

Научный семинар по имитационному моделированию

Моделирование. Красноярск

А. Е. Новиков

Институт Математики и

Фундаментальной Информатики

Сибирский Федеральный Университет

Красноярск, Россия

aenovikov@bk.ru

A. E. Novikov

Institute of Mathematics and

Fundamental Informatics

Siberian Federal University

Krasnoyarsk, Russia

aenovikov@bk.ru

2022

2 of 17

ВВЕДЕНИЕ

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

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

$$\begin{cases} x' = f(t, x, y), \\ 0 = g(t, x, y), \end{cases} \quad (3)$$

$$x(t_0) = x_0, \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k,$$

$$x'' = f(t, x), \quad x(t_0) = x_0, \quad x'(t_0) = x'_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k. \quad (4)$$

Здесь $x = x(t) \in R^N$, $y = y(t) \in R^M$, $x' = x'(t) \in R^N$, $x'' = x''(t) \in R^N$,
 $f(t, x, y) \in R^N$, $g(t, x, y) \in R^M$ – достаточно гладкие вектор-функции, t есть
независимая переменная [1-4].

3 of 17

Замечание. Ниже в основном речь будет идти о жестких устойчивых задачах [2], то есть таких, что

$$1) \operatorname{Re}(\lambda_i) < 0,$$
$$2) \rho = \frac{\left| \max_{1 \leq i \leq N} \operatorname{Re}(-\lambda_i) \right|}{\left| \min_{1 \leq i \leq N} \operatorname{Re}(-\lambda_i) \right|} \gg 1,$$

где λ_i , $1 \leq i \leq N$, – собственные числа матрицы Якоби, вычисленной на решении $x(t)$.



Рис. 1. График решения жесткой задачи

РАЗДЕЛ I. ЯВНЫЕ ЖЕСТКИЕ СИСТЕМЫ ОДУ

Рассмотрим задачу

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

В зависимости от жесткости и числа уравнений для ее решения будем применять либо **явные методы типа Рунге-Кутты**, либо одношаговые безытерационные **полуявные (m, k) -методы**.

Преимуществом первых является отсутствие необходимости обращения регуляризующей матрицы. Недостатком – худшие свойства устойчивости по сравнению с неявными методами и большая трудоемкость по сравнению, например, с методами Адамса-Башфорта, которые требуют всего лишь одно вычисление правой части на шаге [1].

Преимуществом неявных методов является их свойства устойчивости. Недостатком – необходимость обращения регуляризующей матрицы и более сложное построение и реализация [1, 4].

Явные методы Рунге-Кутты имеют вид

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i, \quad k_i = hf(x_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad (5)$$

где k_i , $1 \leq i \leq m$, – стадии схемы, α_i , p_i , β_{ij} , $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq i - 1$, есть вещественные коэффициенты.

Из результатов расчетов жестких систем следует, что на участке установления имеется большое число возвратов (повторных вычислений решения). Причина – **возникающая неустойчивость численной формулы**.

Алгоритмы, основанные на явных методах с **контролем устойчивости** численной формулы уменьшают трудоемкость вычислений и, тем самым, повышают эффективность решения задачи.

Большого повышения эффективности можно добиться применением методов с **согласованными областями устойчивости** и распараллеливанием алгоритма интегрирования [5, 6].

6 of 17

Для того, чтобы определить класс (m, k) -схем, рассмотрим множества $M_m = \{1, 2, \dots, m\}$ и $M_k = \{m_i \in M_m \mid m_1 = 1, m_{i-1} \leq m_i, 2 \leq i \leq k, m_k \leq m\}$. Множество M_k содержит номера стадий, на которых вычисляются новые значения функции. Введем в рассмотрение множества $J_i = \{j \in M_m \mid j+1 \in M_k, j < i\}$, $1 \leq i \leq m$, и $\bar{M}_k = M_m \setminus M_k$ – дополнение M_k . Используя введенные обозначения получаем безытерационную (m, k) -схему можно записать следующим образом:

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

Здесь A – аппроксимация матрицы Якоби, θ – параметр, который равен 0 или 1 .

Замечание. Дальнейшее повышение эффективности достигается за счет построения **неоднородных явно-неявных алгоритмов**, которые позволяют объединить преимущества явных и неявных схем.

Отдельно стоит отметить возможность использования **численной матрицы Якоби**.

Замечание. Еще больше увеличить эффективность алгоритма интегрирования можно путем **«замораживания»** (использования одной и той же матрицы Якоби на нескольких шагах интегрирования) регуляризующей матрицы.

