетом согласованности локальных ошибок методов второго и третьего порядков.

Для контроля точности используется следующая оценка локальной ошибки:

$$v(j_n) = D_n^{1-j_n} \sum_{i=1}^3 (p_i - \tilde{p}_i) k_i^x. \quad (14)$$

Отметим одну важную особенность оценки (14): L -устойчивость $(3, 2)$ -метода третьего порядка (13) означает, что модуль ее функции устойчивости $|R(z)| \rightarrow 0$ при $z \rightarrow -\infty$, где $z = h\lambda$. Поскольку для точного решения уравнения Дальквиста выполняется аналогичное свойство, естественно требование стремления к нулю глобальной ошибки при условии, что $z \rightarrow -\infty$. Для $v(1)$ условие L -устойчивости не выполняется, поскольку оценка A -устойчива. Для того чтобы исправить асимптотический характер оценки ошибки, введем величину $v(j_n)$, $1 \leq j_n \leq 2$, вместо $v(1)$. В этом случае точное решение и $v(2)$ будут согласованы при $z \rightarrow -\infty$. Заметим, что оценки $v(1)$ и $v(2)$ совпадают в смысле главного члена, т. е. первого члена разложения ошибок в ряды Тейлора по степеням h . На практике использование $v(j_n)$ не приводит к значительному повышению вычислительных затрат, поскольку $v(2)$ вычисляется только в случае $v(1) > \varepsilon$. Такая ситуация возникает довольно редко, как правило, если шаг интегрирования быстро растет. Предложенная оценка позволяет уменьшить число возвратов.

В результате для контроля точности расчетов необходимо проверять неравенство

$$\left\| D_n^{1-j_n} \sum_{i=1}^3 (p_i - \tilde{p}_i) k_i^x \right\| \leq \varepsilon,$$

где ε — требуемая точность расчетов, а норма вычисляется по формуле

$$\|\xi_n\| = \max_{1 \leq i \leq N} \frac{|\xi_n^i|}{|x_n^i| + r}. \quad (15)$$

Если x_n^i меньше r , то по i -й компоненте контролируется абсолютная ошибка $r\varepsilon$, в противном случае — относительная погрешность ε .

4. Алгоритм интегрирования

Пусть x_n и y_n — приближенное решение и его производная, вычисленные с шагом h_n в точке t_n . Алгоритм интегрирования для решения жестких систем ОДУ и систем ДАУ индекса 1, основанный на L -устойчивом $(3, 2)$ -методе третьего порядка, формулируется следующим образом:

1. Вычислить матрицы F_{nx} , F_{ny} и вектор F_{nt} .
2. Вычислить матрицу D_n .

3. Вычислить векторы $k_i^x, k_i^y, i = \overline{1, 3}$.
4. Вычислить оценку локальной ошибки $\varepsilon_n = \|v(1)\|$. Если $\varepsilon_n > \varepsilon$, то повторно вычислить ε_n , используя формулу $\varepsilon_n = \|v(2)\|$, где ε — требуемая точность расчетов.
5. Вычислить s_n по формуле $q^{3s_n}\varepsilon_n = \varepsilon$, где $q > 1$ — некоторая заданная константа.
6. Если $s_n < 0$, повторно вычислить решения с шагом $q^{s_n}h_n$ (возврат на шаг 2).
7. С использованием формулы (13) вычислить приближенное решение в точке t_{n+1} .

5. Результаты расчетов

Расчеты осуществлялись на PC Intel(R) Core i5-3317U CPU@1.70GHz с двойной точностью. Далее **steps** и **returns** обозначают количество успешных шагов и отброшенных (возвратов) по контролю точности, **F** — количество вычислений функции, **eps** — требуемая точность расчетов, **scd** — среднее число правильных значащих цифр в численном решении, которое было вычислено с использованием формулы **scd** = $-\log_{10}(\mathbf{average\ rel.\ err.})$, где **average rel. err.** — средняя по компонентам норма ошибки решения в конечной точке интервала интегрирования, вычисленная согласно (15). Новый алгоритм был протестирован на серии примеров, ниже приведены два из них. Первый представляет собой следующую систему ДАУ индекса 1:

$$\begin{cases} x_1' = -0.5(x_2 + 3)^2, \\ x_2' = x_2 - 4x_3 + 11, \\ 0 = (2x_3 - 1)x_2 - 4x_1 + 13, \end{cases}$$

