сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р5 - 12174

В.Ц.Банчев

ОБ ОБОБЩЕННЫХ МЕТОДАХ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

1979

P5 - 12174

В.Ц.Банчев

ОБ ОБОБЩЕННЫХ МЕТОДАХ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Банчев В.Ц.

P5 - 12174

Об обобщенных методах интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений

На основе обобщенного метода Рунге-Кутта в работе предлагается способ получения обобщенных A-устойчивых (явных и неявных) методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. Их можно использовать при решении задачи Коши для жестких систем и в случае, когда большие по модулю собственные значения матрицы Якоби имеют не только большие отрицательные вещественные части. Особенно удачным является использование обобщенных методов для нахождения асимптотически устойчивых решений.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Banchev V.Ts.

P5 - 12174

On Generalized Methods for Integration of Ordinary Differential Equations

A way obtaining generalized A-stable (explicit and implicit) methods for integration of ordinary differential equations is presented. They can be used for solving the Cauchy problem for stiff system even in the case, when large eigenvalues of the Jacobian matrix may have not only large negative real parts. The use of generalized methods in finding asymptotically stable solutions is particularly effective.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

В работе предлагается способ получения обобщенных A-устойчивых /явных и неявных/ методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. Их можно использовать при решении задачи Коши для жестких систем и в случае, когда большие по модулю собственные значения матрицы Якоби имеют не только большие отрицательные части /другие способы получения аналогичных методов даны, например, в [4-6] /. Подробнее рассматривается новый вариант обобщенного метода Рунге-Кутта, предложенного Лоусоном[1,2]. В этом варианте устранен существенный недостаток метода Лоусона, и поэтому область его эффективного применения значительно шире. Особенно удачным является использование обобщенных методов для нахождения асимптотически устойчивых решений по Ляпунову. К этой задаче сводятся многие задачи науки и техники, связанные с исследованием переходных процессов, задача минимизации функций с помощью непрерывных аналогов различных итерационных процессов, как и задача аппроксимации некоторых уравнений в частных производных обыкновенными дифференциальными уравнениями.

Пусть задана система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y' = f(t, y) , \qquad /1/$$

где y и f – N-мерные вектор-функции. В дальнейшем будем предполагать, что функция $f(t, y)$ определена в области $\Omega = \{t \in [t_0, t_f], y \in D\}$, где $[t_0, t_f]$ -

интервал интегрирования, а D - открытое множество действительного N-мерного пространства R^N, и задача Коши для системы /1/ имеет единственное решение в Ω. Пусть, кроме того, функция $f(t,y)$ имеет непрерывную в Ω производную Фреше по y и ее матрица Якоби удовлетворяет условию Гельдера

$$\| \partial f/\partial y(t,p) - \partial f/\partial y(t,q) \| \le c \| p-q \|^{\nu} \; \forall p,q \in D, \; 0<\nu\le 1, \; c>0, \qquad /2/$$

равномерно по $t \in [t_0, t_f]$. Тогда в некоторой окрестности $S(\bar y, r) = \{ y \in D \mid \|y-\bar y\| < r \}$, $r>0$, любой точки $\bar y$ области D при $t \in [t_0, t_f]$ функция $f(t,y)$ допускает разложение

$$f(t,y) = b(t,\bar y) + B(t,\bar y)\, y + \rho(t,y), \qquad /3/$$

где

$$\| \rho(t,y) \| = o(\| y - \bar y \|), \quad y \in S(\bar y, r),$$

$$\| \partial \rho / \partial y(t,y) \| \le c \| y - \bar y \|^{\nu}, \quad y \in S(\bar y, r), \; 0<\nu\le 1, \; c>0, \qquad /4/$$

равномерно по $t \in [t_0, t_f]$ и $B(t,\bar y) = \partial f/\partial y(t,\bar y)$, $b(t,\bar y) = f(t,\bar y) - B(t,\bar y)\bar y$. Общее решение системы /1/ в форме Коши $y(t,t_0,y_0)$, $y_0 \in D$, в окрестности $S(y_0, r)$ точки y_0 удовлетворяет интегральному тождеству

$$y(t,t_0,y_0) = W(t)\{ y_0 + \int_{t_0}^{t} W(s)^{-1} [\, b(s,y_0) + \rho(s, y(s,t_0,y_0))]\, ds \}, \qquad /5/$$

где $y(t,t_0,y_0)$ - решение /1/ с $y(t_0,t_0,y_0) = y_0$, а $N \times N$ матрица $W(t)$ удовлетворяет уравнению $W'(t) = B(t,y_0)W(t)$, $W(t_0) = I$.