РАЗДЕЛ II. НЕЯВНЫЕ ЖЕСТКИЕ СИСТЕМЫ ОДУ

Рассмотрим теперь задачу Коши для автономной неявной системы ОДУ:

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

Вводя обозначение $x' = y$, имеем

$$\begin{cases} x' = y, \\ 0 = f(x, y). \end{cases}$$

$$x(t_0) = x_0, \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k.$$

Используя технику ε -вложения, описанную, в частности, в [4], получаем

$$\begin{cases} x' = y, \\ \varepsilon \cdot y' = f(x, y), \quad \varepsilon \rightarrow 0 \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} x' = y, \\ y' = \frac{1}{\varepsilon} \cdot f(x, y), \quad \varepsilon \rightarrow 0. \end{cases}$$

Применяя к последней системе схему (6), полагая, что $\varepsilon = 0$ задачу (2a) можно решить.

Замечание. Начальное условие $y(t_0) = y_0$ можно получить, например, методом установления.

РАЗДЕЛ III. СИСТЕМЫ ДАУ ИНДЕКСА 1 И 2

Замечание. Предельным случаем жесткой системы ОДУ является система ДАУ индекса 1 и выше [3]. В этом случае задача (1a) принимает вид

$$\begin{cases} x' = f(x, y), x(t_0) = x_0, \\ 0 = g(x, y), y(t_0) = y_0, t_0 \leq t \leq t_k. \end{cases} \quad (3a)$$

Определение [7]. Система (3a) имеет

а) индекс 1, если g_x есть невырожденная матрица. В этом случае задача имеет единственное решение.

б) индекс 2, если функция g не зависит от y и $\|g_x f_y\| \leq c < \infty$.

Замечание. Во втором случае существование и единственность решения не гарантированы [8].

Полагаем, что система имеет индекс 1. Снова применяя технику ε -вложения [4], получаем систему ОДУ

$$\begin{cases} x' = f(x, y), \\ y' = \frac{1}{\varepsilon} g(x, y), \varepsilon \rightarrow 0, \end{cases} \quad x(t_0) = x_0, \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k.$$

Применяя к последней системе (m, k) -схему, полагая $\varepsilon = 0$, получаем разностные (m, k) -схемы решения ДАУ следующего вида:

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i^x, \quad y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i^y, \quad (7)$$

$$D_n \begin{bmatrix} k_i^x \\ k_i^y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix}, \quad D_n = \begin{bmatrix} E - ahf_x & -ahf_y \\ -ahg_x & -ahg_y \end{bmatrix}, \quad (8)$$

$$F_1 = h\delta_i f(x_n + \sum_{l=1}^{i-1} \beta_{il} k_l^x, y_n + \sum_{l=1}^{i-1} \beta_{il} k_l^y) + \theta \sum_{j \in J_i} \alpha_{ij} k_j^x + (1 - \theta) h \sum_{j \in J_i} \gamma_{ij} (f_x k_j^x + f_y k_j^y), \quad (9)$$

$$F_2 = h\delta_i g(x_n + \sum_{l=1}^{i-1} \beta_{il} k_l^x, y_n + \sum_{l=1}^{i-1} \beta_{il} k_l^y) + (1 - \theta) h \sum_{j \in J_i} \gamma_{ij} (g_x k_j^x + g_y k_j^y).$$

Здесь параметр $\delta_i = 1$ для $i \in M_k$ и $\delta_i = 0$ для $i \in \bar{M}_k$.

РАЗДЕЛ IV. ЯВНЫЕ НЕЖЕСТКИЕ СИСТЕМЫ ОДУ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ

Замечание. Учитывая, что введением новых обозначений можно понизить порядок системы высшего порядка вплоть до единицы, задачу Коши для систем ОДУ высших порядков можно было бы считать решенной.

Однако, как показывают результаты расчетов, многие системы ОДУ высших порядков лучше интегрировать напрямую без понижения порядка. Для этого следует строить специальные методы.

Ниже речь будет идти о нежестких задачах.

12 of 17

Рассмотрим задачу

$$x'' = f(x), \quad x(t_0) = x_0, \quad x'(t_0) = x'_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k. \quad (4a)$$

Здесь $x = x(t) \in R^N$, $x' = x'(t) \in R^N$, $x'' = x''(t) \in R^N$, $f(x) \in R^N$.

