

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ СВЕРХЖЁСТКИХ ОДУ

Власов Сергей Александрович¹

¹Магистр техники и технологии по направлению «Системный анализ и управление», фрилансер;

E-mail: vlasovs2@yandex.ru

Работа посвящена исследованию методов интегрирования задачи Коши для сверхжестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Исследовались следующие методы: полностью неявные и диагонально неявные методы Рунге-Кутты, методы Розенброка, коллокационные методы. Поиск решения производится на основе вычислений повышенной точности.

Было выполнено экспериментальное сравнение десятка различных методов, и полученные результаты представлены в виде графиков зависимостей "настраиваемая точность — точность полученного решения" и "точность полученного решения — трудоёмкость".

В работу входит описание методов поиска коэффициентов непрерывных методов Розенброка до точности 30 и более значащих цифр.

Ключевые слова: сверхжесткие обыкновенные дифференциальные уравнения, непрерывные методы Розенброка, вычисления повышенной точности.

NUMERICAL METHODS FOR SUPER STIFF ODE

Vlasov Sergey Aleksandrovich¹

¹*Master of Engineering and Technology, freelancer;*

E-mail: vlasovs2@yandex.ru

This work is devoted to the study of integration methods for the Cauchy problem for super stiff systems of ordinary differential equations. The following methods were investigated: FIRK and DIRK methods, Rosenbrock methods, and collocation methods. The search for a solution is based on calculations of high precision computations.

An experimental comparison of a dozen different methods was carried out, and the results obtained are presented in the form of graphs of dependencies "adjustable accuracy — accuracy of the obtained solution" and "accuracy of the obtained solution — computations time".

The work includes a description of methods for finding the coefficients of multirate Rosenbrock methods up to an accuracy of 30 or more significant digits.

Keywords: super stiff ordinary differential equations, multirate Rosenbrock methods, high precision computations.

Введение

Численное интегрирование систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) — прикладная задача, относящаяся к традиционному математическому моделированию.

Жёсткой системой называется такая система ОДУ, численное решение которой явными методами (например, методами Рунге – Кутты или Адамса) является неудовлетворительным из-за резкого увеличения числа вычислений. Такие системы часто решают неявными методами или явно-неявными схемами типа Розенброка, которые дают обычно несравненно лучший результат, чем явные методы. Сверхжёсткими называют системы ОДУ со степенью жёсткости более 10^6 [1].

Стандартная точность чисел с плавающей точкой современных компьютеров: от 15 до 20 цифр в мантиссе. Этого бывает недостаточно, особенно в плохо обусловленных задачах и в задачах с внутренними пограничными слоями (контрастными структурами) [2]. В них ошибки начальных данных, а также ошибки округления, неизбежно возникающие в ходе расчёта, приводят к огромной потере точности. Для них нередко приходится использовать расширенную точность (30 и более цифр), чтобы единичные округления были как можно меньше.

При использовании методов Розенброка можно столкнуться с проблемой, когда коэффициенты приведены с малым числом значащих цифр, рассчитанных на вычисления со стандартной точностью. При этом приходится обращаться к условиям порядка и устойчивости, чтобы уточнить коэффициенты методов.

Иногда требуется, чтобы решение было непрерывным. В отличие от разностного решения непрерывное можно вычислять между узлами основной сетки интегрирования. Непрерывное решение необходимо, например, при решении ОДУ с несколькими некратами запаздываниями. Для того чтобы получился непрерывный метод можно воспользоваться интерполяцией узлов, или построить решение на основе стадий численного метода, выбранного для решения системы.

В данной работе описан метод уточнения коэффициентов некоторых методов Розенброка, а так же даны сами уточнённые коэффициенты, в том числе и для непрерывных методов на основе стадий.

Так же в работе проводится экспериментальное тестирование и сравнение десятка различных методов, и полученные результаты представлены в виде графиков зависимостей "настраиваемая точность — точность полученного решения" и "точность полученного решения — трудоёмкость". Тестирование было проведено на классических сверхжёстких задачах с использованием расширенной точности с получением непрерывного решения.

1. Современные вычисления

Многие вычисления удобно делать в какой-нибудь системе компьютерной математики, такой как Maple. Система Maple предназначена для символьных вычислений, обладает развитыми графическими средствами и имеет собственный язык программирования. Кроме того, она позволяет производить вычисления произвольной точности с различным количеством значащих цифр.

Ещё активно использовался язык программирования C/C++ и C++ Builder 6 как программная среда разработки.

1.1. Длинная арифметика

Основная масса библиотек длинной арифметики написана под Unix. К ним относятся и библиотеки gmp (GNU Multi-Precision Library) и mpfr (multiple-precision floating-point computations with correct rounding), которые позволяют делать вычисления над числами произвольной точности. Библиотека gmp считается самой быстрой библиотекой чисел произвольной точности.

Под Windows не существует библиотек подобных gmp и mpfr. Но можно найти описание методов, позволяющих считать числа точности double double [3] (как минимум 31 значащая цифра) и quad double [4] (как минимум 62 значащие цифры). Числа double double работают быстрее, чем числа mpfr той же точности. В основе обычно используется 64-х битный тип double, но его можно заменить 80-ю битным типом long double (extended) в 32-х битном приложении, что даст больше значащих цифр. При этом нужно изменить константу разбиения 134217729 на 8589934593, а так же заменить некоторые формулы (для экспоненты, синуса и гамма-функции) на более точные. Однако и приложение при этом будет 32-х битное, так как в 64-х битном приложении нет 80-ти битного типа.

1.2. Получение условий порядка

Для получения условий порядка была написана программа, позволяющая: раскрывать скобки, приводить подобные слагаемые и группировать слагаемые относительно матричных операторов. Риск ошибиться при этом значительно уменьшается. Так получены условия порядка для всех методов Розенброка, которые включены в данную работу.

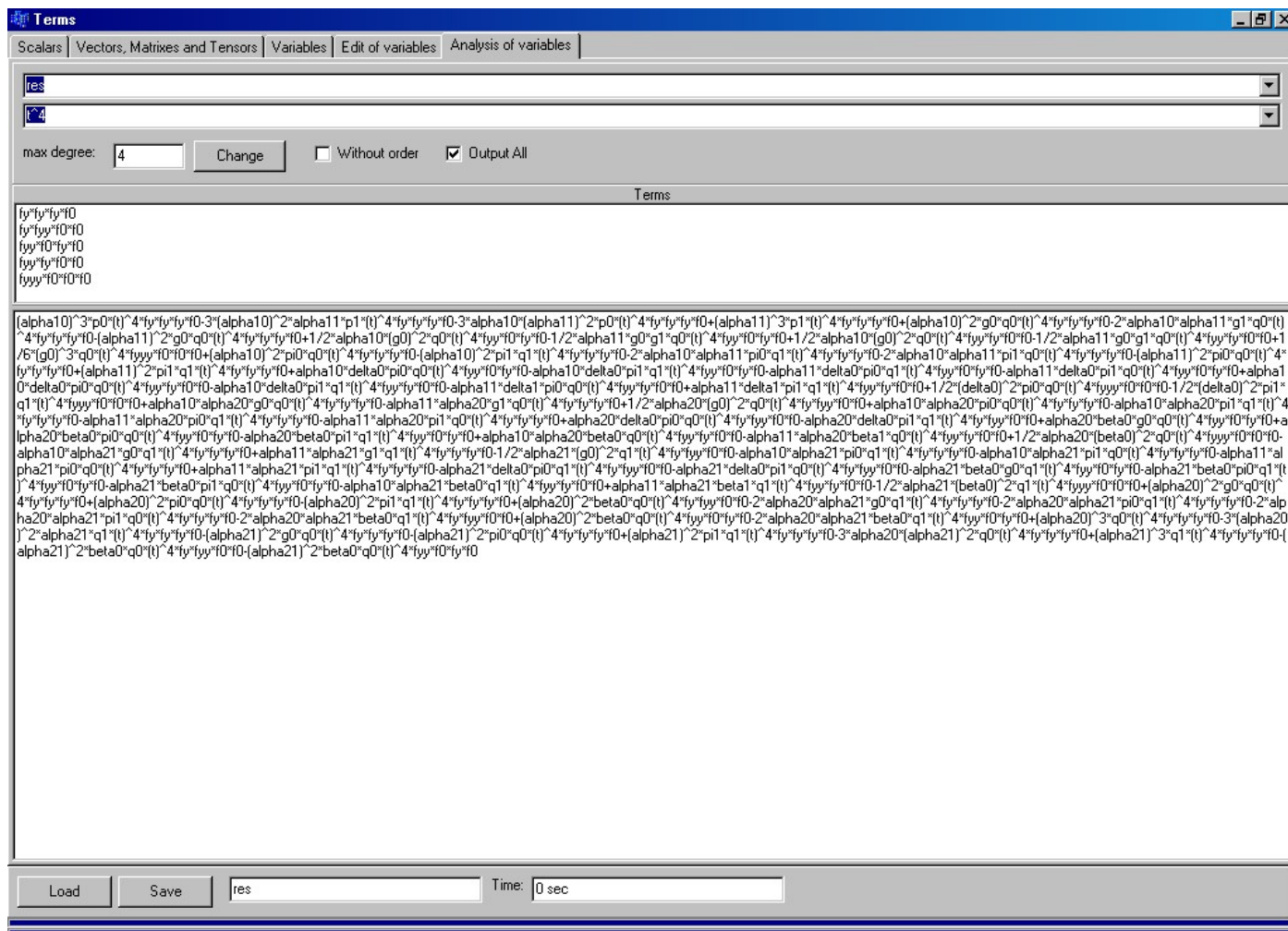


Рисунок 1. Программа получения условий порядка.

1.3. Метод Ньютона для решения некорректных задач

Имеются в виду задачи нахождения решения системы нелинейных уравнений, в которых количество переменных превышает количество уравнений.

Пусть дана система уравнений:

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ F_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}, \quad k < n \quad (1)$$

Эта система дополняется недостающими уравнениями, например, вида $0=0$. Далее в методе Ньютона выбирается начальное приближение и вычисляется матрица Якоби. Матрица Якоби вырождена и имеет определитель равный нулю, поэтому нельзя перейти к следующей точке по стандартной схеме:

$$\frac{\partial \bar{F}}{\partial \bar{x}}(\bar{x}_i) \cdot \Delta \bar{x}_i = -\bar{F}(\bar{x}_i), \quad (2)$$

$$\bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i + \Delta \bar{x}_i$$

где $\frac{\partial \bar{F}}{\partial \bar{x}}(\bar{x}_i)$ — матрица Якоби.

Воспользуемся регуляризацией системы (1) по Тихонову.

Пусть матрица Якоби равна A , тогда приближённое решение (2) можно найти из следующей системы уравнений:

$$(A^T \cdot A + \lambda \cdot E) \cdot v = A^T \cdot f + \lambda \cdot v^* \quad (3)$$

где λ — параметр регуляризации, E — единичная матрица, $v = \Delta \bar{x}_i$, $f = -\bar{F}(\bar{x}_i)$, v^* — желаемое $\Delta \bar{x}_i$.

Примем $v^* = 0$. Параметр регуляризации λ влияет на скорость сходимости получившегося метода Ньютона, чем он больше, тем сходимость медленнее и может вообще остановиться. С другой стороны, если взять очень малый параметр, то система (3) может дать очень крупные значения и метод Ньютона разойдётся. Возможное значение параметра $\lambda = 10^{-12}$.

1.4. Непрерывный метод Розенброка на основе стадий

Чтобы метод был непрерывным, добавляют дополнительные условия порядка относительно параметра θ , зависящего от времени [5]. Решение ищется в виде:

$$y(\theta) = \sum_{i=1}^n \bar{k}_i \cdot \sum_{j=1}^m p_{i,j} \cdot \theta^j \quad (4)$$

где \bar{k}_i — стадии метода Розенброка, $p_{i,j}$ — параметры задаваемые методом, $\theta = (t - t_n) / (t_{n+1} - t_n) = 0..1$,

n — количество стадий метода, m — максимальная степень θ .

Максимальная степень m задаётся вручную. Условия порядка записываются относительно параметра θ .

Например, должны выполняться четыре условия, что даст 3-й порядок для автономных систем. Тогда необходимо выполнения $4 \cdot m$ условий. Если параметров в (4) больше, то ещё n условий должно выполняться, для того, чтобы (4) совпала с основной формулой при $\theta = 1$. Если параметров больше, чем $(4 \cdot m + n)$, то можно воспользоваться методом Ньютона с регуляризацией СЛАУ.

Для методов с комплексными коэффициентами решение ищется в виде:

$$y(\theta) = \sum_{i=1}^n \text{Re} \left(\bar{k}_i \cdot \sum_{j=1}^m p_{i,j} \cdot \theta^j \right) \quad (5)$$

где \bar{k}_i — комплексные стадии, $p_{i,j}$ — комплексные параметры, $\theta = 0..1$.

2. Примеры уточнённых методов Розенброка

Для взятых из литературы методов было проведено уточнение коэффициентов до точности 30 и более значащих цифр. Так же приводятся коэффициенты непрерывных методов основанных на стадиях данных методов.

2.1. (4,2)-метод

Данный метод взят из [6]. Это L-устойчивый метод четвертого порядка. Метод задается следующими формулами:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^m p_i \cdot k_i, & D_n &= E - a \cdot h \cdot f'_n \\ D_n \cdot k_1 &= h \cdot f(y_n), & D_n \cdot k_2 &= k_1 \\ D_n \cdot k_3 &= h \cdot f(y_n + \beta_{31} \cdot k_1 + \beta_{32} \cdot k_2) + \alpha_{32} \cdot k_2 \end{aligned} \quad (6)$$

$$D_n \cdot k_4 = k_3 + \alpha_{42} \cdot k_2 \quad (6)$$

где k_i — стадии метода, E — единичная матрица, y — численное решение, $f(y)$ — правая часть системы, h — шаг интегрирования.

Уточнённые параметры даны в таблице 1. В ней так же приводится непрерывный метод, основанный на формуле (4).

Таблица 1.

