На правах рукописи

Тузов Антон Олегович

АДДИТИВНЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ (M, K)–МЕТОДОВ

01.01.07 – вычислительная математика

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико – математических наук

Красноярск 2007

Работа выполнена в Институте вычислительного моделирования СО РАН и Сибирском федеральном университете (г. Красноярск)

Научный руководитель	доктор физико – математических наук, профессор **Новиков Евгений Александрович**
Официальные оппоненты	доктор физико – математических наук, профессор **Задорин Александр Иванович**
	доктор физико – математических наук, профессор **Добронец Борис Станиславович**
Ведущая организация	Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН. (г. Новосибирск)

Защита состоится « 1 » ноября 2007 года в 15 часов на заседании диссертационного совета К 212.098.03 в Красноярском государственном техническом университете по адресу: 660074, г.Красноярск, ул. Киренского, 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Политехнического института Сибирского федерального университета

Автореферат разослан « 17 » сентября 2007 года.

Ученый секретарь диссертационного совета Сафонов К.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность. При решении ряда задач, таких как проектирование радиоэлектронных схем, моделирование кинетики химических реакций, расчет динамики механических систем и других возникает необходимость численного решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Учет все большего числа факторов при построении математических моделей физических процессов, имеющих компоненты с сильно различающимися временными константами, приводит к жестким системам все большей размерности. В результате требования к вычислительным алгоритмам постоянно возрастают, поэтому проблема создания эффективных численных методов решения задачи Коши для жестких систем большой размерности является актуальной.

Эффективность алгоритмов интегрирования жестких систем можно повысить, разбив правую часть исходной дифференциальной задачи на жесткую и нежесткую части с целью применения (m, k)–методов к жесткой части, а явных — к нежесткой. Методы такого типа называются аддитивными[1]. В случае большой размерности системы дифференциальных уравнений общие вычислительные затраты $(m,\ k)$ - методов фактически полностью определяются временем вычисления и обращения матрицы Якоби. Эффективность аддитивных методов, основанных на $(m,\ k)$ - методах, можно существенно повысить за счет аппроксимации данной матрицы. При решении жестких задач на эффективность алгоритма интегрирования существенно влияют свойства устойчивости не только основной, но и промежуточных численных формул. Поэтому дальнейшего повышения эффективности можно достигнуть за счет внутренней L–устойчивости численных схем. Поскольку в аддитивные методы входят явные численные формулы, возникают определенные проблемы с устойчивостью численной схемы. При решении жестких систем явными методами на участках установления, которые, как правило, составляют большую часть интервала интегрирования, шаг ограничен не требованием точности, а требованием устойчивости численной схемы. При выборе величины шага исходя только из требования точности на этих участках возникает неустойчивость, приводящая к раскачиванию шага, что в лучшем случае снижает эффективность алгоритма интегрирования. Этот недостаток можно устранить дополнительным контролем устойчивости численной формулы[2].

Вопросы построения аддитивных методов на основе $(m,\ k)$ - схем и явных методов типа Рунге – Кутта, L–устойчивость внутренних схем и контроль устойчивости явной части метода применительно к аддитивным задачам, а также численное исследование аддитивных методов с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби ранее не исследовались.

Цель работы – исследовать методы решения аддитивных жестких задач, построенных на основе $(m,\ k)$ - методов и явных методов Рунге – Кутта.

Цель достигается построением эффективных численных методов решения аддитивных жестких задач и проведением численных экспериментов, подтверждающих эффективность построенных алгоритмов.

[1]Cooper, G.J. Additive Runge–Kutta methods for Stiff Ordinary Differential Equations/ G.J. Cooper, A. Sayfy // Mathematics of Computation.- vol. 40.- №161.- 1983.- P. 207-218

[2]Новиков,Е.А. Явные методы для жестких систем / Новиков Е.А. // Новосибирск: Наука.- 1997.- 195 с.

Научная новизна.

- Построены новые методы решения аддитивных автономных и неавтономных задач на основе (m, k) - методов и явных методов Рунге – Кутта.

- Разработаны вспомогательные вложенные численные формулы для оценки ошибки и контроля устойчивости основных методов.

- Созданы программные реализации алгоритмов переменного шага с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби.

Теоретическая значимость. Построены L - устойчивые методы третьего порядка точности с L - устойчивыми внутренними схемами относительно жесткой части системы дифференциальных уравнений. Получены оценки ошибки построенных численных формул. Построены неравенства для контроля устойчивости нежесткой части численной схемы.

Практическая ценность. Разработаны программы, реализующие построенные алгоритмы интегрирования. Проведены тестовые расчеты, подтверждающие повышение эффективности за счет диагональной аппроксимации матрицы Якоби. Созданные алгоритмы могут применяться при проектировании радиоэлектронных схем, моделировании кинетики химических реакций, расчете динамики механических систем и др.