Прежде всего применим **явную схему Штермера** второго порядка точности для решения **(4a)**:

$$\begin{aligned} x_0^{h,1} &= x_0, \\ \frac{x_1^{h,1} - x_{-1}^{h,1}}{2h} &= x'_0, \\ \frac{x_{i+1}^{h,1} - 2x_i^{h,1} + x_{i-1}^{h,1}}{h^2} &= f(x_i^{h,1}), \quad i = -p+1, \dots, N+p-1. \end{aligned}$$

Затем используем численную формулу

$$\frac{x_{i+1}^h - 2x_i^h + x_{i-1}^h}{h^2} = \sum_{j=-k+1}^{k-1} \alpha_j^{(k)} x_{i+j}^{nh}, \quad \alpha_j^{(k)} = \alpha_{-j}^{(k)}, \quad j = \overline{1, k-1}. \quad (10)$$

Построена формула, позволяющая уточнить производную искомого решения.

Она имеет вид

$$x_0^{h,k} = x_0,$$

$$\frac{x_{i+1}^h - x_{i-1}^h}{2h} = x_0' + h \sum_{j=1}^{k-1} \beta_j^{(k)} (x_{i+j}^{''h} - f(x_{i-j}^{''h})), \quad \beta_j^{(k)} = -\beta_{-j}^{(k)}, \quad j = \overline{1, k-1}. \quad (11)$$

Замечание. Авторами найдены коэффициенты $\alpha_j^{(k)}$ и $\beta_j^{(k)}$ для явных симметрических многошаговых методов **4-20 порядков аппроксимации**. Более подробное описание вывода всех формул, нахождения коэффициентов методов, а также обоснование сходимости приведено в [\[9\]](#).

Раздел V. Устойчивость явных многошаговых методов

Напоследок рассмотрим задачу **изучения устойчивости** многошаговых методов, которая является гораздо более сложной по сравнению с задачей исследования свойств устойчивости одношаговых методов.

В **[10]** предложен **новый алгоритм построения областей абсолютной устойчивости** многошаговых численных схем, основанный на алгоритме Бернулли вычисления наибольшего по модулю корня полинома с комплексными коэффициентами и методе Данделена-Лобачевского-Греффе.

Построены области абсолютной устойчивости методов Адамса-Башфорта 3-11 порядков аппроксимации.

В будущем планируется получить аналогичные результаты применительно к методам Адамса-Башфорта более высоких порядков точности, **методам Адамса-Мултона** и методам типа **предиктор-корректор**.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] E. Hairer, S. P. Nørsett, G. Wanner. Solving ordinary differential equations I. Nonstiff problems. Springer-Verlag, 1980.
- [2] Е. А. Новиков. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997.
- [3] Е. А. Новиков, Ю.В. Шорников. Компьютерное моделирование жестких гибридных систем. Новосибирск: Издательство Новосибирского государственного технологического университета, 2012.
- [4] E. Hairer, G. Wanner. Solving ordinary differential equations II. Stiff and differential-algebraic problems. Springer-Verlag, 1996.
- [5] Е. А. Новиков, М. В. Рыбков. "Численный алгоритм построения областей устойчивости методов первого порядка". Вестник Бурятского государственного университета, №9-2, 2014, pp. 80–85.
- [6] А. Е. Новиков, Е. А. Новиков, А. И. Левыкин. Вычислительная математика. Алгоритмы интегрирования на явных одношаговых схемах. Учеб. пособие. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2020. – 64 с. ISBN 978-5-7638-4328-6.
- [7] C. W. Gear. Differential-Algebraic Equations Index Transformations // SIAM J. Sci. Stat. Comput, V. 9, No. 1. – 1988. – pp. 39-47.

- [8] Rheinboldt, W.C. Differential-Algebraic Systems as Differential Equations on Manifolds // Math. Comput. 43. – 1984. – pp. 473-482.
- [9] V. V. Shaydurov, A. E. Novikov. Difference schemes for second-order ordinary differential equations with corrector and predictor properties // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2022. – Vol. 37, No. 3, pp. 175–187. DOI: 10.1515/rnam-2022-0015.
- [10] Киреев И. В., Новиков А. Е., Новиков Е. А.. Построение областей абсолютной устойчивости методом Бернулли // СибЖВМ. – 2022. – Т. 25, №4. – С. 417–428. DOI: 10.15372/SJNM20220407
- [11] F. Mazzia, C. Magherini. Test set for initial value problem solvers: monograph. Department of Mathematics, University of Bari and INdAM, Research Unit of Bari. Release 2.4, 2008.

БЛАГОДАРЮ ЗА ВНИМАНИЕ.