Параметры (4,2)-метода
$a=0.5728160624821348554080013849767683409315$
$p1=1.278369390124472506000782151942886989045$
$p2=-1.007386809804384747838093468437643128000$
$p3=0.9265539109395042110093604870343782187148$
$p4=-0.3339613183469116184167678944417856261224$
$\beta31=1.009004690299215025588082799604327399592$
$\beta32=-0.2590046902992150255880827996043273995917$
$\alpha32=-0.4955220641657818341715530456206093602956$
$\alpha42=-1.287776482339217217685184223893417502206$
Коэффициенты для непрерывного метода 3-го порядка
$p11=2.807940918382931280268331126232341095630$
$p12=-2.283352377926245217075188710786266412373$
$p13=0.7537808496677864428076397364968123057875$
$p21=-3.136230519398356699219158918564434846756$
$p22=4.602228694452115124287372736689335424252$
$p23=-2.473384984858143172906307286562543705497$
$p31=1.031459744165087582629789670058674398639$
$p32=-1.800682298774149742460551733666582983217$
$p33=1.695776465548566370840122550642286803293$
$p41=-1.031459744165087582629789670058674398639$
$p42=1.800682298774149742460551733666582983217$
$p43=-1.103183872955973778247529958049694210700$

2.2. CROS2_1

Данный метод взят из [7]. Это двухстадийный L1-устойчивый метод с комплексными коэффициентами 4-го порядка. Метод задается следующими формулами:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + \operatorname{Re}(b_1 \cdot k_1 + b_2 \cdot k_2) \\
 [E - \tau \cdot \alpha_1 \cdot f_y(y_n)] \cdot k_1 &= \tau \cdot f(y_n) \\
 [E - \tau \cdot \alpha_2 \cdot f_y(y_n + \operatorname{Re}(a \cdot k_1))] \cdot k_2 &= \tau \cdot f(y_n + \operatorname{Re}(c \cdot k_1))
 \end{aligned} \quad (7)$$

где k_i — комплексные стадии метода, E — единичная матрица, y — численное решение, $f(y)$ — правая часть системы, τ — шаг интегрирования.

Уточнённые параметры даны в таблице 2. В ней так же приводится непрерывный метод, основанный на формуле (5).

Таблица 2.

Параметры CROS2_1
$\alpha_1 = 0.09705048233513176225872820658157096372762 + 0.1441824711215367963888908188125269341956i$
$\alpha_2 = 0.1886638033791539520269860791327147505581 + 0.06177441689689081715947141717106675420030i$
$b_1 = 0.04833419895509438083025798424226646350104 - 0.3205959705202491275579925812180370610420i$
$b_2 = 0.9516658010449056191697420157577335364990 - 1.696774337833590152863879033397701636829i$
$c = 0.1730887968652108268236509028841256629989 - 0.1694095699539015207491928002966606686529i$
$a = 0.5359744564304914728722121662633122018534 - 0.9665922748484189311614005696233999104339i$
Коэффициенты для непрерывного метода 3-го порядка
$p_{11} = 3.619032671469712553690516593029702603963 - 0.2004225284051934625395768416824377885643i$
$p_{12} = -8.414446230029770923182842133180291069678 - 0.6613406243058764343155995103891857483354i$
$p_{13} = 4.843747757515152750322583524392854929215 + 0.5411671821908207692971837708535864758580i$
$p_{21} = -2.619032671469712553690516593029702603963 - 9.183665759393742328007731132919548994127i$
$p_{22} = 8.414446230029770923182842133180291069678 + 29.50534469034316892770669484128541508572i$
$p_{23} = -4.843747757515152750322583524392854929215 - 22.01845326878301675256284274176356772842i$

2.3. CROS2_Optimal

Данный метод взят из [8]. Это двухстадийный метод с комплексными коэффициентами 4-го порядка. Он имеет оптимальное L – затухание как для функции устойчивости, так и для функции внутренней устойчивости. Метод задается следующими формулами:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + \operatorname{Re}(\omega_1 \cdot k_1 + \omega_2 \cdot k_2) \\
 [E - \tau \cdot \alpha_1 \cdot f_y(y_n)] \cdot k_1 &= \tau \cdot f(y_n) \\
 [E - \tau \cdot \alpha_2 \cdot f_y(y_n)] \cdot k_2 &= \tau \cdot f(y_n + \operatorname{Re}(\gamma_{21} \cdot k_1)) + \tau \cdot f_y(y_n + \operatorname{Re}(\delta_{21} \cdot k_1)) \cdot \pi_{21} \cdot k_1
 \end{aligned} \tag{8}$$

где k_i — комплексные стадии метода, E — единичная матрица, y — численное решение, $f(y)$ — правая часть системы, τ — шаг интегрирования.

Уточнённые параметры даны в таблице 3. В ней так же приводится непрерывный метод, основанный на формуле (5).

Таблица 3.

Параметры CROS2_Optimal
$\alpha_1 = 0.4573733434972975729886712378597810560027 - 0.2351004879985426732069962332538443381790i$
$\alpha_2 = 0.04262665650270242701132876214021894399728 - 0.3946329531721133798109289632446957436482i$
$\gamma_{21} = 0.9147466869945951459773424757195621120054 + 0.6546908396281089262421198339615985775839i$
$\delta_{21} = 0.7451903446015528669012176569684448709433 + 3.042955553310975129001697189423158388626i$
$\pi_{21} = -0.2317220370463119616442110173716549151421 + 0.07081125027258135212790263920701540770149i$
$\omega_1 = 0.2784065608064581775941260630978839609622 - 0.9196225438536243933605777235086716993250i$
$\omega_2 = 0.7215934391935418224058739369021160390378 + 0.2014773772275646399542954916451697899548i$
Коэффициенты для непрерывного метода 3-го порядка
$p_{11} = 1.662352335632077153904266284657282585433 + 3.058378731739278701194655437881970784617i$
$p_{12} = -1.145501425793116439658894990826412127076 - 6.527071235918501156496073309360094210372i$
$p_{13} = -0.2384443490325025366512452307329864973956 + 2.549069960325598061940840147969451726429i$

$\beta_{32}=-0.014112000000002362027939575752044256769$
 $\beta_{41}=-0.4820494693877553295338356343641135140289$
 $\beta_{42}=-0.1008795555555553188031270166574940582696$
 $\beta_{43}=0.9267290249433106483369626510216075722987$
 $\beta_{51}=-1.764437648774484950984492409473177979061$
 $\beta_{52}=-0.474756557206303164236822915996783772739$
 $\beta_{53}=2.369691846915804789575079569305906277052$
 $\beta_{54}=0.6195023590649833256462357561640554747468$
 $\beta_{61}=-0.080368370789111680412472246275789336523$
 $\beta_{62}=-0.0564906135924470382928821126158819718130$
 $\beta_{63}=0.488285630042796820218631292635299492216$
 $\beta_{64}=0.5057162114816190413438659233992289589771$
 $\beta_{65}=-0.1071428571428571428571428571428571428569$

Коэффициенты для непрерывного метода 3-го порядка

$p_{11}=0.4195946799873075119058720335388621401299$
 $p_{12}=-0.7335246808281686702714286385831914932339$
 $p_{13}=0.2677412801216726048848534454489047125024$
 $p_{14}=-0.03417965006992312693176908668036469592144$
 $p_{21}=0.2547354250795645221587858725988736232911$
 $p_{22}=-0.5928167839085814444337143623649121710159$
 $p_{23}=0.2900798161885619002781701285533800486149$
 $p_{24}=-0.008489070951992016296123751403223472703150$
 $p_{31}=1.051349424207045854163844526228495743638$
 $p_{32}=-1.025245760555795036484891571562738176784$
 $p_{33}=0.4239971915887983504197795780790293924265$
 $p_{34}=0.03818477480274765211989875989051253293510$
 $p_{41}=-0.8887851816599769967853215338953422550436$
 $p_{42}=3.271289083573963740495968694592938222440$
 $p_{43}=-1.879097079219423171177154225473452234601$
 $p_{44}=0.002309388787055468810372988175085226182488$
 $p_{51}=-0.0007361278248275885787333063783016651992557$
 $p_{52}=-0.5586980766585664375101099181839054056919$
 $p_{53}=0.2721840821423380149400326795532119142342$
 $p_{54}=0.1801072651981988682916676878661380138000$
 $p_{61}=0.1638417802108866971355524079074124131835$
 $p_{62}=-0.3610037816228521517958242038981909757140$
 $p_{63}=0.6250947091780523006543183938389261668234$
 $p_{64}=-0.1779327077660868459940465978481476042930$

2.5. RODAS5

Это метод Розенброка из [9], основанный на тех же формулах (9), что и предыдущий. Он 8-ми стадийный, вложенный, жёстко точный. Построение данного метода можно найти в [10]. При этом:

$$\gamma_{ii} = \gamma, \gamma_{ij} = \beta_{ij} - \alpha_{ij},$$

$$\hat{b}_i = \beta_{7i}, b_7 = \gamma \text{ — вложенный метод 4-го порядка,}$$

$$b_i = \beta_{8i}, b_8 = \gamma \text{ — основной метод 5-го порядка.}$$

Уточнённые параметры даны в таблице 5. Рабочий непрерывный метод построить не получилось.

Таблица 5.

Параметры метода RODAS5	
$\gamma=0.19000000000000000000000000000000$	
$\alpha_{21}=0.38000000000000000000000000000000$	$\beta_{21}=-0.00384213367066316653924755891158$
$\alpha_{31}=0.18998096323048065165930209720647$	$\beta_{31}=-0.06587508126936369036787904015459$
$\alpha_{32}=0.18621536159480624834069790279353$	$\beta_{32}=-0.06331442359835370063212095984541$
$\alpha_{41}=0.083489136955726187158204690432470$	$\beta_{41}=0.53487908306342626417680465966545$
$\alpha_{42}=0.69567870317296510697170912192462$	$\beta_{42}=-0.47157078286588050578677711751138$
$\alpha_{43}=-0.27150977576330429412991381235709$	$\beta_{43}=0.44331311780172184160997245784594$
$\alpha_{51}=0.019749954685320738490462476406881$	$\beta_{51}=0.73026015628341180828986744008974$
$\alpha_{52}=1.1527680537682619629021698267018$	$\beta_{52}=-0.2532267377201464585976956105773$
$\alpha_{53}=-0.58172139560641273372994044079831$	$\beta_{53}=0.37740086754994634597527595020071$
$\alpha_{54}=-0.11569326366863669068176690949660$	$\beta_{54}=-0.098347581382224195667447779713122$
$\alpha_{61}=0.83441493842466974700123546967678$	$\beta_{61}=3.4243826682568670302497950472480$
$\alpha_{62}=1.4341150127667629897852468982053$	$\beta_{62}=-9.0682947038850299925361899111267$
$\alpha_{63}=-2.7463052995987880016901240308337$	$\beta_{63}=3.6910912705994601310908139407904$
$\alpha_{64}=4.63635670098841300000000000000000$	$\beta_{64}=5.9760755264645538704774440136053$
$\alpha_{65}=-3.1585813525810578672248231125632$	$\beta_{65}=-3.2132547614358500001592354994989$
$\alpha_{71}=3.4243826682568668406794981276729$	$\beta_{71}=0.3754294878045746740337485322662$
$\alpha_{72}=-9.0682947038850302879842814456849$	$\beta_{72}=-0.781123376542690E-16$
$\alpha_{73}=3.6910912705994596427861075132406$	$\beta_{73}=-0.1985496379538313447723579795563$
$\alpha_{74}=5.9760755264645538521206406306885$	$\beta_{74}=1.3845456784046259182088969764613$
$\alpha_{75}=-3.2132547614358500195546952967799$	$\beta_{75}=-0.6985967635977040646521761136264$
$\alpha_{76}=0.18999999999999997195273047086282$	$\beta_{76}=-0.05282876465766510470577376127586$
$\alpha_{81}=0.37542948780457440998356143171437$	$\beta_{81}=0.37542948780457467127309153966693$
$\alpha_{82}=-0.46222173916448809079146613083026E-16$	$\beta_{82}=-0.71947341385872637662088537334586E-16$
$\alpha_{83}=-0.19854963795383124505629117057112$	$\beta_{83}=-0.19854963795383134239547860424177$
$\alpha_{84}=1.3845456784046262637970502755724$	$\beta_{84}=1.3845456784046259068336921183261$
$\alpha_{85}=-0.69859676359770365574433060778458$	$\beta_{85}=-0.69859676359770406041453472873944$
$\alpha_{86}=-0.052828764657665387985155187551153$	$\beta_{86}=-0.051105182319437447937208832186395$
$\alpha_{87}=0.189999999999999966122733917506885$	$\beta_{87}=-0.00172358233822765541222010695281$

2.6. MyRosenbrock

Это авторский метод, основанный на тех же формулах (9), что и предыдущий.

Метод 4-х стадийный, имеет 4-й порядок и он жёстко точный. При этом:

$$\gamma_{11} = \gamma_{22} = \gamma_{33} = \gamma_{44} = \gamma$$

Уточнённые параметры даны в таблице 6. В ней так же приводится непрерывный метод, основанный на формуле (4).

Таблица 6.

Параметры метода MyRosenbrock
$\gamma=0.2204284102592123180415434126292381629422$
$\alpha_{21}=-0.5205432483291658413100814077709160752376$
$\alpha_{31}=0.6075130779487283175846362337845170732959$
$\alpha_{32}=0.1009846139765253545887270473713338894896$
$\alpha_{41}=0.1641108001779867014074129836895915640195$
$\alpha_{42}=0.1293432375977119743143904143048741327283$
$\alpha_{43}=0.7065459622243013242781966020055343032522$
$\gamma_{21}=1.041916673708566646332986903249560906166$
$\gamma_{31}=-0.01906306867082466862784767220621635695740$
$\gamma_{32}=-0.4883505673094258925645673717663805516965$
$\gamma_{41}=0.3208618397035608796737063652926844741367$
$\gamma_{42}=0.02205957636947700893965888505141667291981$
$\gamma_{43}=-0.5633498263322502066549086629733393099986$
$b_1=0.4849726398815475810811193489822760381562$
$b_2=0.1514028139671889832540492993562908056481$
$b_3=0.1431961358920511176232879390321949932536$
$b_4=0.2204284102592123180415434126292381629422$
Коэффициенты для непрерывного метода 3-го порядка
$p_{11}=1.614220168082677875270156338410046476717$
$p_{12}=-1.773522416520713007296954629873264838965$
$p_{13}=0.6442748883195827131079176404454944004042$
$p_{21}=-0.7730850179266677645012163439058016182438$
$p_{22}=2.000378477754902478764580585880475653431$
$p_{23}=-1.075890645861045731009314942618383229539$
$p_{31}=-0.1016288971935796221654533100265442181350$
$p_{32}=0.6328462020633125972007704371496734160304$
$p_{33}=-0.3880211689776818574120291880909342046418$
$p_{41}=0.2604937470375695113965133155222993596616$
$p_{42}=-0.8597022632975020686683963931568842304964$
$p_{43}=0.8196369265191448753134264902638230337770$

3. Тестирование

В целях проведения тестирования была написана специальная программа. Программа позволяет получать экстраполяционное решение на различных сетках, решение на основе контроля погрешности, сравнивать решения, строить графики и фазовые портреты, а так же вычислять порядок и тестировать методы.