Методы исследования. В работе применяется теория разностных схем и обыкновенных дифференциальных уравнений, используются методы математического анализа. Эффективность численных алгоритмов интегрирования исследуется с помощью численных экспериментов.

Апробация работы.

Результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

- Международная конференция "Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании"(Павлодар, 2006).

- Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (Красноярск, 2006).

- Всероссийская студенческая научная конференция "Студенческая наука-взгляд в будущее"(Красноярск, 2006).

- Семинар ИВМ СО РАН (Красноярск, 2007)

- Семинар кафедры прикладной математики Политехнический института Сибирского федерального университета (Красноярск, 2007).

Результаты работы опубликованы в 9 работах, из них три в журналах, включенных в перечень ВАК.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и одного приложения, содержит 3 таблицы. Библиографический список включает 162 наименования. Объем работы составляет 105 листов.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении дан краткий обзор работ по методам решения жестких систем, обоснована актуальность построения эффективных методов интегрирования аддитивных жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности, приведено краткое описание диссертации по главам.

Рассматривается задача Коши для аддитивных систем обыкновенных дифференциальных уравнений вида

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

в которых правая часть разбита на нежесткую $\varphi(t, y)$ и жесткую $g(t, y)$ части. В основу предлагаемых алгоритмов интегрирования положены $(m,\, k)$ - методы и явные схемы типа Рунге – Кутта. Класс $(m,\, k)$ - методов, предложенный в работах Новикова Е.А., вводится следующим образом. Задаются целые числа m и k, $k \le m$, и рассматриваются следующие множества

$$\begin{aligned}
&M_m = \{1, 2, ..., m\},\\
&M_k = \{m_i \in M_m | 1 = m_1 < m_2 < \cdots < m_k \le m\},\\
&J_i = \{m_j - 1 \in M_m | j > 1, m_j \in M_k, m_j \le i\} \quad 2 \le i \le m.
\end{aligned}$$

Тогда $(m,\, k)$ - схемы для решения задачи

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

имеют вид

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + ... + p_m k_m, \quad D_n = E - ahf'_n,\\
&D_n k_i = hf(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j) + \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j, \quad i \in M_k,\\
&D_n k_i = k_{i-1} + \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j, \quad i \in M_m \setminus M_k,
\end{aligned} \tag{2}$$

где E – единичная матрица, $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ – матрица Якоби функции f, h – шаг интегрирования, k_i, $1 \le i \le m$, – стадии метода, $a, p_i, \beta_{ij}, \alpha_{ij}$ – вещественные константы, определяющие свойства точности и устойчивости (2). Вычислительные затраты на шаг интегрирования в методах (2) следующие – один раз вычисляется матрица Якоби и осуществляется декомпозиция D_n, k раз вычисляется функция f, m раз осуществляется обратный ход метода Гаусса. $(m,\, k)$ - методы так же просты в реализации, как и методы типа Розенброка, однако свойства точности и устойчивости у них лучше.

В первой главе вводятся основные определения, раскрывается смысл понятия "аддитивный метод" и демонстрируется возможность "декомпозиции" аддитивной схемы на явную и неявную с сохранением условий порядка точности, предлагается способ получения неравенств для контроля точности и устойчивости явной части, обосновывается необходимость вывода численных схем отдельно для автономных и неавтономных систем;

на примере двух численных схем второго порядка точности демонстрируется общий подход к построению алгоритмов интегрирования переменного шага, в основе которых лежат аддитивные методы, приводятся результаты расчетов, подтверждающие эффективность построенных алгоритмов.

Во второй главе исследуются три семейства численных методов решения задачи Коши для жестких аддитивных автономных систем. Построены алгоритмы интегрирования переменного шага с контролем точности вычислений. Приведены результаты расчетов, подтверждающие работоспособность и эффективность построенных алгоритмов.

Исследована шестистадийная численная схема вида

$$\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^{6} p_i k_i\ ,\\
k_1 &= h\varphi(y_n),\\
D_n k_2 &= h\varphi(y_n) + hg(y_n),\\
D_n k_3 &= k_2,\\
k_4 &= h\varphi(y_n + \sum_{j=1}^{3}\beta_{4j}k_j) + hg(y_n + \sum_{j=1}^{3}\alpha_{4j}k_j),\\
D_n k_5 &= k_4 + \gamma k_3,\\
k_6 &= h\varphi(y_n + \sum_{j=1}^{5}\beta_{6j}k_j).
\end{aligned} \tag{3}$$