Определение. Систему /1/ будем называть жесткой в окрестности $S(\bar y, r)$ точки $\bar y \in D$ при $t \in [t_0, t_f]$, если ее общее решение в форме Коши $y(t,t_0,y_0)$ при $y_0 \in S(\bar y, r)$ имеет быстро меняющиеся компоненты на интервале интегрирования $[t_0, t_f]$.

Как известно, жесткость системы /1/ сильно затрудняет, а часто делает и практически невозможным численное интегрирование задачи Коши для этой системы классическими явными методами типа Рунге-Кутта или Адамса из-за сильного уменьшения величины шага интегрирования. Если функция $f(t,y)$ удовлетворяет условиям /3/, /4/, из /5/ следует, что система /1/-жесткая, когда матрица Якоби $\partial f/\partial y$ имеет большие собственные значения по модулю. Заметим, что в настоящее время обычно рассматривают только этот случай [2,3,6] /исключение составляет работа [4] /. Подчеркнем, однако, что система /1/ может быть жесткой не только в этом случае. Действительно, рассмотрим систему уравнений $y' = A \exp(At)\, y_0$, где A - постоянная матрица, такая, что система $y' = Ay$ является жесткой. Задача Коши для обоих систем с начальным условием $y(0) = y_0$ имеет одно и то же решение $y = \exp(At)\, y_0$. Следовательно, первая система тоже жесткая, хотя ее матрица Якоби не удовлетворяет вышеприведенному условию жесткости.

Пусть $N \times N$ матрица $T(t)$ удовлетворяет матричному дифференциальному уравнению $T' = -TA(t)$, $T(t_0) = I$, и пусть произвольные пока $N \times N$ матрица $A(t)$ и N-мерный вектор $a(t)$ интегрируемы в смысле Римана в интервале интегрирования $[t_0, t_f]$ системы /1/. Как известно, матрица $T(t)$ существует, определена единственным образом и имеет обратную $T^{-1}(t)$, которая удовлетворяет уравнению

$(T^{-1})' = A(t)\, T^{-1}$, $T^{-1}(t_0) = I$. Пусть $U(\tau, s) = T^{-1}(\tau)\, T(s)$ - матрица Коши [7] последнего уравнения. Введем в /1/ новую неизвестную функцию

$$z(t) = T(t)\, y(t) - \int_{t_0}^{t} T(s)\, a(s)\, ds \qquad /6/$$

Тогда /1/ превращается в

$$z' = g(t,z) = T(t)[\, f(t,y) - A(t)y - a(t)], \qquad /7/$$

где

$$y = T^{-1}(t)[\, z + \int_{t_0}^{t} T(s)\, a(s)\, ds].$$

Целью замены /6/ является сведение решения задачи Коши для жесткой системы /1/ к интегрированию жесткой окрестности $S(\bar{y}, r)$ любой точки $\bar{y} \in D$, $t \in [t_0, t_f]$ системы /7/ путем подходящего выбора матрицы $A(t)$ и вектора $a(t)$. Покажем, как это можно сделать в случае, когда $f(t, y)$ удовлетворяет условиям /3/, /4/ в $S(\bar{y}, r)$ при $t \in [t_0, t_f]$. Подходящим выбором для $a(t)$ и $A(t)$ в этом случае является $a(t) = b(t, \bar{y})$, $A(t) = B(t, \bar{y})$ /матрицу $A(t)$ можно выбирать и другим образом, лишь бы матрица Якоби системы /7/ имела малые характеристические числа по модулю в $S(\bar{y}, r)$, $t \in [t_0, t_f]$/. Действительно, тогда, если

$$\sup_{t \in [t_0, t_f]} \| y(t, t_0, \bar{y}) - \bar{y} \| \le \delta , \qquad /8/$$

где δ - достаточно малое положительное число, в силу непрерывной зависимости решения $y(t, t_0, y_0)$ системы /1/ от начальных данных y_0 найдется такая окрестность $S(\bar{y}, r)$ точки $\bar{y}$, что при $y_0 \in S(\bar{y}, r)$ правые части $g(t, z) = T(t)\,\rho(t, y(z))$ и модули собственных значений матрицы Якоби

$$\partial g / \partial z = T(t) [\partial \rho / \partial y(t, y(z))] \, T^{-1}(t)$$

системы /7/ достаточно малы при $t \in [t_0, t_f]$ и, следовательно, система /7/ нежесткая в этой окрестности $\bar{y}$ для $t \in [t_0, t_f]$, $z(t) \approx \text{const}$. Если условие /8/ не выполняется, то, очевидно, найдется $t_1 \in [t_0, t_f]$, $t_1 > t_0$, такое, что система /7/ будет нежесткой в некоторой окрестности $S(y, r)$ точки y при $t \in [t_0, t_1]$.