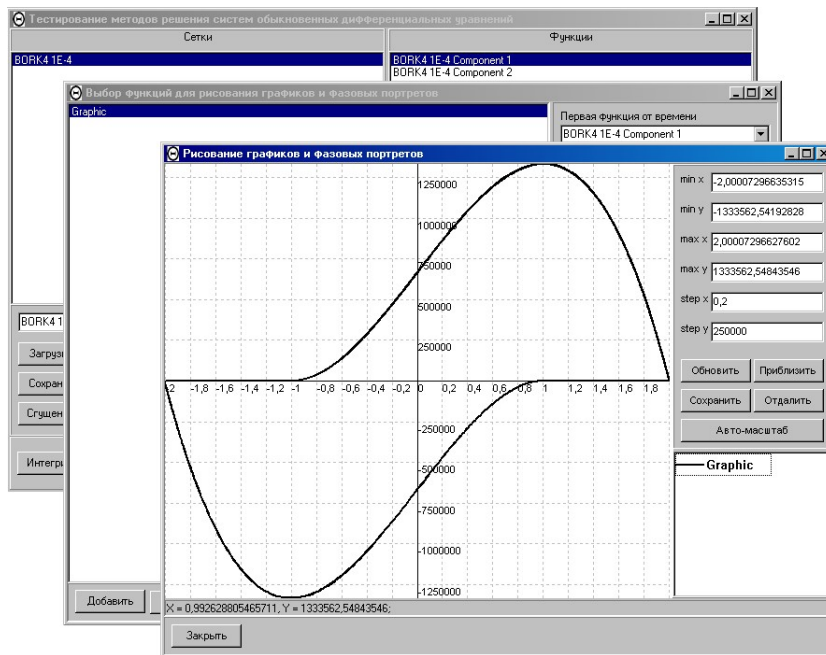


Рисунок 2. Программа для тестирования численных методов решения ОДУ

В ней реализовано около 130 численных методов.

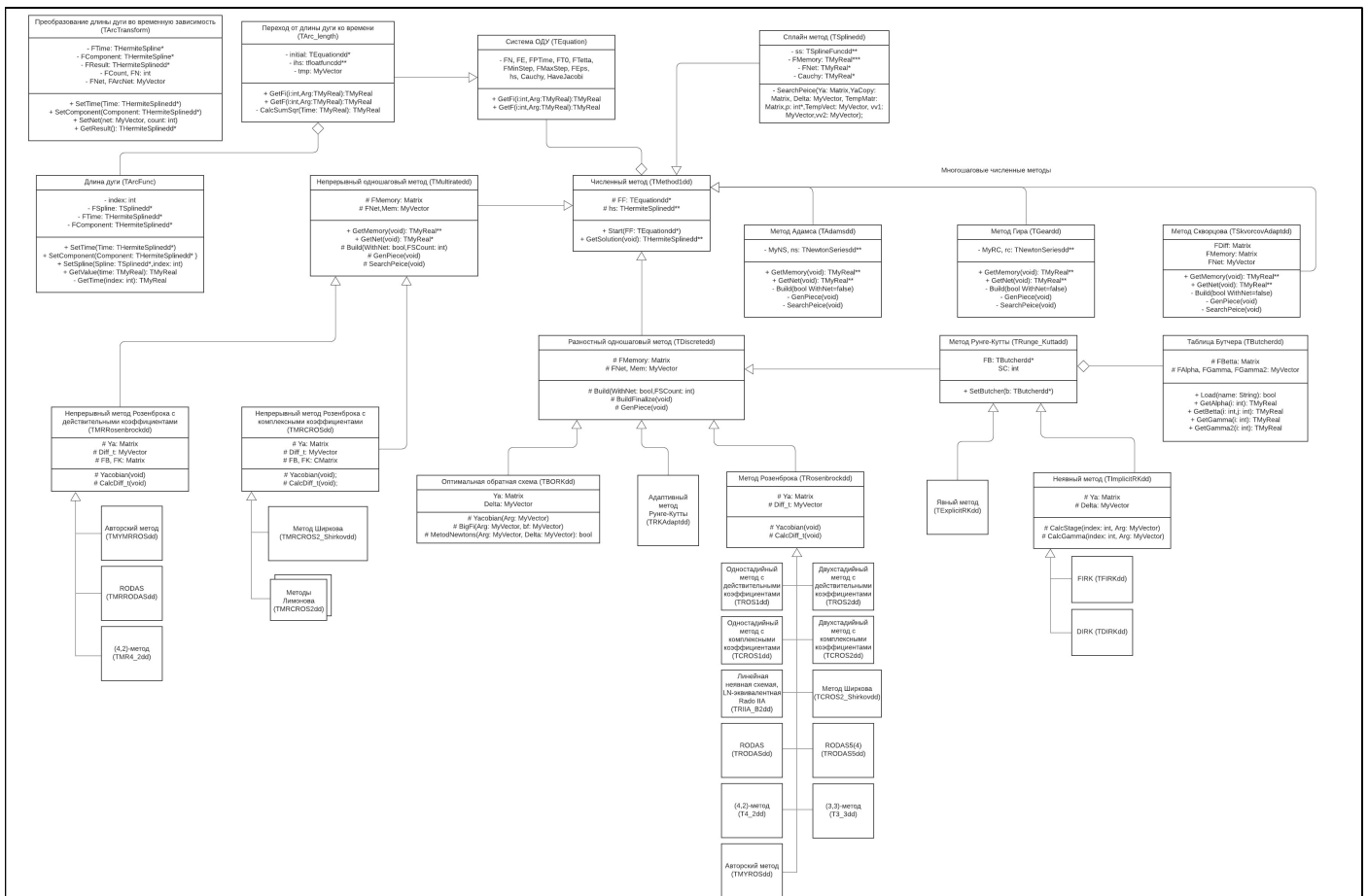


Рисунок 3. UML диаграмма классов численных методов решения ОДУ

Все тесты проводились при повышенной вычислительной точности (38-39 цифр).

3.1. Выбранные методы

Коэффициенты всех методов были уточнены до 30 и более значащих десятичных цифр, и все тестируемые методы держат свой порядок на нежёстких задачах при данной точности. Для тестирования были выбраны следующие методы:

- Multirate (4,2) — непрерывный на основе 4-х стадийного с 2-мя вычислениями правой части метода Новикова Е.А. [6] 4-го порядка (3-й для непрерывного);
- MRCROS2_1 — непрерывный на основе двухстадийного L1-устойчивого метода Лимонова А. Г. [7] с комплексными коэффициентами 4-го порядка (3-й для непрерывного);
- MRCROS2_Optimal — непрерывный на основе двухстадийного оптимально затухающего метода Ширкова П.Д. [8] из статьи 1992 года с комплексными коэффициентами 4-го порядка (3-й для непрерывного);
- MRROs — непрерывный жёстко точный 4-х стадийный A-устойчивый метод Власова С.А. 4-го порядка (3-й для непрерывного);
- MRRODAS — непрерывный жёстко точный 6-ти стадийный вложенный A-устойчивый метод Розенброка 4-го порядка (3-й для вложенного и непрерывного) (V.Savcenco [5]);
- RODAS5 — жёстко точный 8-ми стадийный вложенный A-устойчивый метод Розенброка, порядок 5(4-й для вложенного) (Giovanna A. Di Marzo [10]), с интерполяцией Ньютона 4-й степени по пяти ближайшим точкам 5-го порядка без разрывов;
- GearAdapt — многошаговый метод Гира [11] на основе формул дифференцирования назад с разгоном от 1-го до 4-го порядка, с интерполяцией Эрмита 3-й степени по двум ближайшим точкам 4-го порядка без разрывов;
- SkvorcovAdapt — явный многошаговый адаптивный метод с разгоном от 1-го до 5-го порядка (Скворцов Л.М. [12]), с интерполяцией Эрмита 5-й степени по трем ближайшим точкам 6-го порядка без разрывов;
- ESDIRK86 — классический метод, основанный на 9-ти стадийном однократно диагонально-неявном методе Рунге-Кутты из статьи Скворцова Л.М. [13] 6-го порядка и интерполяции Ньютона 5-й степени по шести ближайшим точкам 6-го порядка или интерполяции Эрмита 5-й степени по трем ближайшим точкам 6-го порядка без разрывов;
- Lobatto IIIС8 — классический метод, основанный на полностью неявном 5-ти стадийном методе Рунге-Кутты Lobatto IIIС8 [9] и интерполяции Ньютона 7-й степени по восьми ближайшим точкам 8-го порядка или интерполяции Эрмита 7-й степени по четырем ближайшим точкам 8-го порядка без разрывов;
- RADAU IIA15 — классический метод, основанный на полностью неявном 8-ми стадийном методе Рунге-Кутты RADAU IIA15 [9] и интерполяции Эрмита 15-й степени по восьми ближайшим точкам 16-го порядка без разрывов;
- Spline7 — авторский непрерывный коллокационный A-устойчивый метод (Власов С.А. [14]), сплайн 7-й степени, который имеет 8-й порядок;
- RPIA_B2 — линейно неявная схема LN-эквивалентная неявному методу RadauIIA (Семейство Б) 3-го порядка (Зубанов А.М. [15]), с интерполяцией Ньютона 2-й степени по трем ближайшим точкам 3-го порядка без разрывов;
- BORK4 — L4-устойчивый обратный оптимальный неявный метод Рунге-Кутты из диссертации Пошивайло И.П. [16], порядок 4, с интерполяцией Эрмита 3-й степени по двум ближайшим точкам 4-го порядка без разрывов;

3.2. Стратегия выбора шага

Размер шага выбирается следующим образом:

$$h_{i,0} = h_{i-1} \cdot p \sqrt{\frac{Tol}{|err_{i-1}|}} \cdot kof, \quad (10)$$

где h_{i-1} — предыдущий шаг, $|err_{i-1}|$ — абсолютная погрешность на предыдущем шаге, Tol — задаваемая погрешность, p — порядок метода, $kof \leq 0,9$ — коэффициент, который в случае интерполяции решения позволяет дополнительно дробить шаг для методов высокого порядка.

Далее оценивается текущая погрешность либо по правилу Рунге, либо способом, предусмотренным решаемым методом, и проверяется условие:

$$|err_{i,0}| < Tol.$$

Если оно не выполняется, то текущий шаг отбрасывается, и производятся вычисления для уменьшенного шага до тех пор, пока условие не выполнится, в соответствии с формулой:

$$h_{i,j} = h_{i,j-1} \cdot p \sqrt{\frac{Tol}{|err_{i,j}|}} \cdot kof, \quad (11)$$

где j — номер попытки.

В случае, когда решение интерполируется и используется метод порядка больше седьмого, имеет смысл дополнительно дробить шаг на число равное количеству интерполируемых точек, с помощью коэффициента kof в формулах выше.

3.3. Задача Капса

Это автономная сверхжесткая (из-за параметра) тестовая задача [17], содержащая две компоненты решения и не имеющая запаздываний:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -(\mu + 2) \cdot x_1 + \mu \cdot x_2^2 \\ \dot{x}_2 = x_1 - x_2 - x_2^2 \end{cases}, t \in (0, T] \quad (12)$$

где $\mu = 10^{12}$, $T = 1$.

Начальная задача Коши:

$$\begin{cases} x_1(0) = 1 \\ x_2(0) = 1 \end{cases}. \quad (13)$$

Задача Капса имеет плавное решение $x_1(t) = \exp(-2t)$, $x_2(t) = \exp(-t)$, не зависящее от параметра жесткости μ (собственные значения матрицы Якоби при больших μ примерно равны $-\mu$, -1).

В [17] отмечается, что данная задача — это пример сингулярно возмущенной задачи Коши.

Несмотря на то, что задача Коши не имеет запаздываний, было принято решение интерполировать функции компонент решения, получаемые в разностном виде, чтобы посмотреть точность интерполяции. Следует так же заметить, что матрица Якоби для методов Розенброка считается аналитически, то есть точно. В качестве оценки погрешности методов была выбрана норма C : для разностей приближенного решения и точного решения (для двух компонент) в точках на всем отрезке интегрирования (от 0 до 1) с постоянным интервалом (0,01). Количество шагов у всех методов ограничено одним миллионом. Результаты тестирования показаны на рисунках 4, 5, 6, 7.