Получены коэффициенты схемы (3)

$$\begin{aligned}
&\alpha_{41} = \beta_{41} = \beta_{42} = \beta_{61} = 0, \quad \alpha_{42} = \beta_{62} = a, \quad \alpha_{43} = 1 - a,\\
&p_1 = -(1-2a)/u, \quad p_2 = \big(2a^2(7\gamma-1) - a(7\gamma-3) + \gamma\big)/(6au),\\
&p_3 = \big(-2a^2(8\gamma+1) + a(13\gamma+1) - 2\gamma\big)/(6au),\\
&p_4 = \big(-6a^2 + 2a(\gamma+5) - 1\big)/(6u), \quad p_5 = 0.5(2a^2 - 4a + 1)/u,\\
&p_6 = (1-2a)/u, \quad \beta_{43} = 1/(6ap_5), \quad \beta_1 = ap_5/p_6,\\
&\beta_2 = 2(1-\beta_{43}^2)/(3-2\beta_{43}), \quad \beta_{64} = a^2/(1-2a), \quad \beta_{65} = \beta_1 - \beta_{64},\\
&\beta_{63} = \beta_2 - a - \beta_{64} - (\gamma+1)\beta_{65},
\end{aligned} \tag{4}$$

при которых она имеет третий порядок точности и обладает L - устойчивостью основной и промежуточной численных схем относительно жесткой части системы (1). Всюду далее под L - устойчивостью понимается L - устойчивость относительно жесткой части. В (4) $u = a(\gamma-1)+1$, а коэффициенты a и γ определяются из уравнений

$$\begin{aligned}
&6a^3 - 18a^2 + 9a - 1 = 0,\\
&4a^3\gamma^3 - 12a(15a^2 - 10a + 1)\gamma^2 + 3a(374a^2 - 228a + 33)\gamma + 4(813a^2 - 486a + 175/3) = 0.
\end{aligned}$$

Для практических вычислений рекомендуются коэффициенты при $a = +0.43586652150845$

и $\gamma = -0.45174528144973$, то есть

$$
\begin{array}{ll}
\alpha_{41} = \beta_{41} = \beta_{42} = \beta_{61} = 0, & \\
a = +0.43586652150845 \cdot 10^{0}, & \gamma = -0.45174528144973 \cdot 10^{1}, \\
p_1 = +0.91301462909303 \cdot 10^{-1}, & p_2 = +0.49588787677187 \cdot 10^{0}, \\
p_3 = +0.75521774748194 \cdot 10^{0}, & p_4 = +0.20395977226114 \cdot 10^{0}, \\
p_5 = +0.12937356107219 \cdot 10^{0}, & p_6 = -0.91301462909303 \cdot 10^{-1}, \\
\alpha_{42} = +0.43586652150845 \cdot 10^{0}, & \alpha_{43} = +0.56413347849155 \cdot 10^{0}, \\
\beta_{43} = +0.29556275399511 \cdot 10^{1}, & \beta_{62} = +0.43586652150845 \cdot 10^{0}, \\
\beta_{63} = -0.39848721470948 \cdot 10^{1}, & \beta_{64} = +0.14811267768433 \cdot 10^{1}, \\
\beta_{65} = -0.20987467167967 \cdot 10^{1}, &
\end{array}
\qquad (5)
$$

Контроль точности здесь и для всех построенных ниже методов осуществляется посредством неравенства

$$\max_{1 \le i \le N} |y_n^i - y_{n,\,2}^i| / (|y_n^i| + r) \le \varepsilon,$$

где $y_{n,2}$ – приближение к решению, полученное вложенным методом второго порядка точности; ε – требуемая точность интегрирования, r – положительный параметр. Если $|y_n^i| < r$, то по i-й компоненте решения контролируется относительная ошибка ε; в противном случае контролируется абсолютная ошибка $r \cdot \varepsilon$.

Для контроля точности (3) построена вспомогательная численная схема второго порядка точности, не требующая дополнительных вычислений правой части и обращений матрицы Якоби

$$
\begin{aligned}
y_{n+1,\,2} &= y_n + \sum_{i=1}^{3} r_i k_i + r_4 \widetilde{k}_4, \\
k_1 &= h\varphi(y_n), \\
D_n k_2 &= h\bigl(\varphi(y_n) + g(y_n)\bigr), \\
D_n k_3 &= k_2, \\
\widetilde{k}_4 &= h\varphi(y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j).
\end{aligned}
\qquad (6)
$$

Коэффициенты вспомогательной схемы имеют вид $r_1 = -0.5/\beta_{43}$, $r_2 = 0.5(4a-1)/a$, $r_3 = 0.5(1-2a)/a$, $r_4 = 0.5/\beta_{43}$.