где

$$x_1(0) = 2, \quad x_2(0) = -1, \quad x_3(0) = 3, \quad 0 \leq t \leq 30.$$

Точное решение: $x_1(t) = e^{-2t} + 1$, $x_2(t) = 2e^{-t} - 3$, $x_3(t) = e^{-t} + 2$. Результаты расчетов первого примера приведены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты расчетов первой тестовой задачи

eps	steps	returns	scd	average rel. err.
10^{-2}	13	0	3.4937	$3.2087 \cdot 10^{-4}$
10^{-3}	24	0	4.5043	$3.1313 \cdot 10^{-5}$
10^{-4}	55	0	5.5437	$2.8603 \cdot 10^{-6}$

Второй пример — задача ROBER, включающая три нелинейных ДАУ индекса 1 и описывающая автокаталитическую реакцию:

$$\begin{cases} x_1' = -0.04x_1 + 10^4x_2x_3, \\ x_2' = 0.04x_1 - 10^4x_2x_3 - 3 \cdot 10^7x_2^2, \\ 0 = x_1 + x_2 + x_3 - 1, \end{cases}$$

где

$$x_1(0) = 1, \quad x_2(0) = 0, \quad x_3(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq 10^{11}.$$

Эталонное решение, полученное с помощью алгоритма RADAU на Alphaserver DS20E с процессором 667 МГц EV67 с двойной точностью при $\text{rtol} = \text{atol} = h_0 = 1.1 \cdot 10^{-18}$, имеет вид

$$\begin{aligned}x_1 &= 0.2083340149701255 \cdot 10^{-7}, \\x_2 &= 0.8333360770334713 \cdot 10^{-13}, \\x_3 &= 0.9999999791665050.\end{aligned}$$

А. Хиндмарш обнаружил, что многие алгоритмы прекращают работать, если t принимает очень большие значения [1]. Причина заключается в том, что если компонента x_2 численного решения случайно становится отрицательной, то она начинает стремиться к $-\infty$.

Поскольку в этом примере первая и вторая компоненты решения стремятся к нулю, а третья стремится к единице по мере того как t приближается к концу интервала интегрирования, авторами было принято решение вычислять **scd** следующим образом: сначала определялось наименьшее число значащих цифр в точках $t = 1, 10, 10^2, 10^3, \dots, 10^{11}$; затем вычислялось среднее арифметическое этих чисел. Результаты по вычислительным затратам и точности расчетов для задачи Робера приведены в табл. 2. График второй компоненты численного решения приведен на рисунке.

Таблица 2. Результаты расчетов для задачи ROBER

eps	steps	returns	scd	average rel. err.
10^{-2}	34	0	3.5827	$1.5789 \cdot 10^{-7}$
10^{-3}	38	0	4.4880	$2.1710 \cdot 10^{-8}$
10^{-4}	60	0	4.6457	$1.3549 \cdot 10^{-8}$

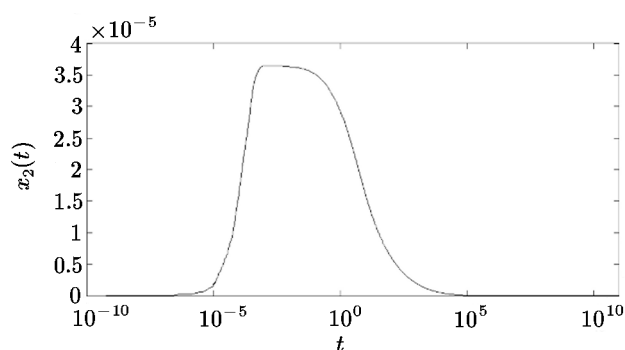


Рис. График второй компоненты численного решения задачи ROBER

Результаты расчетов показывают, что данный алгоритм обеспечивает третий порядок точности на серии систем ДАУ индекса 1. Практическая точность выше, чем требуемая. Заметим, что меняя значение параметра r , можно настраивать новый алгоритм на тот или иной класс задач.

6. Заключение

В данной работе авторы приводят общую форму записи (m, k) -схем. Доказана их оптимальность по числу независимых параметров в общем классе методов типа Розенброка. Приведены формулы пересчета параметров для различных представлений (m, k) -схем.

Представлен L -устойчивый $(3, 2)$ -метод третьего порядка. Построен алгоритм интегрирования переменного шага, основанный на этом методе.

Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность алгоритма. Поскольку алгоритм имеет невысокий третий порядок точности, он может быть рекомендован для вычисления решения с точностью не выше 10^{-4} . Поэтому необходимо создавать и исследовать (m, k) -методы и алгоритмы более высокого порядка. Заметим, что эффективность (m, k) -методов может быть повышена путем замораживания матрицы Якоби [12].