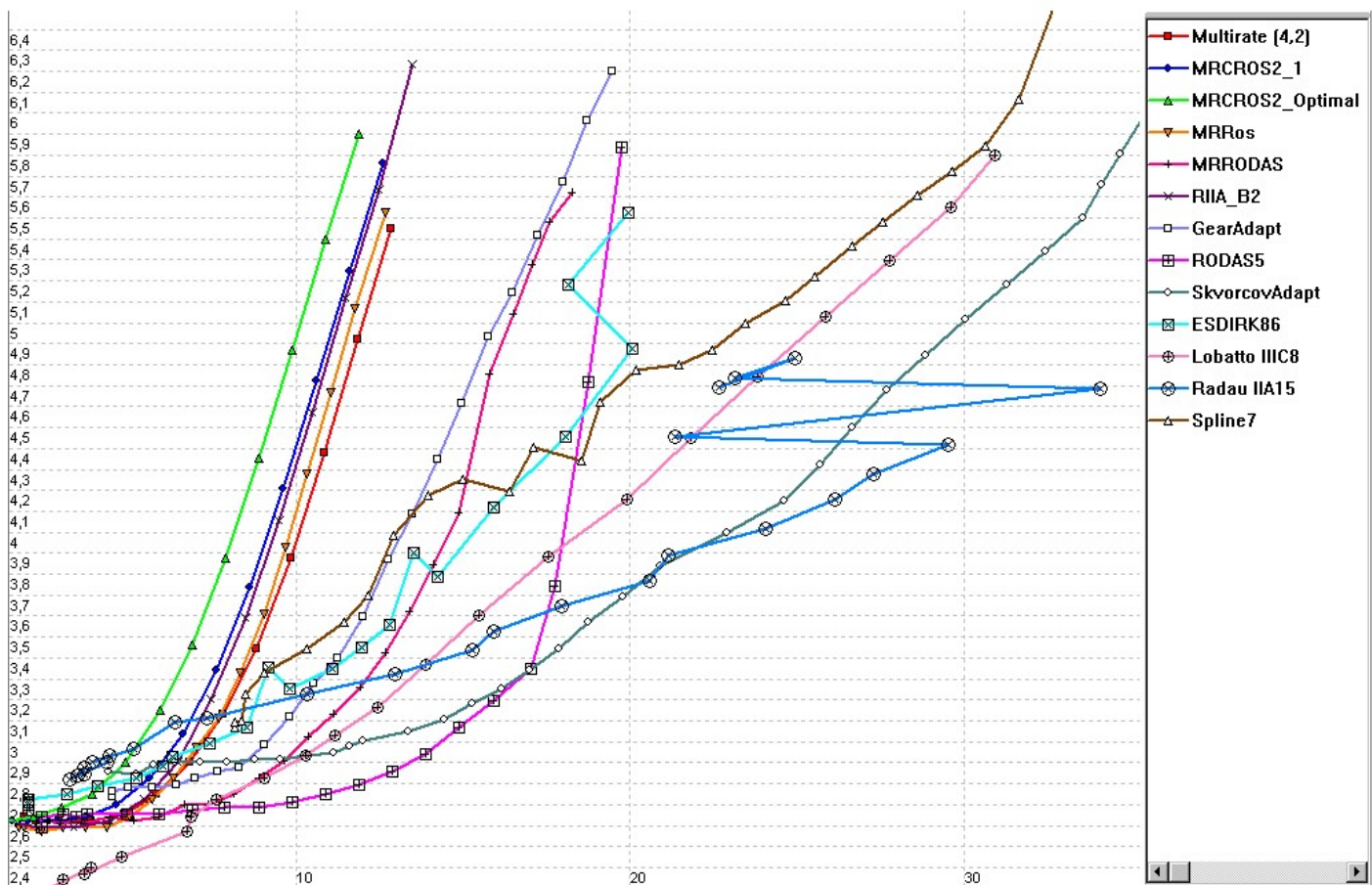


Рисунок 4. Достигнутая точность — трудоёмкость.

Точность на рисунках отображает количество значащих цифр, а трудоёмкость считается как $\log_{10}(time)$, где $time$ — время выполнения программы в миллисекундах.

BORK4 не показан на рисунках, так как он не справился с задачей, не смотря на то, что используется модифицированный метод Ньютона с дроблением шага. Причина в слишком быстрых изменениях нелинейных функций системы, которую приходится решать на итерациях Ньютона. Данный метод работает на менее жёсткой задаче с параметром $\mu = 10^6$. При текущей же жёсткости работает BORK3 и BORK2 [16], но они имеют 3-й и 2-й порядок соответственно.

Неожиданный результат получился у RODAS5: до точности в 15 значащих цифр он имеет 5-й порядок, а после понижается до первого, причем только по первой компоненте решения.

Свою работоспособность показал авторский непрерывный жёстко точный 4-х стадийный А-устойчивый метод Розенброка 4-го порядка для разностного решения и 3-го порядка для интерполяционного.

По результатам тестирования все методы можно разбить на 3 класса точности: те, с помощью которых можно получить решение с инженерной точностью (5-6 значащих цифр), те, которые рассчитаны на получение решения высокой точности (10-12 значащих цифр), и те, которые могут считать со сверх высокой точностью (20-30 значащих цифр). Разбиение выглядит следующим образом:

1. Multirate (4,2), MRCROS2_1, MRCROS2_Optimal, MRRos, RIIA_B2;
2. MRRODAS, GearAdapt, RODAS5, ESDIRK86;
3. SkvorcovAdapt, Lobatto III C8, RADAU IIA15, Spline7.

В классе инженерной точности наилучшее соотношение ($\lg(\|Tol\|) - \lg(\|error\|)$) трудно выявить.

В классе высокой точности наилучшее соотношение ($\lg(\|Tol\|) - \lg(\|error\|)$) у RODAS5.

В классе сверх высокой точности наилучшее соотношение ($\lg(\|Tol\|) - \lg(\|error\|)$) у SkvorcovAdapt, он же и самый точный на данной задаче.

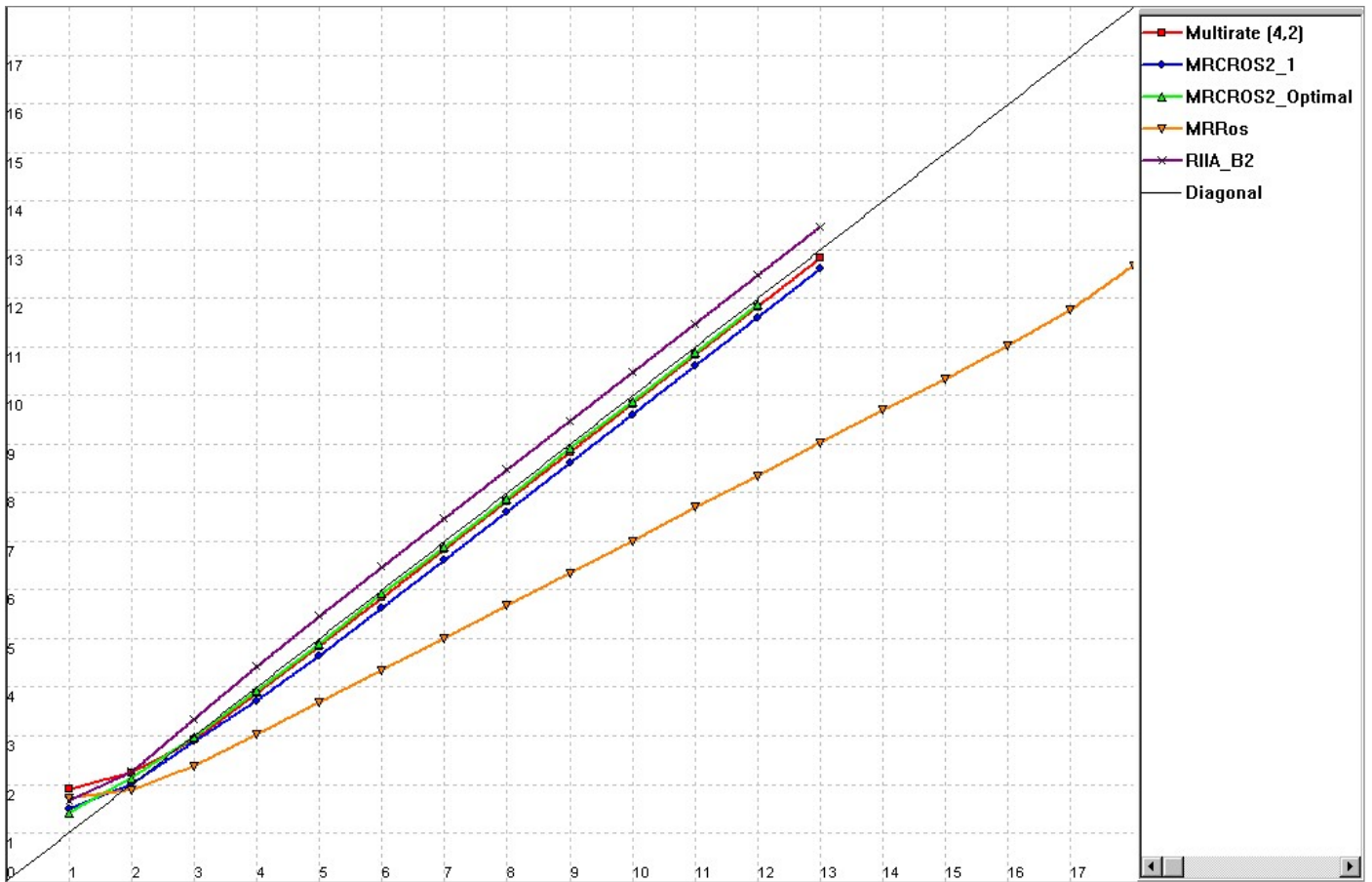


Рисунок 5. Задаваемая точность - достигаемая точность для класса инженерной точности.

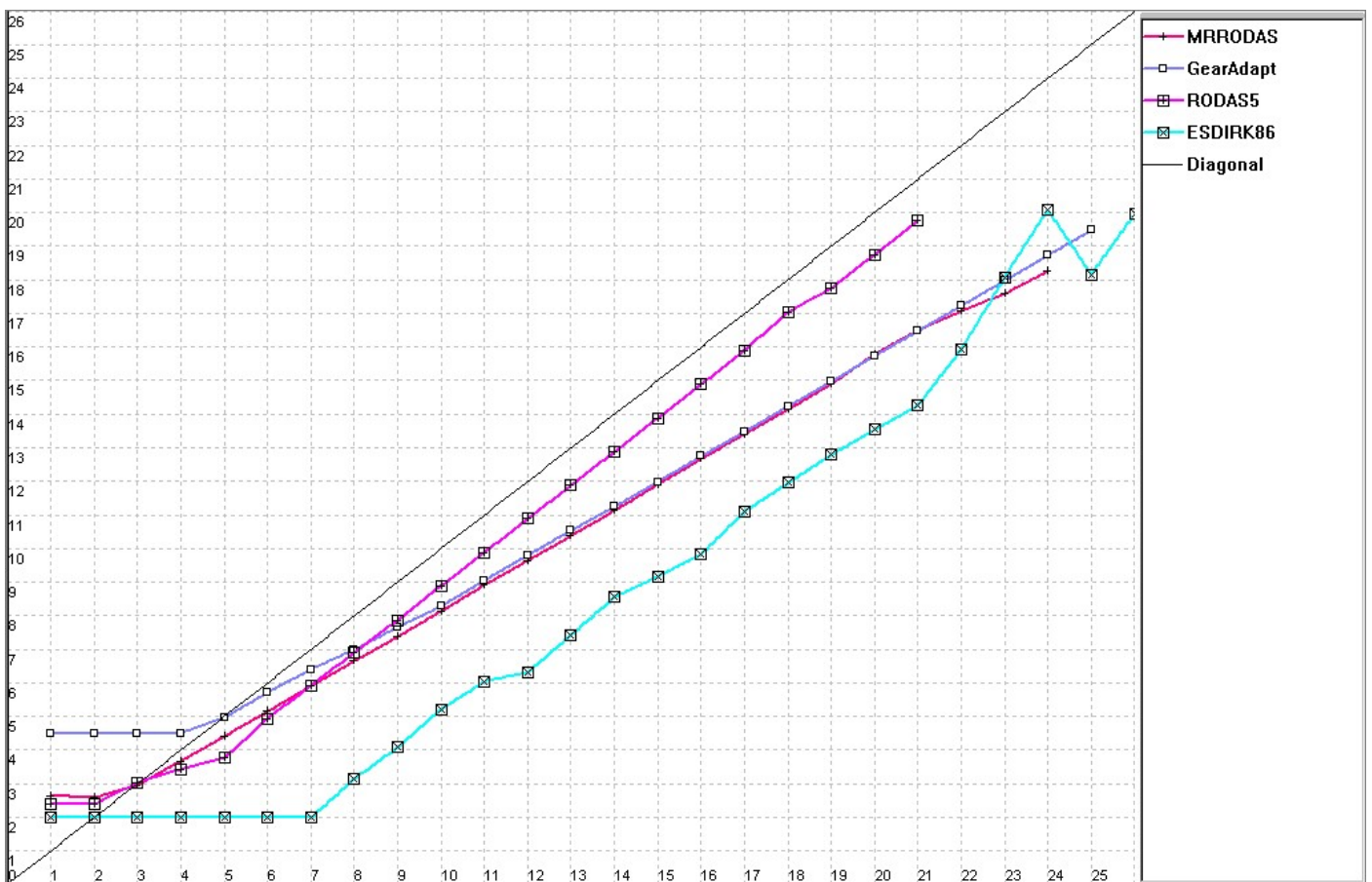


Рисунок 6. Задаваемая точность - достигаемая точность для класса высокой точности.