Заметим, что если $b(t, \bar{y}) \neq 0$, метод Лоусона, использующий замену $z = \exp(-At)\, y$ $(A = \text{const})$, не приводит к цели в силу приведенного выше примера.

Интегрируя /7/ с помощью какого-нибудь из известных численных методов и используя /6/, получаем формулы обобщенного варианта этого метода для интегрирования /1/, который, очевидно, является A-устойчивым[2]. Обозначим через y_n приближения к значениям $y(t_n)$, $n = 0, 1, \ldots, m$,

$t_0 < t_1 < t_2 < \ldots < t_m = t_f$, полученные при численном решении /1/ обобщенным методом. Пусть на n-м шагу локальная ошибка усечения r_n выбранного нами метода для интегрирования /7/ удовлетворяет неравенству

$$\| r_n \| < \| \int_{t_n}^{t_{n+1}} T(s)\, \rho(s, y(s))\, ds \| , \qquad /9/$$

где $y(t)$ - решение /1/ с $y(t_n) = y_n$ /заметим, что это требование является естественным при численном решении /7/, если $a(t)$ и $A(t)$ выбраны, как указано выше/. Тогда, если $a(t) = b(t, y_n)$ и $A(t) = B(t, y_n)$ при $t \in [t_n, t_{n+1}]$, для локальной ошибки усечения e_n соответствующего обобщенного метода интегрирования /1/ на том же шагу имеем оценку

$$\| e_n \| < \epsilon K \| y_{n+1} - y_n \| \, \| T^{-1}(t_{n+1}) \| \int_{t_0}^{t_{n+1}} \| T(s) \| \, ds ,$$

$$K > \sup_{t \in [t_n, t_{n+1}]} \| y(t) - y_n \| / \| y_{n+1} - y_n \| \qquad /10/$$

и $\epsilon \to 0$ при $\| y_{n+1} - y_n \| \to 0$. Оценка /10/, как и условие /8/, делает очень эффективным использование обобщенных методов для нахождения асимптотически устойчивых точек покоя /1/.

Здесь мы рассмотрим подробнее обобщенный вариант явных методов Рунге-Кутта. Имеем

$$k_1^* = f(t_n, y_n) - A(t_n)\, y_n - a(t_n) , \qquad /11/$$

$$p_i^* = U(t_n + c_i h_n, t_n) [y_n + \int_0^{c_i h_n} U(t_n, s + t_n)\, a(s + t_n)\, ds] +$$

$$+ h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\, U(t_n + c_i h_n, t_n + c_j h_n)\, k_j^* ,$$

$$k_i^* = f(t_n + c_i h_n, p_i^*) - A(t_n + c_i h_n)\, p_i^* - a(t_n + c_i h_n) ,$$

$$i = 2, 3, \ldots, v ,$$

$$y_{n+1} = U(t_n + h_n, t_n)[\, y_n + \int_0^{h_n} U(t_n, s+t_n)\, a(s+t_n)\, ds] +$$
$$+ h_n \sum_{i=1}^{v} w_i U(t_n + h_n, t_n + c_i h_n) k_i^*,$$

где h_n - шаг интегрирования, a_{ij}, c_i, w_i, v - параметры используемого явного метода Рунге-Кутта, а $U(\tau, s)$ - матрица Коши, определенная выше. Так как вычисление интегралов и матрицы Коши в /11/ с заданной точностью является довольно затруднительным в общем случае, в дальнейшем рассмотрим подробнее несколько специальных видов матриц $A(t)$ и векторов $a(t)$, которые приводят к алгоритмам, более удобным для реализации на ЭВМ.