Литература

1. **Hairer E., Wanner G.** Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems. — Berlin: Springer-Verlag, 1996.
2. **Новиков Е.А., Шорников Ю.В.** Компьютерное моделирование жестких гибридных систем. — Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2012
3. **Rosenbrock H.H.** Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. — 1963. — Vol. 5. — P. 329–330.
4. **Артемьев С.С., Демидов Г.В.** Алгоритм переменного порядка и шага для численного решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Докл. АН СССР. — 1978. — Vol. 238, № 3, — С. 517–520.
5. **Kaps P., Wanner G.** A study of Rosenbrock-type methods of high order // Numerische Mathematik. — 1981. — Vol. 38. — P. 279–298.
6. **Steihaug T., Wolfbrandt A.** An attempt to avoid exact Jacobian and nonlinear equations in the numerical solution of stiff differential equations // Mathematics of Computations. — 1979. — Vol. 33. — P. 521–534.
7. **Werwer J.G., Scholz S., Blom J.G., Louter-Nool M.** A class of Runge–Kutta–Rosenbrock methods for solving stiff differential equations // ZAAM. — 1983. — Vol. 63. — P. 13–20.
8. **Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А.** Матрицы и вычисления. — Новосибирск: Наука, 1984.
9. **Norsett S.P.** Restricted Padè approximations to the exponential function // SIAM J. Numer. Analysis. — 1978. — Vol. 15, № 5. — P. 1008–1029.
10. **Levykin A.I., Novikov E.A.** A study of (m, k) -methods for solving differential-algebraic systems of index 1 // Mathematical Modeling of Technological Processes. Proc. 8th Int. Conf. CITech 2015. — 2015. — P. 94–107. — (Communication on Computer and Information Science; Vol. 549).
11. **Roche M.** Rosenbrock methods for differential algebraic equations // Numerische Mathematik. — 1988. — Vol. 52. — P. 45–63.
12. **Levykin A.I., Novikov A.E., Novikov E.A.** Third order (m, k) -method for solving stiff systems of ODEs and DAEs // Proc. XIV Int. Scientific-Technical Conf. APEIE-2018. — Novosibirsk: NSTU, 2018. — Vol. 1, Part 4. — P. 158–163.

Поступила в редакцию 14 января 2019 г.

После исправления 4 апреля 2019 г.

Принята к печати 15 октября 2019 г.

Литература в транслитерации

1. **Hairer E., Wanner G.** Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems. — Berlin: Springer-Verlag, 1996.

2. **Novikov E.A., Shornikov Yu.V.** Komp'yuternoe modelirovanie zhestkih gibridnyh sistem. — Novosibirsk: Izd-vo NGTU, 2012
3. **Rosenbrock H.H.** Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. — 1963. — Vol. 5. — P. 329–330.
4. **Artem'ev S.S., Demidov G.V.** Algoritm peremennogo poryadka i shaga dlya chislennogo resheniya zhestkih sistem obyknovennyh differencial'nyh uravnenii // Dokl. AN SSSR. — 1978. — Vol. 238, № 3, — С. 517–520.
5. **Kaps P., Wanner G.** A study of Rosenbrock-type methods of high order // Numerische Mathematik. — 1981. — Vol. 38. — P. 279–298.
6. **Steihaug T., Wolfbrandt A.** An attempt to avoid exact Jacobian and nonlinear equations in the numerical solution of stiff differential equations // Mathematics of Computations. — 1979. — Vol. 33. — P. 521–534.
7. **Werwer J.G., Scholz S., Blom J.G., Louter-Nool M.** A class of Runge–Kutta–Rosenbrock methods for solving stiff differential equations // ZAAM. — 1983. — Vol. 63. — P. 13–20.
8. **Voevodin V.V., Kuznecov Yu.A.** Matricy i vychisleniya. — Novosibirsk: Nauka, 1984.
9. **Norsett S.P.** Restricted Padè approximations to the exponential function // SIAM J. Numer. Analysis. — 1978. — Vol. 15, № 5. — P. 1008–1029.
10. **Levykin A.I., Novikov E.A.** A study of (m, k) -methods for solving differential-algebraic systems of index 1 // Mathematical Modeling of Technological Processes. Proc. 8th Int. Conf. CITech 2015. — 2015. — P. 94–107. — (Communication on Computer and Information Science; Vol. 549).
11. **Roche M.** Rosenbrock methods for differential algebraic equations // Numerische Mathematik. — 1988. — Vol. 52. — P. 45–63.
12. **Levykin A.I., Novikov A.E., Novikov E.A.** Third order (m, k) -method for solving stiff systems of ODEs and DAEs // Proc. XIV Int. Scientific-Technical Conf. APEIE-2018. — Novosibirsk: NSTU, 2018. — Vol. 1, Part 4. — P. 158–163.