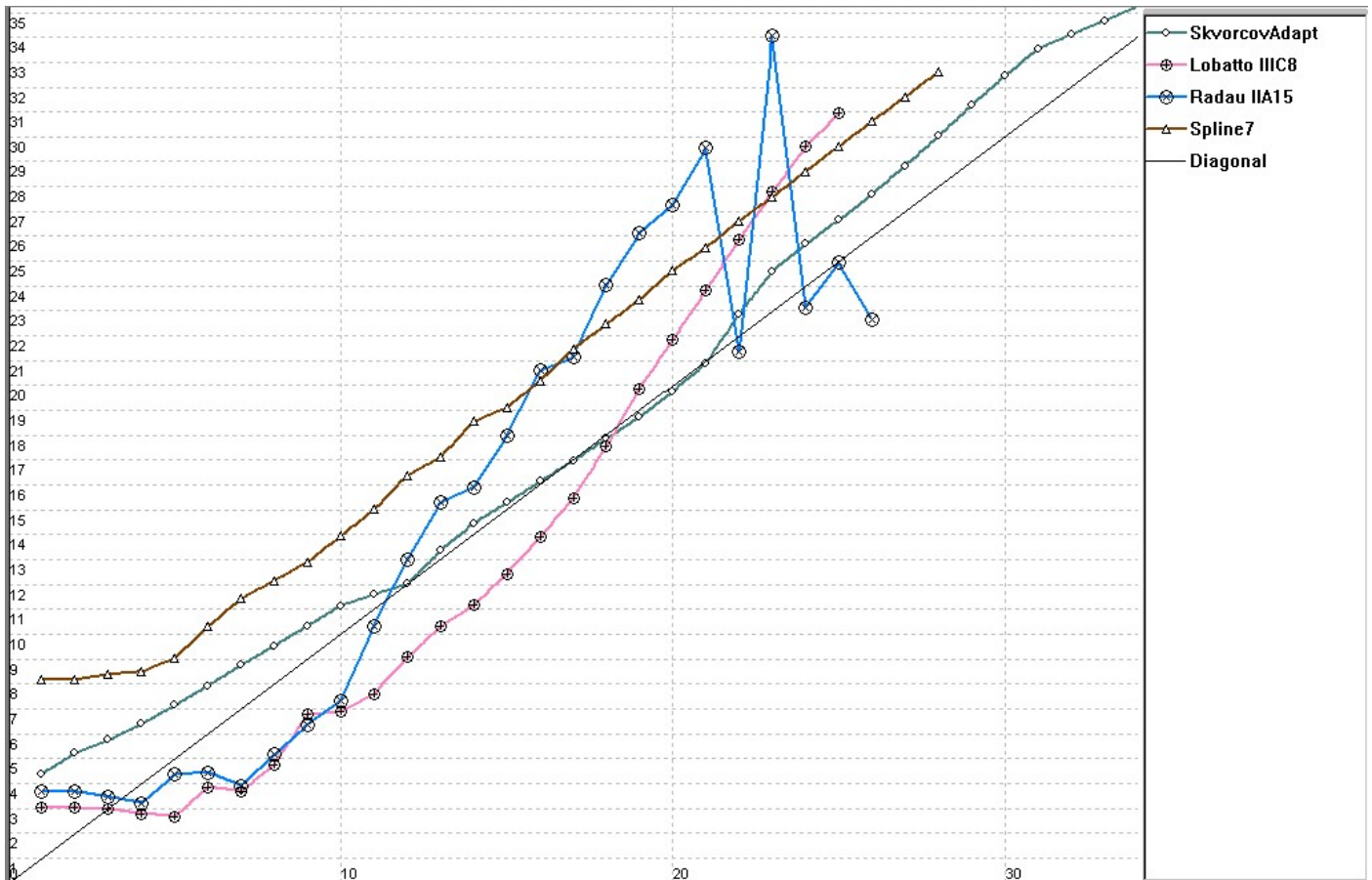


Рисунок 7. Задаваемая точность - достигаемая точность для класса сверх высокой точности.

3.4. Пример Крайсса

Это неавтономная сверхжесткая (из-за параметра) тестовая задача [17], содержащая две компоненты решения и не имеющая запаздываний:

$$\dot{y}(t) = E(t) \cdot \begin{bmatrix} -\varepsilon^{-1} & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot E^{-1}(t) \cdot y(t), \quad 0 < \varepsilon \leq 1, \quad 0 \leq t \leq 3, \quad (14)$$

где $\varepsilon = 10^{-12}$, $E(t) = \begin{bmatrix} \cos(t) & -\sin(t) \\ \sin(t) & \cos(t) \end{bmatrix}$.

Начальная задача Коши:

$$\begin{cases} y_1(0) = 1 \\ y_2(0) = 3 \end{cases} \quad (15)$$

Имеет плавное решение, которое почти не зависит от параметра, отвечающего за жесткость.

Задача диссипативна в евклидовой норме, так как матрица $E(t)$ является ортогональной при всех t . Точнее, задача принадлежит и классу $\mathcal{F}_{\nu=-1}$, где $\nu=-1$ — постоянная в одностороннем условии Липшица.

Ван Вельдхейзен ввел класс задач \mathcal{P} , к которому можно отнести и данную задачу [17]. Эти задачи допускают одновременное вхождение в решение медленных и быстрых компонент, содержат малый параметр, позволяющий перейти к произвольно высокой степени жесткости, и имеют зависящие от времени собственные векторы. Вводится данный класс вместе с определением о D-устойчивости.

Эталонное решение было построено явным многшаговым адаптивным методом Скворцова с контролем погрешности $eps = 10^{-29}$. Внешний вид решения показан на рисунке 8.

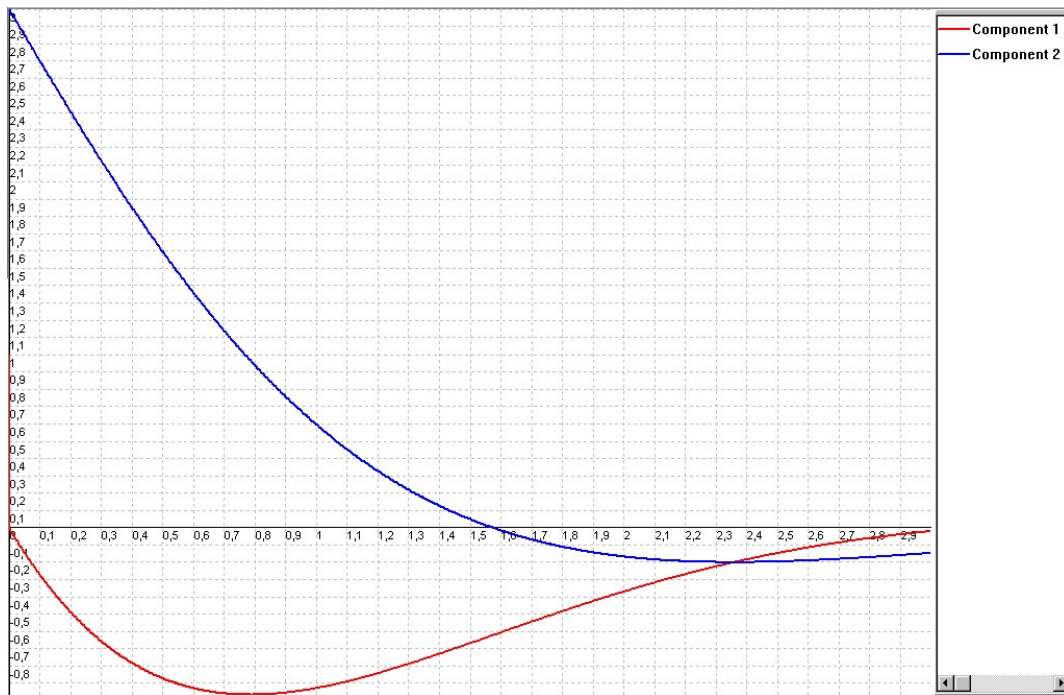


Рисунок 8. Эталонное решение примера Крайсса.

Функции компонент решения, получаемые в разностном виде, были интерполированы, чтобы посмотреть точность интерполяции. Матрица Якоби для методов Розенброка считается аналитически, то есть точно. Так как задача неавтономная, там, где это нужно, была введена дополнительная переменная для создания автономности. В качестве оценки погрешности методов была выбрана норма C : для разностей приближённого решения и полученного эталонного решения (для двух компонент) в точках на всем отрезке интегрирования (от 0 до 3) с постоянным интервалом (0,01). Количество шагов у всех методов ограничено одним миллионом. Результаты тестирования показаны на рисунках 9, 10, 11, 12.

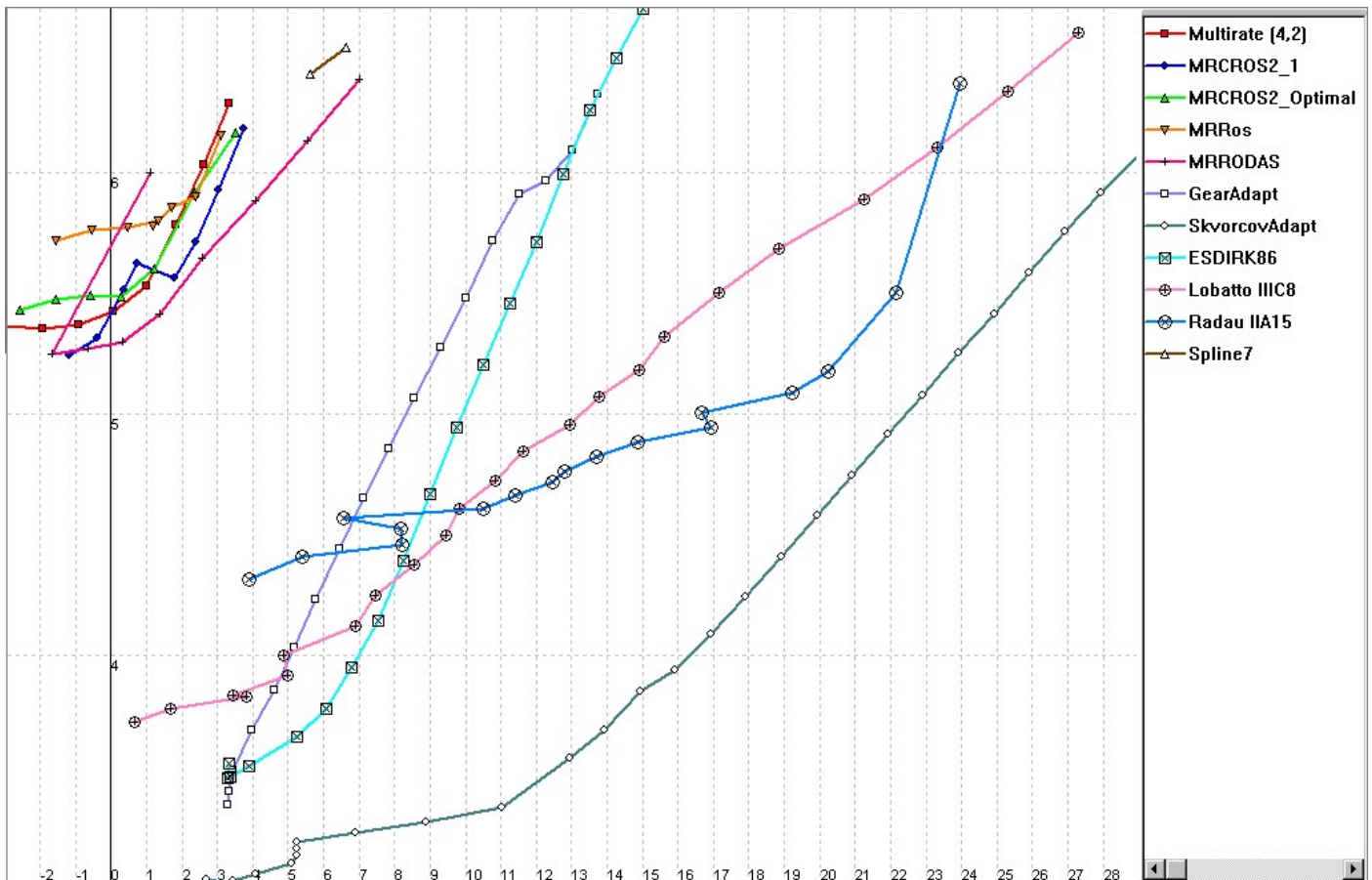


Рисунок 9. Достигнутая точность — трудоёмкость.

BORK4, не показан на рисунках, так как он не справился с задачей. Но он работает на менее жёсткой задаче с параметром $\varepsilon = 10^{-6}$.

R1A_B2, RODAS5 работают, но слишком медленно, поэтому они тоже не показаны на рисунке.

По результатам тестирования все методы можно разбить на 3 класса точности: те, с помощью которых можно получить решение с низкой точностью (2-3 значащие цифры), те, которые рассчитаны на получение решения высокой точности (10-12 значащих цифр), и те, которые могут считать со сверх высокой точностью (20-30 значащих цифр). Разбиение выглядит следующим образом:

1. Multirate (4,2), MRCROS2_1, MRCROS2_Optimal, MRRos, MRRODAS, Spline7.
2. GearAdapt и ESDIRK86.
3. SkvorcovAdapt, Lobatto IIIС8, RADAU IIA15.

Следует отметить, что все методы Розенброка работали на много лучше при меньшей жёсткости с параметром $\varepsilon = 10^{-6}$.

В классе инженерной точности наилучшее соотношение ($\lg(\|Tol\|) - \lg(\|error\|)$) у MRRODAS.

В классе высокой точности наилучшее соотношение ($\lg(\|Tol\|) - \lg(\|error\|)$) у ESDIRK86.

В классе сверх высокой точности наилучшее соотношение ($\lg(\|Tol\|) - \lg(\|error\|)$) у SkvorcovAdapt, он же и самый точный на данной задаче.

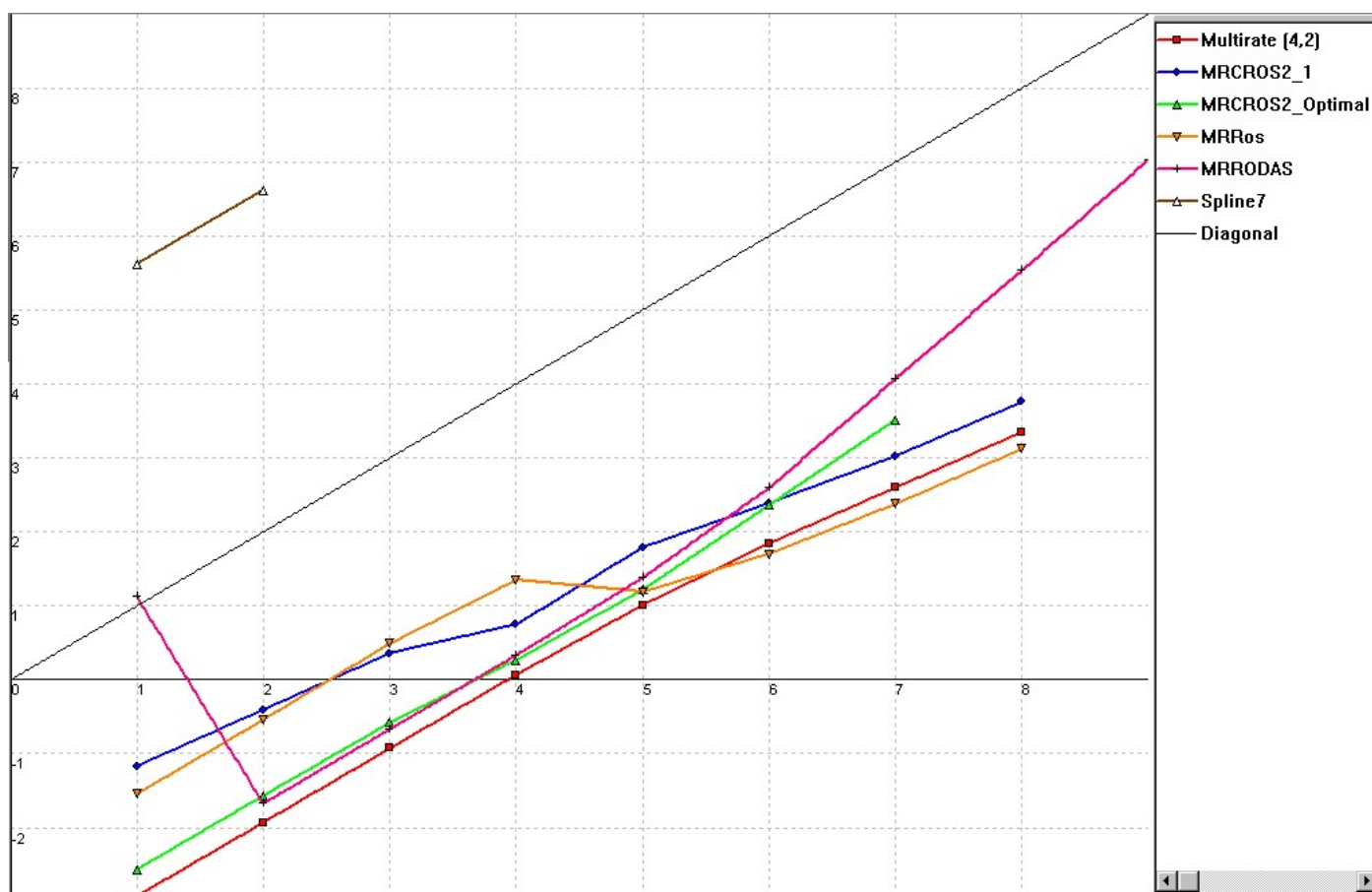


Рисунок 10. Задаваемая точность - достигаемая точность для класса низкой точности.