Полагаться на то, что *вся* жесткость сосредоточена в функции $g(t, y)$, а $\varphi(t, y)$ есть нежесткая часть, вообще говоря, нельзя. Поэтому все построенные в данной работе методы оснащены неравенством для контроля устойчивости явной части численной схемы

$$\frac{1}{|\alpha_{32}|} \max_{1 \le i \le N} \frac{|d_2^i - d_1^i|}{|d_1^i - k_1^i|} \le 2,$$

где $d_1 = h\varphi(y_n + \alpha_{21} k_1)$, $\quad d_2 = h\varphi(y_n + \alpha_{31} k_1 + \alpha_{32} d_1)$, $\alpha_{21} = \alpha_{31} + \alpha_{32}$, а числом 2 приблизительно ограничен интервал устойчивости явного метода типа Рунге-Кутта третьего порядка точности. В конкретных расчетах были выбраны $\alpha_{21} = 2/3$, $\alpha_{31} = \alpha_{32} = 1/3$. Неравенство для контроля устойчивости грубое, поэтому оно используется как ограничитель на рост величины шага интегрирования. Прогнозируемый шаг h_{n+1} по точности с ограничением по устойчивости вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max\{h_n, \min\{h_{acc}, h_{st}\}\},$$

где h_{acc} – шаг, выбранный исходя из требования точности,
h_{st} – шаг, выбранный исходя из требования устойчивости.

Для улучшения свойств устойчивости схемы (3) рассмотрена четвертая стадия в виде

$$D_n k_4 = h\varphi(y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j) + hg(y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j).$$

В результате новая схема с улучшенными свойствами устойчивости имеет вид

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^{6} p_i k_i\,, \\ k_1 &= h\varphi(y_n), \\ D_n k_2 &= h\varphi(y_n) + hg(y_n), \\ D_n k_3 &= k_2, \\ D_n k_4 &= h\varphi(y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j) + hg(y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j), \\ D_n k_5 &= k_4 + \gamma k_3, \\ k_6 &= h\varphi(y_n + \sum_{j=1}^{5} \beta_{6j} k_j). \end{aligned} \tag{7}$$

Получены коэффициенты схемы (7) третьего порядка точности, L - устойчивой и с L -

устойчивыми внутренними схемами

$$
\begin{aligned}
\alpha_{41} &= \beta_{41} = \beta_{61} = \beta_{62} = 0, \\
\alpha_{42} &= \beta_{42} = a, \quad \alpha_{43} = 1 - a, \quad p_2 = a, \\
\gamma &= 2a(a+1)/(6a^3 - 18a^2 + 9a - 1), \\
p_3 &= (a^2 - 4a/3 + 1)/(1 - a), \\
p_4 &= (6a^3 - 20a^2 + 11a - 1)/(6a - 6a^2), \\
p_5 &= (6a^3 - 18a^2 + 9a - 1)/(6a^2 - 6a), \\
\beta_4 &= (a - 1)/(6a^3 - 16a^2 + 7a - 1), \\
\beta_{43} &= \beta_4 - a, \\
\beta_2 &= (1 - \beta_4^2)/(1.5 - \beta_4), \\
p_6 &= (0.5 - \beta_4/3)/\beta_2, p_1 = -p_6, \\
\beta_1 &= (6\beta_4 p_6)^{-1}, \\
\beta_3 &= [1/6 - a(2\beta_4 - \beta_{42})/3]/p_6, \\
\beta_{65} &= [a(\beta_1 - 2\beta_2) + \beta_3 - \beta_1]/(a\gamma + a), \\
\beta_{63} &= \beta_2 - \beta_1 - \gamma\beta_{65}, \\
\beta_{64} &= \beta_1 - \beta_{65},
\end{aligned}
\tag{8}
$$

где коэффициент a определяется из уравнения

$$24a^4 - 96a^3 + 72a^2 - 16a + 1 = 0.$$

Для практических вычислений рекомендуется комплект коэффициентов при значении a равном 0.57281606248213, то есть

$$
\begin{aligned}
&\alpha_{41} = \beta_{41} = \beta_{61} = \beta_{62} = 0, \\
&a = +0.57281606248213 \cdot 10^0, && \gamma = -0.28918950092395 \cdot 10^1, \\
&p_1 = -0.48695861160292 \cdot 10^0, && p_2 = +0.57281606248213 \cdot 10^0, \\
&p_3 = 0.13211252622010 \cdot 10^1, && p_4 = -0.91050904025002 \cdot 10^{-1}, \\
&p_5 = 0.42438423735834 \cdot 10^0, && p_6 = +0.48695861160292 \cdot 10^0, \\
&\alpha_{42} = 0.57281606248213 \cdot 10^0, && \alpha_{43} = +0.42718393751787 \cdot 10^0, \\
&\beta_{42} = 0.57281606248213 \cdot 10^0, && \beta_{43} = -0.18882050162851 \cdot 10^0, \\
&\beta_{63} = 0.25149936861896 \cdot 10^1, && \beta_{64} = -0.22405291307056 \cdot 10^{-1}, \\
&\beta_{65} = 0.91371881359681 \cdot 10^0.
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Вложенная схема для контроля точности (7) имеет вид

$$
\begin{aligned}
y_{n+1,\,2} &= y_n + \sum_{i=1}^{4} r_i k_i + r_5 \widetilde{k_5}\ ,\\
k_1 &= h\varphi(y_n),\\
D_n k_2 &= h\varphi(y_n) + hg(y_n),\\
D_n k_3 &= k_2,\\
D_n k_4 &= h\varphi(y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j) + hg(y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j),\\
D_n \widetilde{k_5} &= k_4,
\end{aligned}
\qquad (10)
$$