Алгоритм 1. Положим $A(t) = A_n$ и $a(t) = A_n d_n$ для $t \in [t_n, t_{n+1}]$, где матрицы A_n и векторы d_n - постоянные на каждом шагу интегрирования. Тогда формулы /11/ можно переписать в виде

$$k_1^* = f(t_n, y_n) = A_n y_n - A_n d_n,$$
$$p_i^* = \exp(c_i h_n A_n)(y_n + d_n) - d_n + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \exp[(c_i - c_j) h_n A_n] k_j^*,$$
$$k_i^* = f(t_n + c_i h_n, p_i^*) - A_n p_i^* - A_n d_n, \quad i = 2, 3, \dots, v,$$
$$y_{n+1} = \exp(h_n A_n)(y_n + d_n) - d_n + h_n \sum_{i=1}^{v} w_i \exp[(1-c_i) h_n A_n] k_i^*. \qquad /12/$$

В качестве матрицы A_n и вектора d_n естественно брать матрицу $B(t_n, y_n)$ и решение уравнения $A_n d_n = b(t_n, y_n)$ /если A_n вырожденная, нужно брать нормальное решение /8/ /, при этом A_n и d_n можно не пересчитывать на каждом шагу. Алгоритм 1 оказался весьма удачным при нахождении асимптотически устойчивых точек покоя.

Алгоритм 2. Пусть при $t \in [t_n, t_{n+1}]$ справедливо представление

$$f(t, y) = \sum_{k=0}^{m} f_k (t - t_n)^k + o(|t - t_n|^m), \qquad /13/$$

где f_k - постоянные векторы. Полагая в /11/ для $t \in [t_n, t_{n+1}]$ $A(t) = 0$ и $a(t) = \sum_{k=0}^{m} f_k (t - t_n)^k$, получаем алгоритм 2. При этом матрица Коши в /11/ равняется единичной матрице, а

$$\int_0^{\tau} U(t_n, s+t_n)\, a(s+t_n)\, ds = \sum_{k=0}^{m} f_k \frac{\tau^{k+1}}{k+1}.$$

Алгоритм 2 тесно связан с методом разложения в ряд Тейлора. Заметим, что он не требует выполнения /3/ и /4/.

Удобные для реализации на ЭВМ алгоритмы можно получить также в случаях

$$B(t, y_n) = \sum_{k=0}^{m} B_k (t - t_n)^k + o(|t - t_n|^m),$$
$$b(t, y_n) = 0, \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \qquad /14/$$

и

$$b(t, y_n) + \rho(t, y) = \sum_{k=0}^{m} \rho_k (t + t_n)^k + o(|t - t_n|^m),$$
$$B(t, y_n) = C_n, \quad t \in [t_n, t_{n+1}], \qquad /15/$$

где B_k, C_n и ρ_k - постоянные матрицы и векторы соответственно.

Вопрос о подходящем выборе матрицы $A(t)$ и вектора $a(t)$ в случае произвольных асимптотически устойчивых решений /1/ будет рассмотрен в другой работе.

Алгоритмы 1 и 2 обобщенного метода Рунге-Кутта реализованы в новом варианте программы GERUN, первоначальный вариант которой, основанный на методе Лоусона, опубликован в /9,10/. В новый вариант GERUN, кроме того, внесены некоторые улучшения по сравнению со старым. В частности, предусмотрены возможность разделения системы /1/ на жесткую и нежесткую части и вычисление матричной экспоненты симметричной матрицы A_n с помощью собственных значений и собственных векторов A_n. Подпрограмма обращения матриц заменена другой, более подходящей, а алгоритм автоматического выбора величины шага и порядка падэ-аппроксимации матричной экспоненты сделан более гибким, что позволяет сократить необходимые затраты памяти и времени ЭВМ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lawson J.D. SIAM J.Numer. Anal., 1967, v. 4, p. 372-380.
2. Lapidus L.I., Seinfeld J.H. Numerical Solution of Ordinary Differential Equations. Ac. Press, 1971.
3. Stiff Differential Systems. Proc. Int. Symp., N.Y.- London, 1974.
4. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноруцкий И.Г. Численные методы решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. "Наука", Л., 1977.
5. Dekker K. J. Comput. and Appl. Math., 1977, v. 3, p. 221-223.
6. Lee D., Preiser S. Comp. and Maths. with Appls., 1978, v. 4, p. 43-51.
7. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. "Наука", М., 1967.
8. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. "Наука", М., 1974.
9. Банчев В.Ц. ОИЯИ, Р11-9678, Дубна, 1976.
10. Банчев В.Ц. ОИЯИ, Р11-9677, Дубна, 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел 12 января 1979 года.