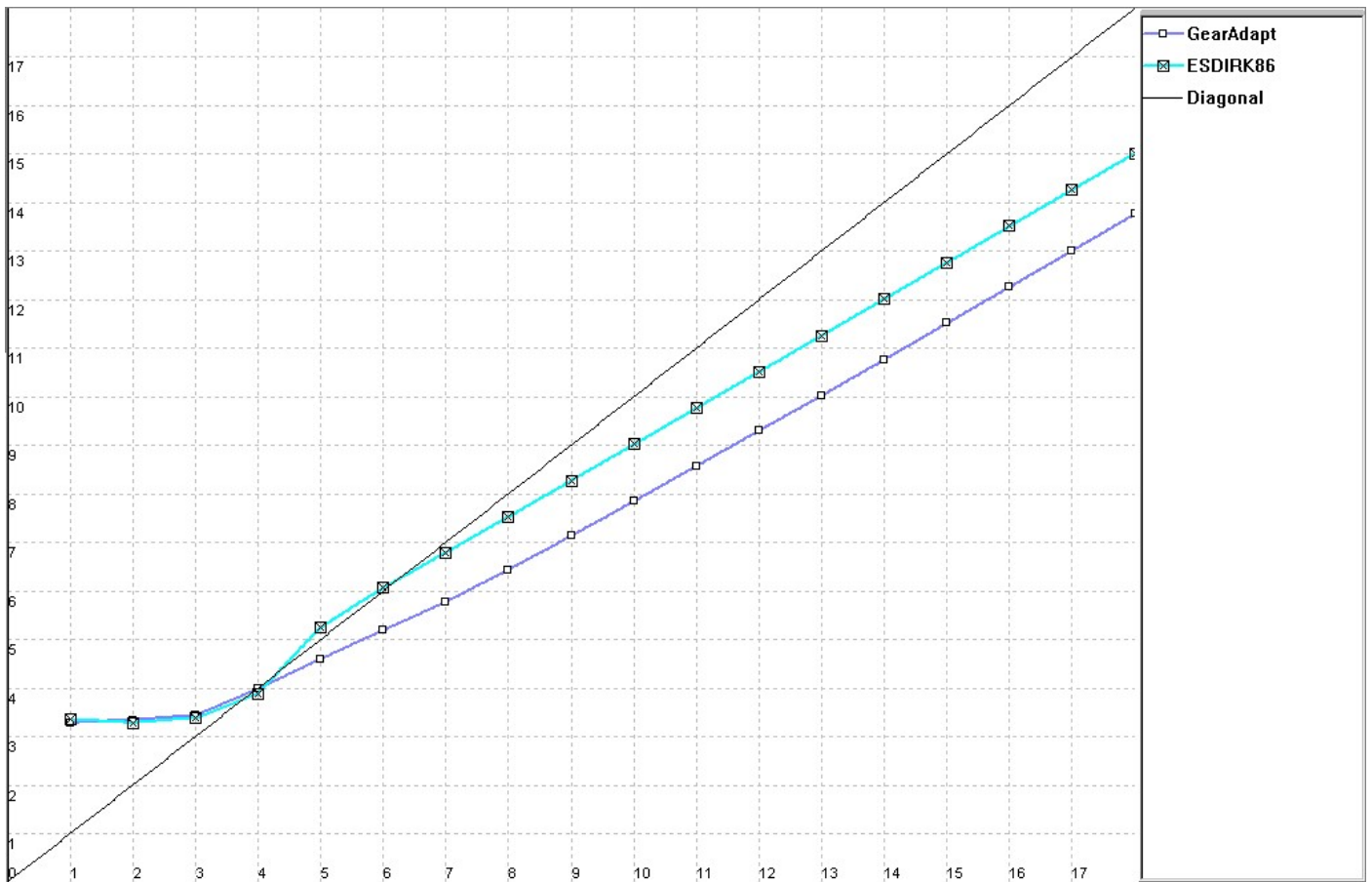


Рисунок 11. Задаваемая точность - достигаемая точность для класса высокой точности.

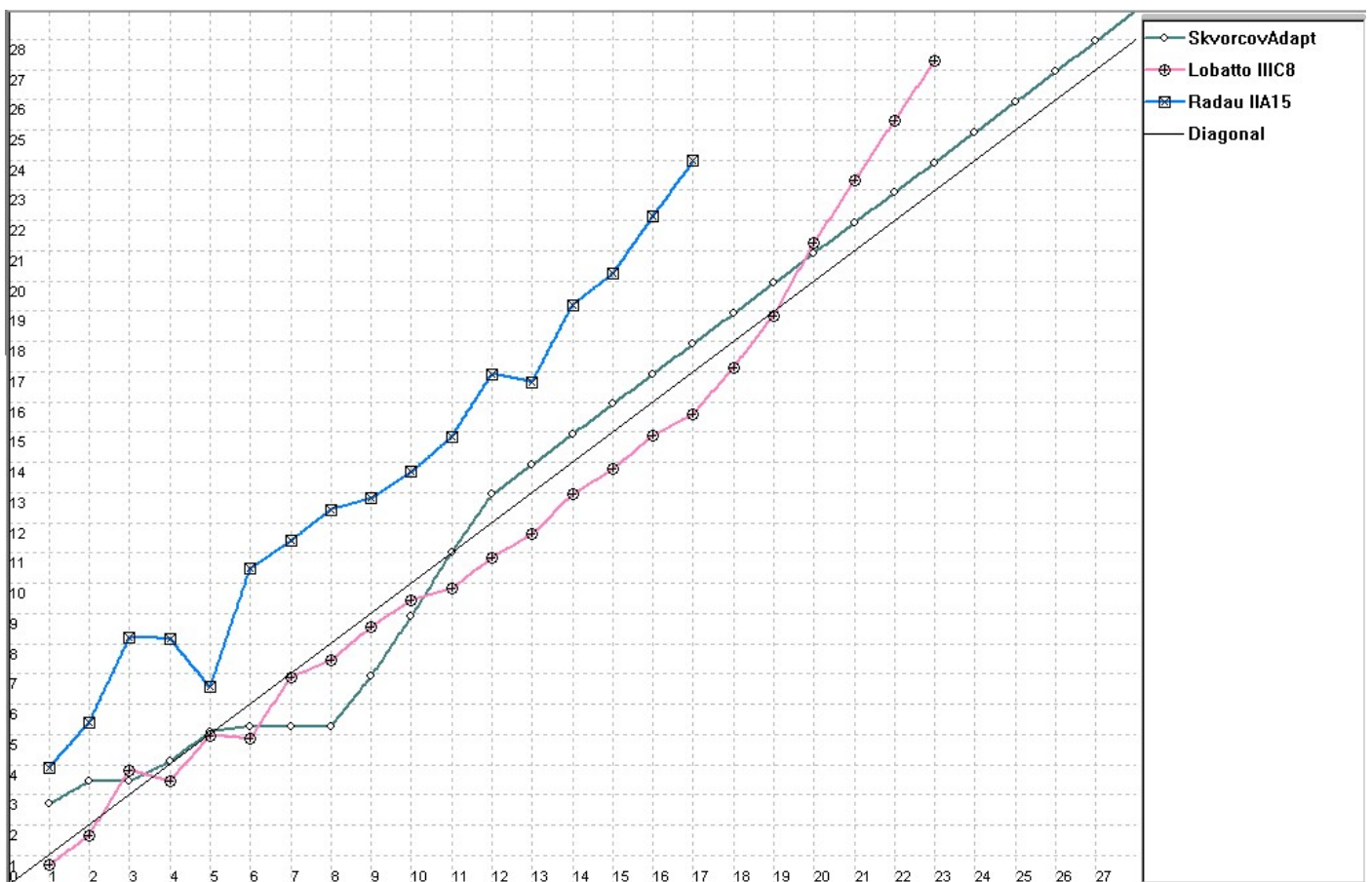


Рисунок 12. Задаваемая точность - достигаемая точность для класса сверх высокой точности.

3.5. Осциллятор ван дер Поля

Это автономная сверхжёсткая (из-за параметра) тестовая задача, содержащая две компоненты решения и не имеющая запаздываний. Осциллятор с нелинейным затуханием подчиняется следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -a \cdot (y \cdot (x^2 - 1) + x) \end{cases}, t \in (0, T] \quad (16)$$

где $a = 10^{12}$, $T = 2$.

Начальная задача Коши:

$$\begin{cases} x(0) = 2 \\ y(0) = 0 \end{cases}. \quad (17)$$

Решение было построено сплайн методом [14] 7-й степени, порядок 8, с контролем погрешности $eps = 10^{-10}$ (Основная сетка: 23 485 узлов).

Ещё два решения были получены на двух сетках, которые сгустили в 2 и в 4 раза, для оценки локальной погрешности.

Правило Рунге-Ричардсона позволяет численно оценить локальную погрешность и порядок метода:

$$p = \log_2 \left| \frac{u_1 - u_2}{u_2 - u_4} \right|,$$
$$error = \frac{u_1 - u_2}{1 - \frac{1}{2^p}}, \quad (18)$$
$$y = u_1 - error,$$

где p — порядок, $error$ — погрешность, u_1, u_2, u_4 — решения на сгущающихся сетках, y — эталонное решение.

Результаты экстраполяции показаны на рисунках 13, 14, 15, 16.

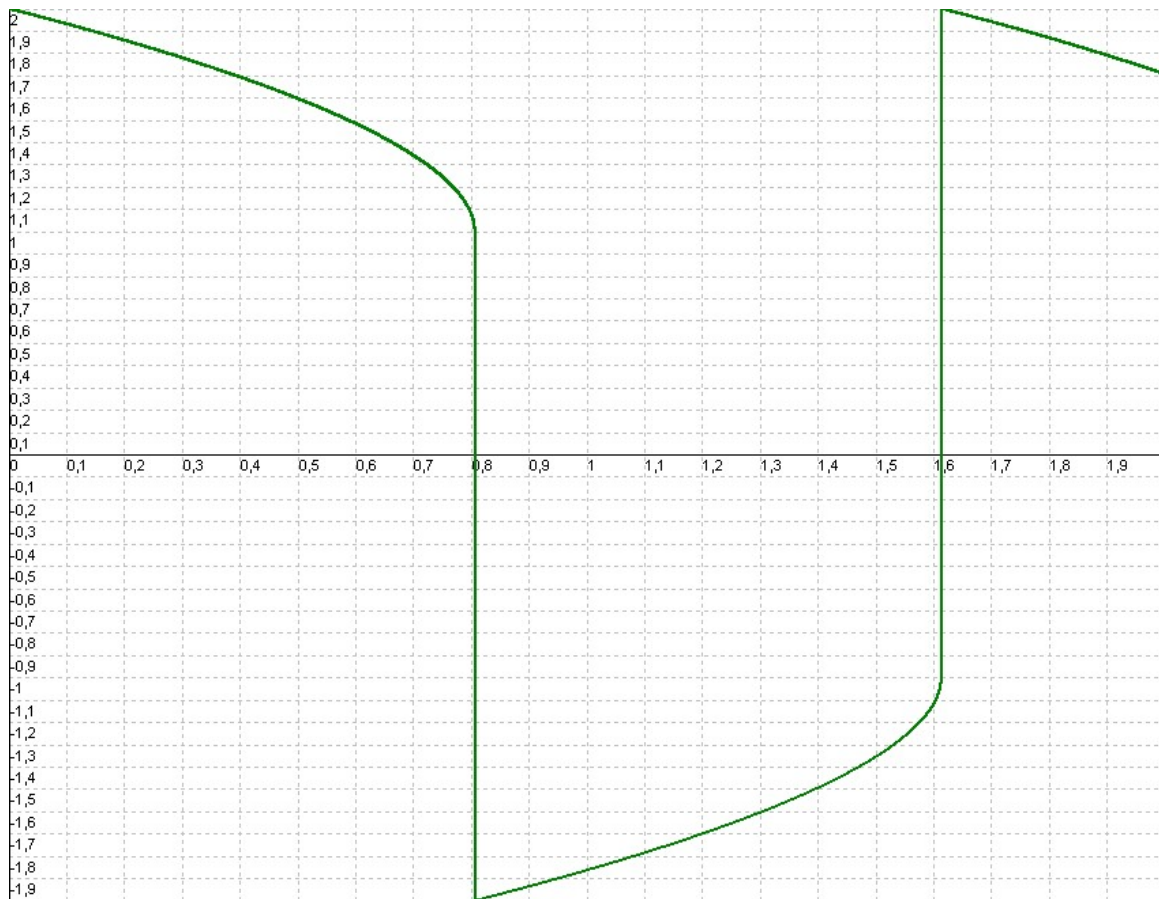


Рисунок 13. Эталонное решение (1-я компонента).