Схема (10) имеет второй порядок точности, являться L - устойчивой вместе с промежуточными схемами, если ее коэффициенты заданы следующим образом

$$
r_1 = 0, \quad r_2 = a, \quad r_3 = 1 - a - v, \quad r_4 = 2 - a + (v - 0.5)/a, \quad r_5 = v - r_4, \qquad (11)
$$

где $v = 0.5/\beta_4$. На каждом шаге интегрирования метод (10) требует дополнительно один обратный ход в методе Гаусса и не требует дополнительных вычислений правой части. Поскольку на каждом шаге интегрирования в основном методе (7) производится одна декомпозиция матрицы Якоби и четыре обратных хода в методе Гаусса, то для задач большой размерности увеличение вычислительных затрат, связанных с использованием вложенного метода, будет незначительным.

В методах (3),(7) в четвертой стадии функции φ и g вычисляются в произвольных, не связанных друг с другом точках $(y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j)$ и $(y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j)$, то есть $\varphi(y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j)$ и $g(y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j)$. Обозначив

$$
\beta_4 = \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j},\ \ \alpha_4 = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j},
$$

эти точки можно интерпретировать следующим образом

$$
y(t_n + \beta_4 h) \approx y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j, \quad y(t_n + \alpha_4 h) \approx y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j,
$$

где $y(t_n + \beta_4 h)$ и $y(t_n + \alpha_4 h)$ есть точное решение в точках $(t_n + \beta_4 h)$ и $(t_n + \alpha_4 h)$, соответственно. Точное решение удовлетворяет соотношению $y' = \varphi(y) + g(y)$, в котором обе функции вычисляются в одной и той же точке. Естественно потребовать выполнения того же свойства и от приближенного решения, то есть положить $\sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j}$. В работах Cooper'а это условие называется условием согласованности.

Рассмотрим численную схему вида (7), но при определении числовых коэффициентов учтем условие согласованности. Коэффициенты, при которых данная схема имеет третий порядок точности и являться L - устойчивой вместе с промежуточными схемами, определяются так

$$\begin{aligned}
&\alpha_{41} = \beta_{41} = \beta_{61} = \beta_{62} = 0, \quad \beta_4 = 2/3,\\
&\alpha_{42} = \beta_{42} = p_2 = a, \quad \alpha_{43} = \beta_{43} = 2/3 - a,\\
&\gamma = (4a^2 - 2a - 1)/(1 - 3a), \quad u = (\gamma + 1)/(3(1 - a)\gamma),\\
&p_4 = (6a - 1)/(4a), \quad p_5 = 3/4 - p_4\\
&p_3 = 1/4 - a - \gamma p_5, \quad p_6 = 1/(4u), \quad p_1 = -p_6,\\
&\beta_{65} = -1/\gamma, \quad \beta_{63} = 1 - u, \quad \beta_{64} = u - \beta_{65},
\end{aligned} \tag{12}$$

где $u = (\gamma + 1)/(3(1 - a)\gamma)$, а коэффициент a определяется из уравнения $4a^2 - 9a + 3 = 0$. Для практических вычислений рекомендуются коэффициенты при $a = (9 - \sqrt{33})/8$, то есть

$$\begin{aligned}
&\alpha_{41} = \beta_{41} = \beta_{61} = \beta_{62} = 0, &&\\
&a = +0.40692966918275 \cdot 10^0, && \gamma = +0.52153516540863 \cdot 10^1,\\
&p_1 = -0.37323757000745 \cdot 10^0, && p_2 = +0.4069296691827 \cdot 10^0,\\
&p_3 = +0.55049743857359 \cdot 10^0, && p_4 = +0.88564322306092 \cdot 10^0,\\
&p_5 = -0.13564322306092 \cdot 10^0, && p_6 = +0.37323757000745 \cdot 10^0,\\
&\alpha_{42} = +0.40692966918275 \cdot 10^0, && \alpha_{43} = +0.25973699748392 \cdot 10^0,\\
&\beta_{42} = +0.40692966918275 \cdot 10^0, && \beta_{43} = +0.25973699748392 \cdot 10^0,\\
&\beta_{63} = +0.33018532942702 \cdot 10^0, && \beta_{64} = +0.86155629536189 \cdot 10^0,\\
&\beta_{65} = -0.19174162478890 \cdot 10^0. &&
\end{aligned} \tag{13}$$

Для контроля точности воспользуемся вложенной схемой вида (10). Коэффициенты, при которых вложенная схема имеет второй порядок точности и являться L - устойчивой вместе с промежуточными схемами, задаются в (11).