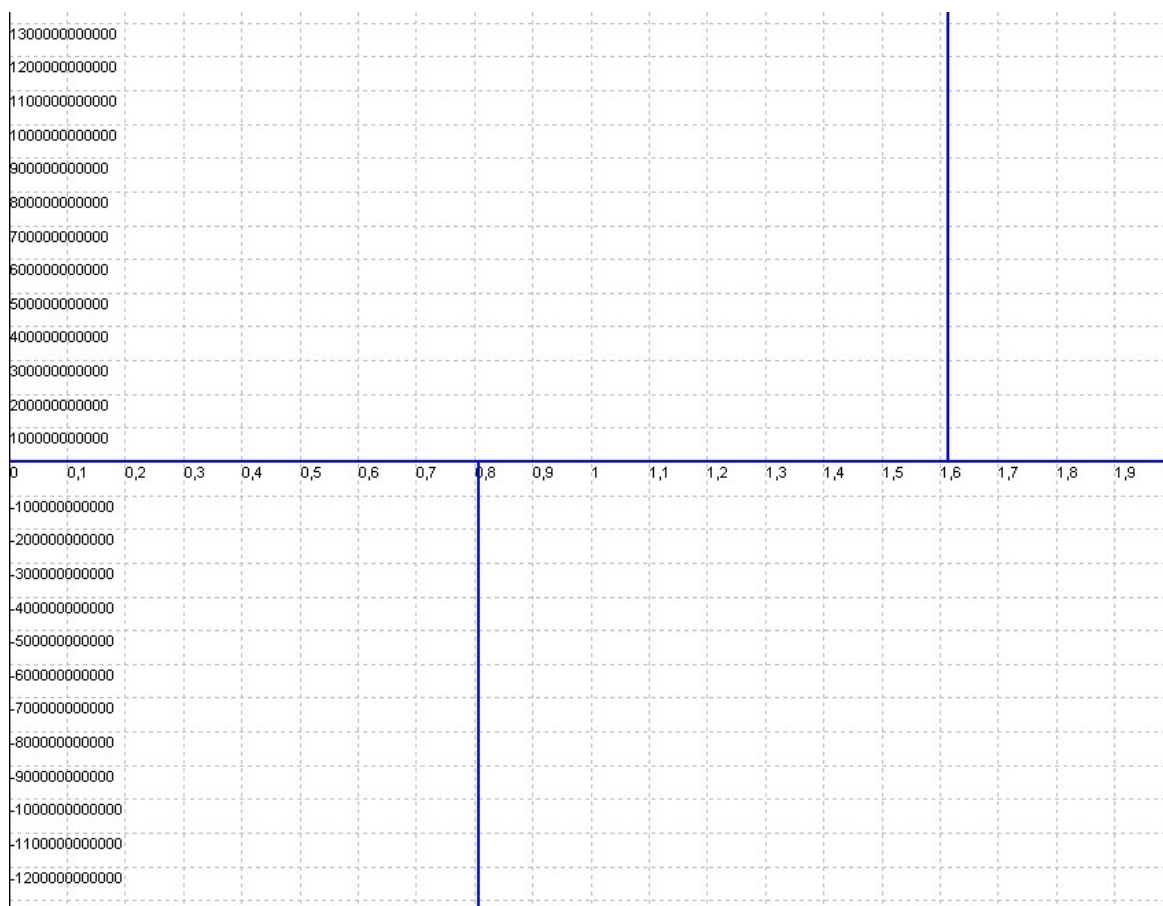


Рисунок 14. Эталонное решение (2-я компонента).

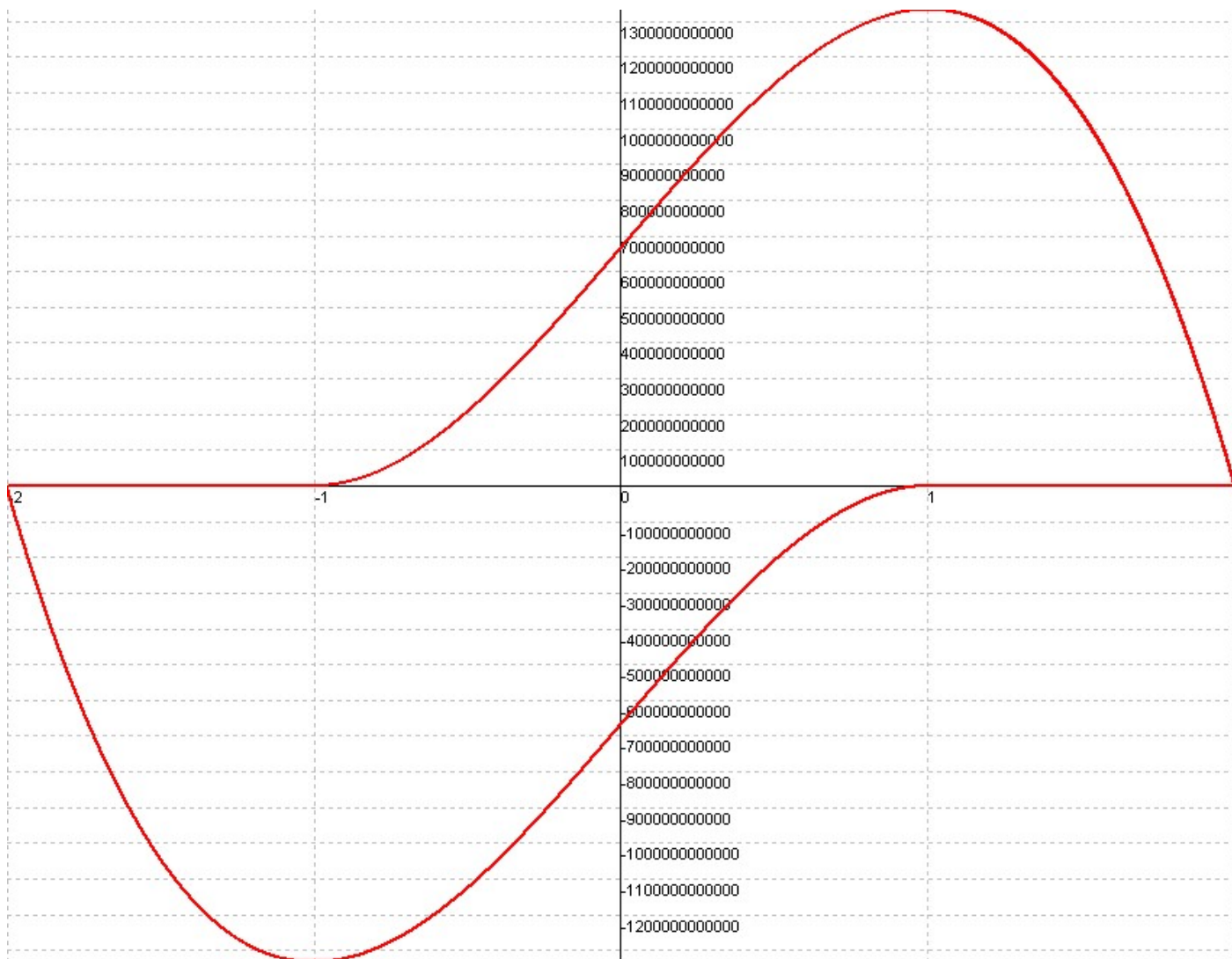


Рисунок 15. Эталонное решение (фазовый портрет).

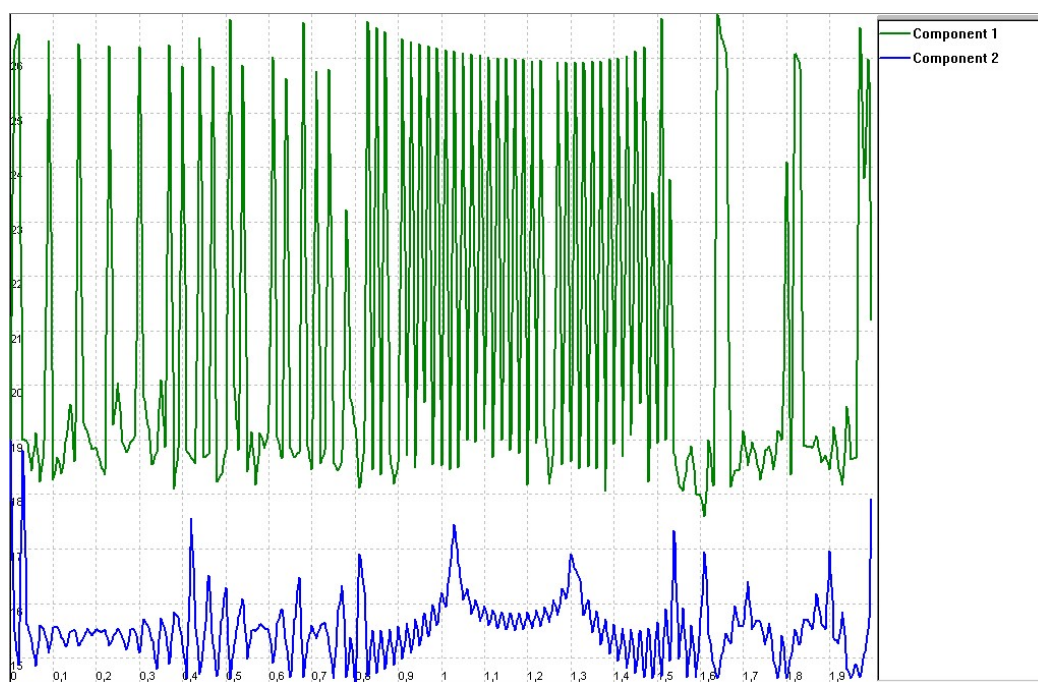


Рисунок 16. Локальная точность ($-\lg(|error|)$).

Функции компонент решения, получаемые в разностном виде, были интерполированы, чтобы посмотреть точность интерполяции. Матрица Якоби для методов Розенброка считается аналитически, то есть точно. В качестве оценки погрешности методов была выбрана норма С: для разностей приближённого решения и полученного эталонного решения (для двух компонент) в точках на всем отрезке интегрирования (от 0 до 2) с постоянным интервалом (0,01). Количество шагов у всех методов ограничено одним миллионом. Результаты тестирования показаны на рисунках 17, 18, 19.

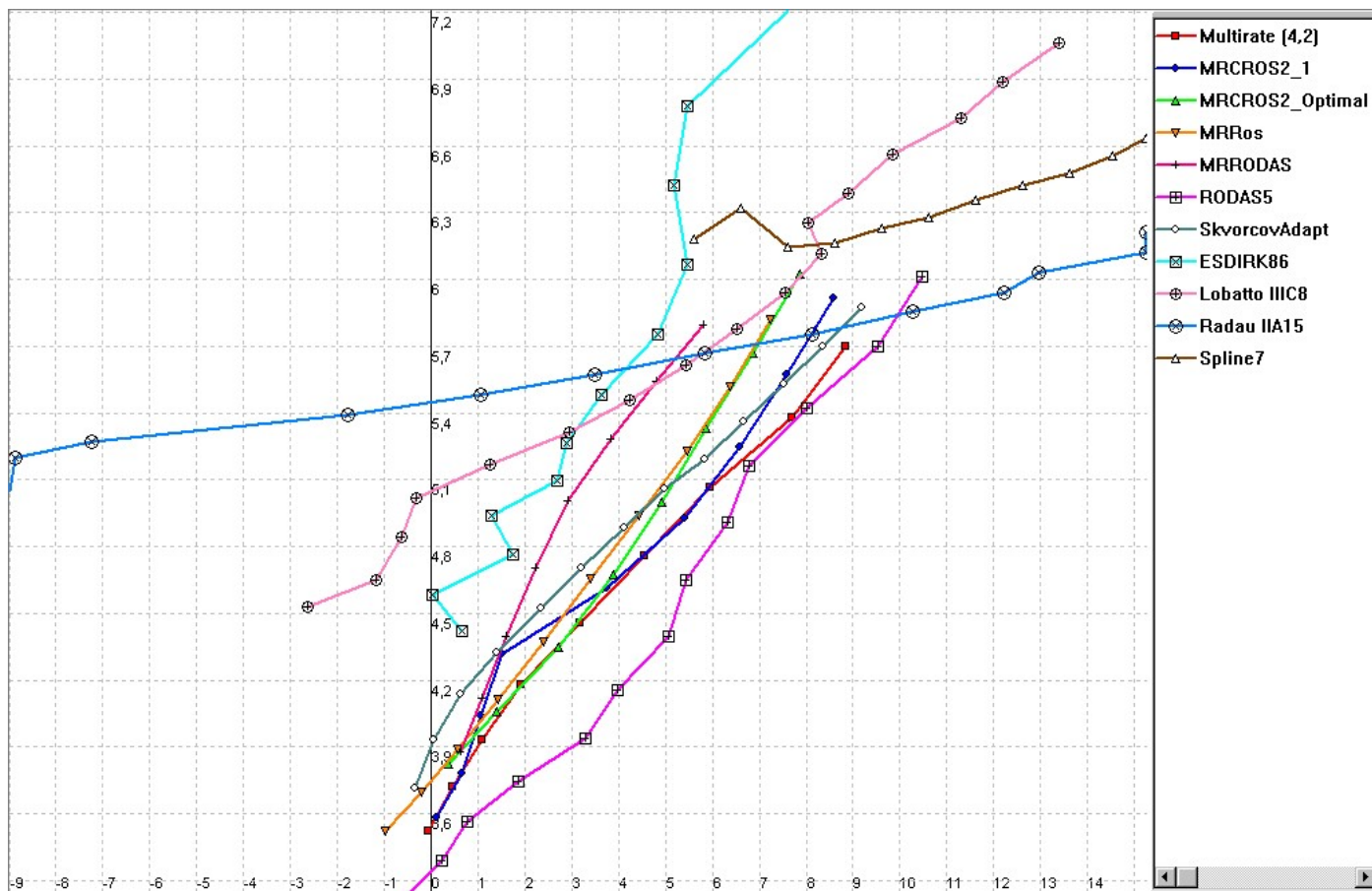


Рисунок 17. Достигнутая точность — трудоёмкость.