Из анализа результатов расчетов с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби следует, что алгоритм, построенный с учетом условия согласованности, является наиболее эффективным среди всех рассматриваемых методов. Поэтому он рекомендуется для решения жестких задач с диагональным преобладанием в матрице Якоби, а во всех построенных ниже методах учитывается условие согласованности. В случае диагональной аппроксимации вычислительные затраты на шаг интегрирования построенных алгоритмов практически не отличаются от соответствующих затрат явных методов. Поэтому сравнение эффективности проводилось на задачах средней жесткости с известными явными методами Мерсона, Фельберга и Дорманда–Принса. Из результатов расчетов следует преимущество построенных алгоритмов по вычислительным затратам более чем на порядок.

Третья глава посвящена исследованию двух семейств численных методов решения задачи Коши для жестких аддитивных неавтономных систем. При построении методов учтены условия согласованности. Построены алгоритмы интегрирования переменного шага с контролем точности вычислений. Приведены результаты численных экспериментов.

Исследована шестистадийная численная схема вида

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^{6} p_i k_i, \\
k_1 &= h\varphi(t_n, y_n), \\
Dk_2 &= h\varphi(t_n, y_n) + hg(t_n, y_n), \\
Dk_3 &= k_2, \\
k_4 &= h\varphi(t_n + c_4 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j) + hg(t_n + c_5 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j), \\
Dk_5 &= k_4 + \gamma k_3, \\
k_6 &= h\varphi(t_n + c_6 h, y_n + \sum_{j=1}^{5} \beta_{6j} k_j).
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Получены коэффициенты схемы (14)

$$
\begin{aligned}
&\gamma = 4a - 3, \quad \alpha_{41} = 0, \quad \beta_{41} = \beta_{61} = 0, \quad p_2 = (3a-1)/(2a), \\
&\alpha_{42} = a, \quad \beta_{42} = 0, \quad \beta_{62} = -a(3a-1)\,\widetilde{\tau}, \quad p_3 = -(9a-5)/(4a), \\
&\alpha_{43} = 2/3 - a, \qquad \beta_{43} = 2/3, \quad \beta_{63} = (15a^2 - 10a + 1)/2\,\widetilde{\tau}, \\
&p_4 = (3a-1)/(4a), \quad c_4 = c_5 = 2/3, \quad \beta_{64} = 3a^2/2\,\widetilde{\tau}, \\
&p_5 = 1/(4a), \quad \beta_{65} = -(6a-1)/4\,\widetilde{\tau}, \quad p_6 = -p_1 = \tau, \quad c_6 = 0.
\end{aligned}
\tag{15}
$$

при которых она имеет третий порядок точности и обладает L - устойчивостью основной и промежуточной схем относительно жесткой части. В (15) $\tau = 0.25/(\beta_{64}+\beta_{65})$, $\widetilde{\tau} = 1/\big[(6a^2 - 6a + 1)\tau\big]$, а коэффициент a определяется из уравнения $6a^3 - 18a^2 + 9a - 1 = 0$. Для практических вычислений рекомендуется коэффициенты при a равном 0.43586652150845, то есть

$$
\begin{aligned}
&\alpha_{41} = \beta_{41} = \beta_{42} = \beta_{61} = c_6 = 0, && c_4 = c_5 = 2/3, \\
&a = +0.43586652150845 \cdot 10^0, && \gamma = -0.12565339139662 \cdot 10^1, \\
&p_1 = -0.10674632795531 \cdot 10^1, && p_2 = +0.35285981986046 \cdot 10^0, \\
&p_3 = +0.61785045034886 \cdot 10^0, && p_4 = +0.17642990993023 \cdot 10^0, \\
&p_5 = +0.57357009006977 \cdot 10^0, && p_6 = +0.10674632795531 \cdot 10^1, \\
&\alpha_{42} = +0.43586652150845 \cdot 10^0, && \alpha_{43} = +0.23080014515822 \cdot 10^0, \\
&\beta_{43} = +0.66666666666667 \cdot 10^0, && \beta_{62} = +0.26424022694610 \cdot 10^0, \\
&\beta_{63} = +0.50155967944070 \cdot 10^0, && \beta_{64} = - + .56163994610649 \cdot 10^0, \\
&\beta_{65} = +0.79584003971969 \cdot 10^0,
\end{aligned}
\tag{16}
$$

Вложенная схема для контроля точности (14) имеет вид

$$
\begin{aligned}
y_{n+1,\,2} &= y_n + \sum_{i=1}^{4} r_i k_i + r_7 k_7,\\
k_1 &= h\varphi(t_n, y_n),\\
D_n k_2 &= h\varphi(t_n, y_n) + hg(t_n, y_n),\\
D_n k_3 &= k_2,\\
k_4 &= h\varphi(t_n + c_4 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j) + hg(t_n + c_5 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j),\\
D_n k_5 &= k_4 + \gamma k_3,\\
D_n k_7 &= k_5,
\end{aligned}
\tag{17}
$$

Схема (17) имеет второй порядок точности, являться L - устойчивой вместе с промежуточными схемами, если ее коэффициенты определены следующим образом

$$
\begin{aligned}
&r_1 = 0, \quad r_7 = \frac{3\,[4\,a^2 - 3\;a\,(\gamma + 4) + \gamma + 4]}{4\,[a\,(3\,\gamma - 1) + \gamma + 4]}, \quad r_4 = 0.75 - r_7,\\
&r_3 = -1 - (3\,\gamma + 2)\,r_7, \quad r_2 = 0.25 - r_3 - \gamma r_7.
\end{aligned}
$$

На каждом шаге интегрирования метод (17) требует дополнительно один обратный ход в методе Гаусса и не требует дополнительных вычислений правой части.