BORK4 и RIIA_B2 не показаны на рисунках, так как они не справились с задачей. Но они работают на менее жёсткой задаче ван дер Поля с параметром $a = 10^6$.

Так как решение содержит быстро изменяющиеся компоненты, GearAdapt работает плохо, поэтому он не показан на рисунках.

По результатам тестирования все методы можно разбить на 2 класса точности: те, с помощью которых можно получить решение с инженерной точностью (5-6 значащих цифр), и те, которые рассчитаны на получение решения высокой точности (10-12 значащих цифр). Разбиение имеет следующий вид:

1. Multirate (4,2), MRCROS2_1, MRCROS2_Optimal, MRRos, MRRODAS, SkvorcovAdapt, ESDIRK86;
2. RODAS5, Lobatto III C8, RADAU IIA15, Spline7.

В первом классе наилучшее соотношение ($\lg(\|Tol\|) - \lg(\|error\|)$) у MRCROS2_Optimal.

Во втором классе наилучшее соотношение ($\lg(\|Tol\|) - \lg(\|error\|)$) у RODAS5.

Уравнение ван дер Поля применяется и в физике, и в биологии. Так, например, в биологии создана модель ФитцХью-Нагумо. Данное уравнение также было использовано в сейсмологии для моделирования геологических разломов.

Уравнение ван дер Поля используется в радиотехнике для описания не только триодного генератора, но и генератора на туннельном диоде или транзисторного генератора [18].

Один из ярких примеров: ван дер Поль (в соавторстве с ван дер Марком) обсуждает эффективность применения этого уравнения для описания кардиоритмов.

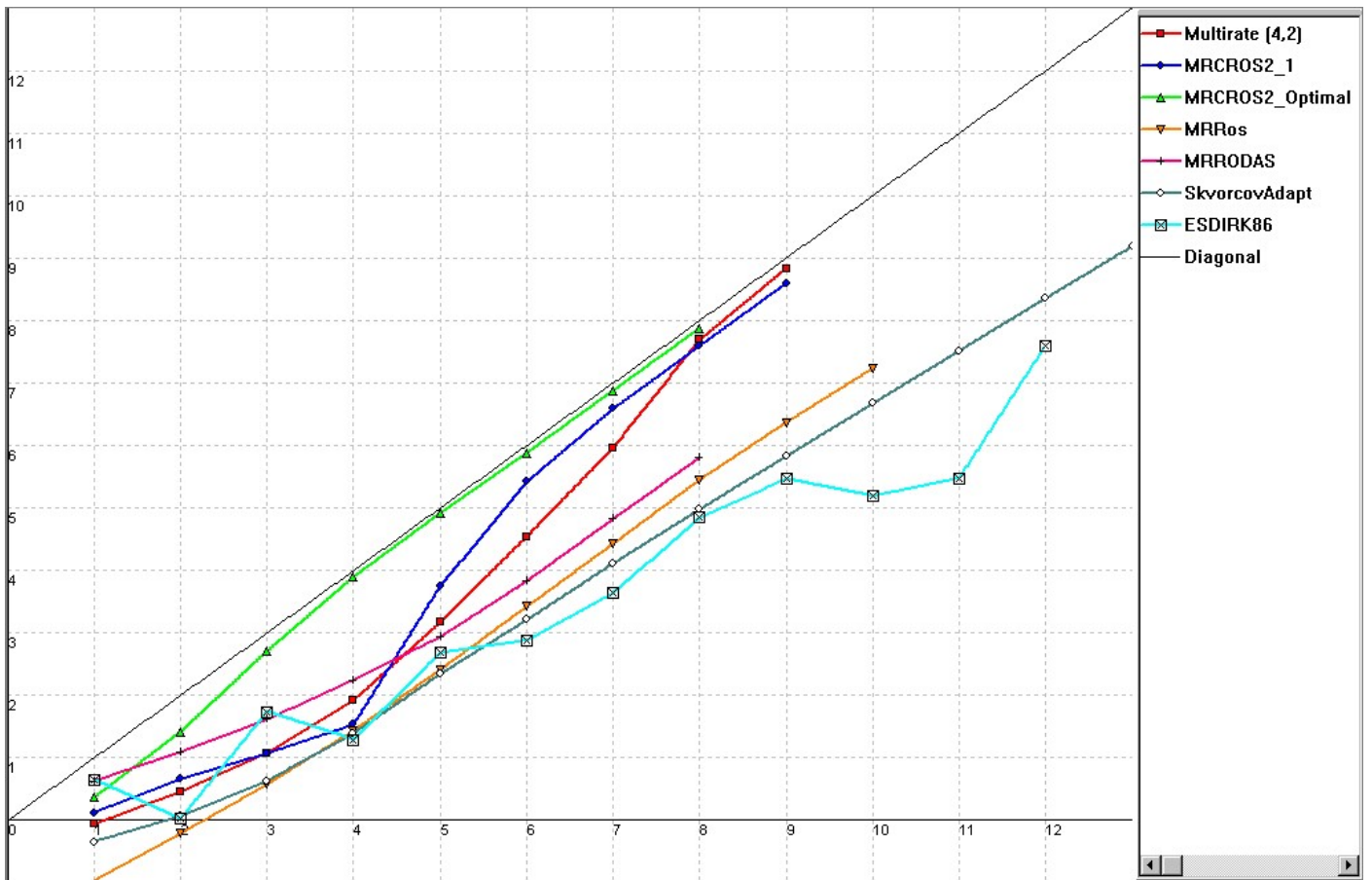


Рисунок 18. Задаваемая точность - достигаемая точность для класса инженерной точности.

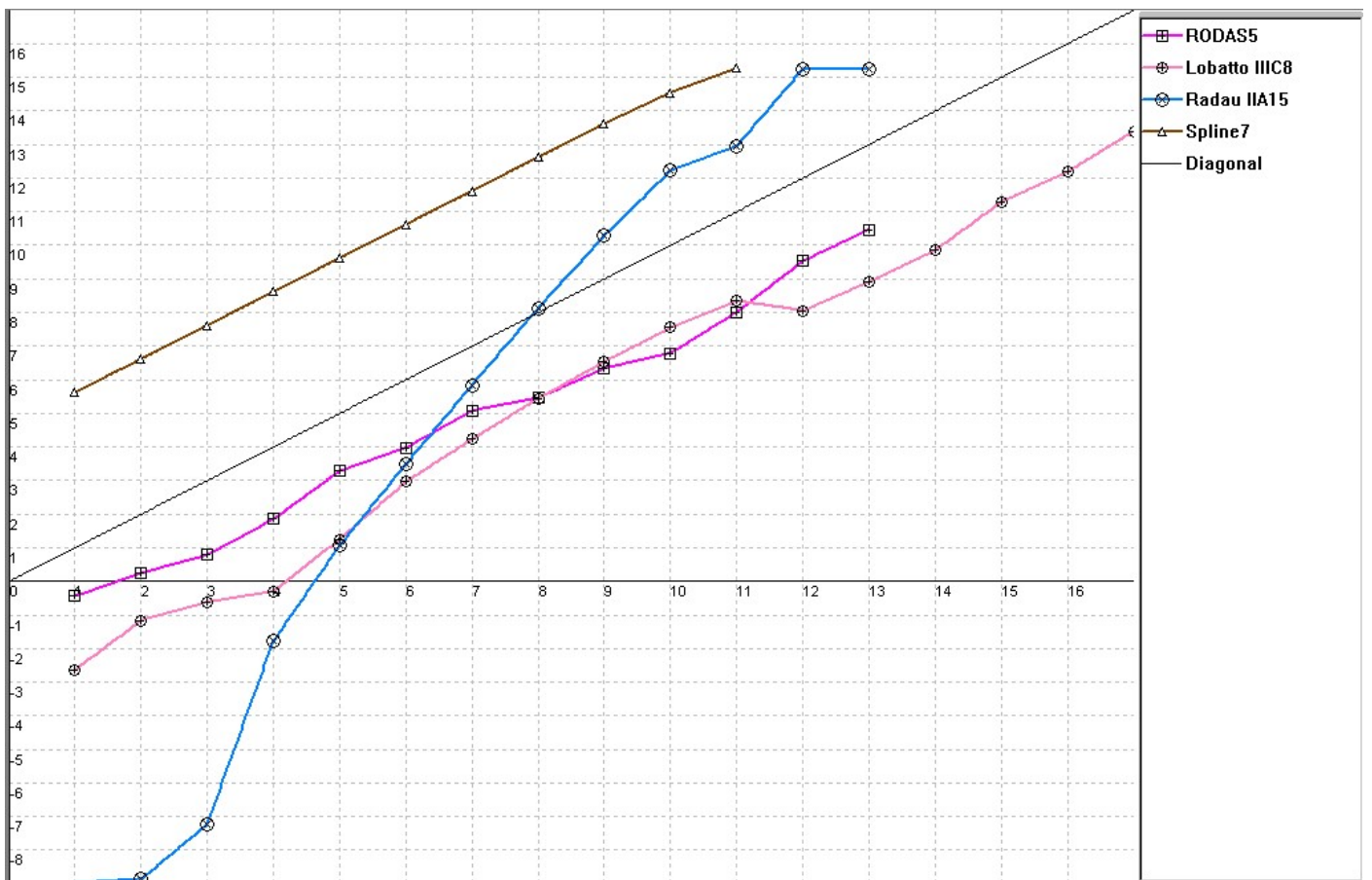


Рисунок 19. Задаваемая точность - достигаемая точность для класса высокой точности.

Список литературы

1. Андронов А. В. Математическое моделирование систем, процессов и явлений во временной области. Машиностроение и смежные отрасли. CAD/CAM/CAE Observer #7 (59) / 2010 // Интернет ресурс <http://backend.pa10.rk6.bmstu.ru/pa10/doc/math-mod-pa10.pdf> , 09.02.2021.
2. Жолковский Е.К., Белов А.А., Калиткин Н.Н. Решение жестких задач Коши явными схемами с геометрически-адаптивным выбором шага // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 227. 20 с. doi:10.20948/prepr-2018-227 // Интернет ресурс <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-227> , 09.02.2021.
3. The doubledouble homepage// Интернет ресурс <https://boutell.com/fracster-src/doubledouble/doubledouble.html> , 23.01.2018.
4. David H. Bailey, Xiaoye S. L., Yozo Hida. Quad-Double Arithmetic: Algorithms, Implementation, and Application: October 30, 2000// Интернет ресурс www.davidhbailey.com/dhbpapers/quad-double.pdf , 23.01.2018.
5. Savcenco V. Construction of a multirate RODAS method for stiff ODEs: Journal of Computational and Applied Mathematics Volume 225, Issue 2, 15 March 2009, Pages 323-337.// Интернет ресурс <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042708003701> , 29.12.2017.
6. Новиков Е.А. Исследование (m,2)-методов решения жёстких систем — Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, Россия: Ж. Вычислительные технологии, том 12, № 5, 2007.// Интернет ресурс <http://cyberleninka.ru/article/n/issledovanie-m-2-metodov-resheniya-zhestkih-sistem.pdf> , 29.12.2017.
7. Лимонов А.Г. Разработка двухстадийных схем Розенброка с комплексными коэффициентами и их применение в задачах моделирования образования периодических наноструктур — Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук: Уральский государственный университет им. А.М.Горького — Екатеринбург, 2010.// Интернет ресурс <http://elar.uurf.ru/bitstream/10995/3112/2/urgu0811s.pdf> , 29.12.2017.
8. Ширков П.Д. Оптимально затухающие схемы с комплексными коэффициентами для жёстких систем ОДУ — Институт математического моделирования РАН — Москва: Матем. моделирование, 1992, том 4, номер 8, 47–57.// Интернет ресурс <http://mi.mathnet.ru/mm2101> , 29.12.2017.
9. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жёсткие и дифференциально-алгебраические задачи. — М.: Мир, 1999.
10. Giovanna A. Di Marzo RODAS5(4) Méthodes de Rosenbrock d'ordre 5(4) adaptées aux problèmes différentiels-algébriques — Mémoire de diplôme en Mathématiques: Université de Genève Faculté des Sciences Section de Mathématiques — Genève, Mars 1993.// Интернет ресурс <http://cui.unige.ch/~dimarzo/papers/DIPL93.pdf> 29.12.2017.
11. Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежёсткие задачи. — М.: Мир, 1990.
12. Скворцов Л. М. Диагонально-неявные методы Рунге–Кутты для жёстких задач: Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2006, том 46, номер 12, С. 2209–2222.// Интернет ресурс <http://mi.mathnet.ru/zvmmf367> , 29.12.2017.
13. Скворцов Л. М., Явный многошаговый метод численного решения жёстких дифференциальных уравнений. — вычисл. матем. и матем. физ., 2007, том 47, номер 6, 959–967// Интернет ресурс <http://mi.mathnet.ru/zvmmf4593> , 22.02.2018.
14. Власов С.А., Ширков П.Д. Сплайн-интегрирование дифференциальных уравнений с запаздыванием: Системный анализ в науке и образовании. Университет "Дубна", eISSN: 2071-9612. Дубна 2010.
15. Зубанов А. М., Кутрухин Н. Н., Ширков П. Д. О построении линейно неявных схем, LN-эквивалентных неявным методам Рунге–Кутты: Компьютерные исследования и моделирование 2012 Т. 4 № 3 С. 483-496.// Интернет ресурс http://crm.ics.org.ru/uploads/crmissues/crm_2012_3/483-496.pdf , 29.12.2017.
16. Пошивайло И.П. Жёсткие и плохо обусловленные нелинейные модели и методы их расчета — Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук: Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша — Москва, 2014.// Интернет ресурс http://keldysh.ru/council/3/D00202403/poshivaylo_diss.pdf , 29.12.2017.
17. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жёстких нелинейных дифференциальных уравнений. — М.: Мир, 1988.

18. Кузнецов А. П., Селиверстова Е. С., Трубецков Д. И., Тюрюкина Л. В. Феномен уравнения ван дер Поля. — Обзор актуальных проблем нелинейной динамики: Изв. вузов «ПНД», т. 22, № 4, 2014. УДК 517.91, 517.938, 51.73 // Интернет ресурс <http://sgtnd.narod.ru/papers/2014PND3.pdf> , 26.03.2018.