Для улучшения свойств устойчивости схемы (14) четвертая стадия изменена следующим образом

$$
D_n k_4 = h\varphi(t_n + c_4 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j) + hg(t_n + c_5 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j).
$$

В результате новая схема записывается в виде

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^{6} p_i k_i,\\
k_1 &= h\varphi(t_n, y_n),\\
Dk_2 &= h\varphi(t_n, y_n) + hg(t_n, y_n),\\
Dk_3 &= k_2,\\
Dk_4 &= h\varphi(t_n + c_4 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j) + hg(t_n + c_5 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j),\\
Dk_5 &= k_4 + \gamma k_3,\\
k_6 &= h\varphi(t_n + c_6 h, y_n + \sum_{j=1}^{5} \beta_{6j} k_j),
\end{aligned}
\tag{18}
$$

Коэффициенты, при которых схема (18) имеет третий порядок точности, является L - устойчивой и имеет L - устойчивые внутренние схемы, вычисляются по формулам

$$\begin{aligned}
\alpha_{41} &= \beta_{41} = \beta_{61} = c_6 = 0, \\
c_4 &= c_5 = 2/3,\ \beta_{42} = a, \beta_{43} = 2/3 - a, \\
\gamma &= (12a^3 - 48a^2 + 28a - 4)/(3a-1)^2, \\
\alpha_{42} &= \big(-a(3\gamma+4) + \gamma + 4\big)/3, \\
\alpha_{43} &= \big(a(3\gamma+4) - \gamma - 2\big)/3, \\
p_1 &= \big(\gamma(3a^2 - 4a + \alpha_{42})\big)/\big(4(a\gamma + \alpha_{42})\big), \\
p_2 &= \big(a(-3\gamma+2) + \gamma + 1\big)/(4a), \\
p_3 &= \big(a(6\gamma-1) - 2\gamma - 1\big)/(4a), \\
p_4 &= 3/2 - 1/(4a), \\
p_5 &= -3/4 + 1/(4a),\ p_6 = -p_1, \\
\beta_{62} &= -1 - 1/\gamma - \big(3(a-1)\big)/\big(4p_6\big), \\
\beta_{63} &= 2 + 1/\gamma + (3a-4)/(4p_6), \\
\beta_{64} &= 1/\gamma + 1/(4p_6),\ \beta_{65} = -1/\gamma,
\end{aligned} \tag{19}$$

а коэффициент a определяется из уравнения

$$a^4 - 4a^3 + 3a^2 - \frac{2}{3}a + \frac{1}{24} = 0.$$

Для практических вычислений рекомендуются коэффициенты при $a = 0.57281606248213$, то есть

$$\begin{aligned}
\alpha_{41} &= \beta_{41} = \beta_{61} = c_6 = 0, & c_4 &= c_5 = 2/3, \\
a &= +0.57281606248213 \cdot 10^0, & \gamma &= -0.28196432554463 \cdot 10^1, \\
p_1 &= -0.11816662081845 \cdot 10^0, & p_2 &= +0.18205668382489 \cdot 10^1, \\
p_3 &= -0.24546934012082 \cdot 10^1, & p_4 &= +0.10635597247104 \cdot 10^1, \\
p_5 &= -0.31355972471041 \cdot 10^0, & p_6 &= +0.11816662081845 \cdot 10^0, \\
\alpha_{42} &= +0.12448344453974 \cdot 10^1, & \alpha_{43} &= -0.57816777873078 \cdot 10^0, \\
\beta_{42} &= +0.57281606248213 \cdot 10^0, & \beta_{43} &= +0.93850604184537 \cdot 10^{-1}, \\
\beta_{62} &= +0.20659784402781 \cdot 10^1, & \beta_{63} &= -0.31816351144595 \cdot 10^1, \\
\beta_{64} &= +0.17610018794415 \cdot 10^1, & \beta_{65} &= +0.35465479473988 \cdot 10^0,
\end{aligned} \tag{20}$$

Вложенная схема для контроля точности (18) имеет вид

$$
\begin{aligned}
y_{n+1,\,2} &= y_n + \sum_{i=1}^{4} r_i k_i + r_7 k_7, \\
k_1 &= h\varphi(t_n, y_n), \\
D_n k_2 &= h\varphi(t_n, y_n) + hg(t_n, y_n), \\
D_n k_3 &= k_2, \\
D_n k_4 &= h\varphi(t_n + c_4 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \beta_{4j} k_j) + hg(t_n + c_5 h, y_n + \sum_{j=1}^{3} \alpha_{4j} k_j), \\
D_n k_5 &= k_4 + \gamma k_3, \\
D_n k_7 &= k_5,
\end{aligned}
\tag{21}
$$

Схема (21) будет иметь второй порядок точности, являться L - устойчивой вместе с промежуточными схемами, если ее коэффициенты определить следующим образом

$$
\begin{aligned}
&r_1 = 0, \quad r_7 = \frac{3\,[4\,a^2 - 3\,a\,(\gamma + 4) + \gamma + 4]}{4\,[a\,(3\,\gamma - 1) + \gamma + 4]}, \quad r_4 = 0.75 - r_7, \\
&r_3 = -1 - (3\gamma + 2)\,r_7, \quad r_2 = 0.25 - r_3 - \gamma r_7.
\end{aligned}
$$

На каждом шаге интегрирования метод (21) требует дополнительно один обратный ход в методе Гаусса и не требует дополнительных вычислений правой части.

В заключении сформулированы основные результаты.

В приложении приведены использованные в расчетах тестовые примеры.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ

В работе построены и исследованы новые одношаговые методы решения задачи Коши для аддитивных жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, допускающие некоторые виды аппроксимации матрицы Якоби, в том числе диагональную. Получены следующие новые результаты

- Исследованы три семейства методов решения жестких автономных и два семейства методов решения жестких неавтономных задач.

- Получены коэффициенты пяти L - устойчивых шестистадийных численных схем третьего порядка точности.

- Произведены оценки ошибки и построены неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численных схем, позволяющие проводить расчеты с переменным шагом интегрирования.

- Проведено численное исследование методов с диагональной аппроксимацией матрицы Якоби, подтверждающее работоспособность и эффективность созданных алгоритмов интегрирования.

Работа инициирована член-корреспондентом РАН Шайдуровым В.В. и выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ №06-08-920, №05-01-00579, НШ-3428.2006.9

Публикации по теме диссертации

По теме диссертации опубликовано 9 работ. Основные результаты диссертации опубликованы в следующих статьях:

1. Тузов, А.О. Шестистадийный метод третьего порядка для решения аддитивных жестких систем / Е.А. Новиков, А.О. Тузов // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние.– Новосибирск, 2007.– Т. 10, № 3.-С.307-316.

2. Тузов, А.О. Неоднородный метод третьего порядка для аддитивных жестких систем / Е.А. Новиков, А.О. Тузов // Математическое моделирование.– Москва, 2007.– Т. 19, № 6.- С. 61-70.

3. Тузов, А.О. Численный метод третьего порядка точности для решения автономных аддитивных жестких систем / А.О. Тузов // Вестник КрасГАУ.-выпуск 14.- Красноярск, 2006.- С. 467-473.

4. Тузов, А.О. Метод третьего порядка для автономных аддитивных жестких систем / Е.А. Новиков, А.О. Тузов // Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании: Труды международной конференции.- Павлодар, 2006.- С. 77-84.

5. Тузов, А.О. Аддитивная шестистадийная численная схема третьего порядка точности для жестких систем / А.О. Тузов // VII Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям. Программа и тезисы докладов.- Красноярск, 2006.- С. 30.

6. Тузов, А.О. Метод третьего порядка для решения жестких аддитивных систем / А.О. Тузов // Конференция молодых ученых 2006: материалы конференции молодых ученых Института вычислительного моделирования СО РАН. – Красноярск, ИВМ СО РАН, 2006.- С.92-98.

7. Новиков, Е.А. Численный метод решения задачи Коши для автономных аддитивных жестких систем / Е.А. Новиков, А.О. Тузов // Ресурсосберегающие технологии механизации сельского хозяйства.- Приложение к вестнику КрасГАУ.- выпуск 4.- Красноярск, 2007.- С. 156-160.

8. Тузов, А.О. L - устойчивый метод третьего порядка для жестких систем / А.О. Тузов // Студенческая наука – взгляд в будущее: материалы Всероссийской студенческой научной конференции. ч. 2 /Краснояр. гос. аграр. ун-т.- Красноярск, 2005.- С. 141-143.

9. Тузов, А.О. Метод третьего порядка решения жестких автономных систем / А.О. Тузов // Студенческая наука – взгляд в будущее: материалы Всероссийской студенческой научной конференции. ч. 2 /Краснояр. гос. аграр. ун-т.- Красноярск, 2005.- С. 140-141.

ЛП №040943 от 02.03.99
Подписано в печать 5.04.07
Формат бумаги $60 \times 84^1/_{16}$
Усл. печ. л. 1
Тираж 100 экз. Заказ 12

Отпечатано на ризографе ИВМ СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок