Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

А.А.Белов, А.С.Вергазов, Н.Н.Калиткин

Контроль точности при численном интегрировании жестких систем

Белов А. А., Вергазов А. С., Калиткин Н. Н. Контроль точности при интегрировании жестких систем

Ранее для численного решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений было предложено а) использовать в качестве аргумента длину дуги интегральной кривой и б) выбирать оптимальный шаг интегрирования пропорционально $\kappa^{2/5}$, где κ – кривизна интегральной кривой. В данной работе найдена задача, в которой точное решение представлялось через элементарные функции как аргумента времени t, так и аргумента дуги l. Построение такого точного решения позволило провести количественное сравнение различных разностных схем. Было показано, что при расчетах с оптимальным шагом удается использовать даже явные схемы Рунге-Кутты. При этом схема первого порядка давала невысокую точность, но очень высокую надежность даже при огромной жесткости. С повышением порядка точности надежность схем ухудшалась.

Была предложена смешанная стратегия. На первом этапе по надежной схеме первого порядка строится оптимальная сетка, адаптированная к решению. На втором этапе эта сетка сгущается по правилу дробления квазиравномерных сеток, а расчет выполняется по схеме четвертого порядка точности. Смешанная стратегия позволила добиться одновременно хорошей надежности и высокой точности расчета.

Ключевые слова: потом

Belov A. A., Vergazov A. S., Kalitkin N. N.
Accuracy control in stiff systems integration

Abstract will be written later.

Key words: later

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 18-01-00175.

Оглавление

| Методы численного интегрирования жестких систем | 4 |
|---|----|
| 1.1. Длина дуги. | |
| 1.2. Выбор шага. | 5 |
| 1.3. Оптимальный шаг | 6 |
| 1.4. Двухэтапная стратегия | |
| Апробация на тестах | 10 |
| 2.1. Требования к тестам. | 10 |
| 2.2. Гиперболический тест. | |
| 2.3. Тригонометрический тест | 14 |
| Численные расчеты | 15 |
| 3.1. Условия тестирования | |
| 3.2. Результаты расчетов. | 17 |
| 3.3. Смешанная стратегия | 20 |
| блиографический список | |

1. Методы численного интегрирования жестких систем

1.1. Длина дуги. Численное интегрирование задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) является одной из очень трудных задач вычислительной математики. Формально эта задача имеет следующий вид:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}, t), \quad 0 \le t \le T, \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0. \tag{1}$$

Здесь t — скаляр, $\mathbf{u}(t) = \{u_m(t), 1 \le m \le M\}$ и $\mathbf{f}(\mathbf{u}, t) = \{f_m(\mathbf{u}, t), 1 \le m \le M\}$ — векторные функции, а M — размерность системы.

Задачу традиционно считают жесткой, если $T \| \mathbf{f}(\mathbf{u}, t) \| \gg 1$ хотя бы в части отрезка $t \in [0, T]$. Решению жестких задач посвящена обширная литература, наиболее подробный обзор которой дан в монографии [1].

Различают два типа прикладных задач. Первый тип — это так называемые большие, или многопроцессные, задачи. Они описываются системами уравнений в частных производных, к которым подключена одна или несколько систем ОДУ. Примером могут служить задачи горения и взрыва. В них процесс горения, то есть реакции химических веществ, описывается системой уравнений химической кинетики; это система ОДУ. Выделяющееся тепло приводит к движению вещества. Это движение описывается уравнениями газодинамики, то есть системой уравнений в частных производных.

Расчет уравнений в частных производных гораздо более трудоемок, чем решение ОДУ. Поэтому в больших задачах шаг по времени τ определяется требованиями методов решения уравнений в частных производных. Этот же шаг τ вычислитель вынужден использовать для решения сопутствующей системы ОДУ. В этом случае естественным аргументом для решения задачи (1) является время t.

Второй класс задач содержит только систему ОДУ. Для этого класса задач оказывается выгоднее выбрать другой аргумент — длину дуги интегральной кривой в многомерном пространстве. Длина дуги l(t) определяется соотношением

$$dt^{2} = dt^{2} + d\mathbf{u}^{2} \equiv dt^{2} + \sum_{m=1}^{M} du_{m}^{2} = (1 + \sum_{m=1}^{M} f_{m}^{2})dt^{2}.$$
 (2)

Если выбран новый аргумент l, то старый аргумент t становится его функцией:

Добавлено примечание ([AV1]): [1]

$$t(l) \equiv u_0(l); \tag{3}$$

таким образом, число неизвестных функций становится M+1. Формально новую функцию можно включить в систему (1), добавив туда уравнение $du_0/dt \equiv dt/dt = 1$.

Напомним, что расширенная система ОДУ содержит в правых частях аргумент t. Его в правых частях можно заменить на новую функцию: $t \equiv u_0$. Тогда расширенная система формально не будет содержать аргумента t в правых частях, то есть станет автономной.

Перейдем к новому аргументу l. Для этого в расширенной системе (1) заменим dt на dl с помощью соотношения (2). Получим следующую систему размерности M+1:

$$\frac{du_m}{dl} = \frac{f_m(u_0, u_1, \dots, u_M)}{\sqrt{\sum_{m=0}^M f_m^2(u_0, u_1, \dots, u_M)}}, \quad 0 \le m \le M; \quad f_0(u_0, u_1, \dots, u_M) \equiv 1.$$
(4)

При аргументе l сумма квадратов правых частей (4) равна 1, то есть норма правой части никогда не бывает большой. Это облегчает численное интегрирование системы. Такой прием полезен даже для нежестких ОДУ, а для жестких он кардинально облегчает решение задачи. Переход к длине дуги и различные преимущества этого метода подробно описаны в монографии [2]. Заметим, что правые части (4) не содержат аргумента l, то есть эта система является автономной.

Переход к длине дуги практически не увеличивает трудоемкость одного шага численных расчетов. Практически всегда основное время расчетов уходит на вычисление правых частей f_m , которые могут быть достаточно сложными функциями своих аргументов. Переход от (4) к (1) включает лишь несколько дополнительных арифметических операций, трудоемкость которых невелика. Размерность системы увеличивается на 1, что так же мало существенно для прикладных задач, где M обычно довольно велико.

1.2. Выбор шага. Расчет с постоянным шагом по времени τ или по длине дуги h обычно невыгоден. Шаг целесообразно уменьшать там, где решение быстро меняется, то есть правые части ОДУ велики. На участках слабого изменения решения шаг можно увеличивать. В [1] подробно описаны алгоритмы автоматического выбора шага, принятые в мировой литературе. Традиционно используют два основных метода выбора шага. В первом методе каждый шаг выполняют по некоторой схеме (p+1)-го порядка точности, в которую вложена схема p-го порядка точности. Результат вложенной схемы берут в качестве ответа. По разности результатов двух схем выбирают величину следующего шага. Во

Добавлено примечание ([AV2]): [2]

Добавлено примечание ([AV3]): [1]

втором методе шаг τ рассчитывают повторно, разбив его на два шага величиной $\tau/2$. По разности этих расчетов вычисляют новый шаг.

На основе этих методов написано много пакетов программ. Большинство из них хорошо работают на нежестких задачах. Однако проверка этих пакетов на тестах с известными точными решениями показывает, что реальная точность расчетов лишь по порядку величины близка к запросу пользователя. Она обычно оказывается в несколько раз хуже или лучше. Поэтому в расчетах прикладных задач, где ответ неизвестен, пользователь не может быть вполне уверен в достижении требуемой точности.

Намного хуже ситуация для случая жестких задач. Для них расчеты на тестах показали [3-5], что реальная точность может быть в 100-1000 раз хуже заявленной. Это относится даже к таким тщательно выверенным программам, как пакеты Гира или программы Дормана-Принса dopri5. Кроме того, на жестких задачах возможны "срывы" шага: иногда на участках слабо меняющегося решения программа без видимых причин уменьшает шаг в 100-1000 раз. Затем шаг постепенно увеличивается, но снова срывается; это может повторяться много раз. В [3] был предложен принципиально другой алгоритм автоматического выбора шага. Он основан на использовании длины дуги и кривизны κ интегральной кривой в многомерном пространстве. Интуитивно понятно, что чем больше кривизна κ , тем меньше должен быть шаг h. Но каким должен быть алгоритм, связывающий эти две величины?

1.3. Оптимальный шаг. Напомним определение кривизны кривой u(t) в (M+1)-мерном пространстве с координатами $\{t,u_1,u_2,...,u_M\}$. Касательная к этой кривой определяется через производную $d\mathbf{u}/dt$. Деля на длину этого вектора, получим единичный вектор направления касательной:

$$\mathbf{n} = \frac{\frac{d\mathbf{u}}{dt}}{\left\| \frac{d\mathbf{u}}{dt} \right\|_{2}}.$$
 (5)

Кривизна определяется как производная вектора направления касательной по длине дуги:

$$\kappa = \frac{d\mathbf{n}}{dl}, \kappa = \|\kappa\|_{2}.$$
 (6)

Таким образом, кривизна является вектором даже в случае плоской кривой, то есть одного ОДУ; это радиус-вектор окружности, имеющей касание второго порядка с кривой $\boldsymbol{u}(t)$. Наряду с этим говорят о скалярной кривизне κ , которая равна величине радиуса этой окружности.

Добавлено примечание ([AV4]): [3-5]

Добавлено примечание ([AV5]): [3]

Добавлено примечание ([AV6]): Как в MathType сделать каппа жирным?

В ранних работах [Пошивайло] с помощью многих численных экспериментов была подобрана неплохая эвристическая закономерность: $h \sim \kappa^{-0.5}$. Однако в пакетах прикладных задач был использован постоянный шаг по длине дуги и несколько семейств разностных схем с порядком точности от 1 до 4. Эти пакеты позволили провести расчеты некоторых прикладных задач, например – образование окислов фосфора и серы при горении различных топлив.

Задача теоретического нахождения зависимости $h(\kappa)$ крайне сложна. Из общих соображений понятно, что результат должен зависеть от того, какая именно разностная схема используется для интегрирования системы ОДУ. Однако удалось найти такой случай [6], для которого теоретически обосновывается формула выбора оптимального шага. Пусть схема интегрирования имеет точность O(h); это может быть явная или неявная схема Эйлера или явно-неявная L1-устойчивая схема Розенброка. Тогда

$$h_{opt}(\kappa) = const \cdot \kappa^{-2/5} \tag{7}$$

Качественный вид этой формулы совпадает с ранее найденным эвристическим видом, а оптимальный показатель степени лишь слабо отличается от эвристического.

Как часто оказывается, "чистая" теоретическая формула (7) для своего практического применения требует "кухонных" поправок.

Во-первых, ясно, что при $\kappa=0$ она дает $h=\infty$. Формально это правильно: если на некотором участке кривой $\kappa=0$, этот участок есть прямая, то есть $\boldsymbol{u}(t)$ является линейной функцией. А для линейной функции любая численная схема дает точный ответ при сколь угодно большом шаге.

На практике $\kappa=0$ лишь в отдельных точках кривой (например, в точках перегиба), а попадание узла расчетной сетки именно в эту точку имеет нулевую вероятность. Однако возможно попадание счетного узла в малую окрестность точки перегиба и получение неприемлемо большого шага h. Надо ввести такую поправку, чтобы в любом случае число интервалов было не меньше некоторого разумного N_{\min} .

Во-вторых, надо дать разумное определение константы в (6). В нее должна быть включена некоторая интегральная нормировка по длине дуги, обеспечивающая желательное количество интервалов сетки $N_{\rm max}$.

Исходя из этого, в [6] был предложен следующий алгоритм. Пусть требуется решить задачу (4) на отрезке [0,L] с априорно заданными N_{\max} , N_{\min} . Несколько видоизменим формулу (7) с учетом сделанных замечаний:

Добавлено примечание ([AV7]): [Пошивайло] – то же. что выше?

Добавлено примечание ([AV8]): [6]

Добавлено примечание ([AV9]): [6]

$$h(l) = \left[\frac{N_{\min}}{L} + \frac{N_{\max} \kappa^{2/5}}{\int_{0}^{L} \kappa^{2/5}(l') dl'} \right]^{-1}.$$
 (8)

В точках с очень малой кривизной $\kappa(l)\approx 0$ она дает $h(l)\approx L/N_{\min}$. В точках с очень большой кривизной формула (8) переходит в (7); при этом константа такова, что $\int h^{-1}(l)dl\approx N_{\max}$. При любых $\kappa(l)$ не может получиться h=0 или $h=\infty$. Это свидетельствует о разумности формулы (8).

1.4. Двухэтапная стратегия. Численный расчет может называться хорошим, если он гарантирует пользователю требуемую точность. Для нежестких задач, когда в качестве аргумента выбирают время t, этого нетрудно добиться. Расчет до заданного момента T проводят на равномерной сетке сначала с некоторым умеренным числом шагов N. Затем увеличивают N в 2 раза и проводят новый расчет. При этом узлы t_n первой сетки точно совпадают с четными узлами удвоенной сетки. В совпадающих узлах находят разность двух сеточных решений $\mathbf{u}(t)$ и вычисляют норму разности (обычно это нормы L2 или C). В этом случае для оценки погрешности применим метод Ричардсона [Ричардсон 28г.; Марчук, Шайдуров; книга НН 78г.; Хайрер, Ваннер; Калиткин, Альшины 2005г.]. Если заданная точность не будет достигнута, то процедуру удвоения сетки повторяют.

Однако для жестких задач равномерная сетка непригодна. Для того, чтобы шаг равномерной сетки стал достаточно малым на участках быстрого изменения решения, нужны огромные числа узлов N. Даже переход к аргументу l не позволяет использовать равномерные сетки.

Существуют так называемые квазиравномерные сетки [книга НН, книга НН и Альшиных]. Для них разработана процедура удвоения N, позволяющая пользоваться методом Ричардсона. Но для построения такой сетки нужно заранее знать поведение всей функции $\mathbf{u}(l)$ и строить густую сетку там, где функция быстро меняется. Однако до начала решения задачи мы не знаем, где расположены такие участки. Поэтому в [лит-ра] была предложена двухэтапная процедура сгущения сеток. С учетом новейших работ она формулируется следующим образом.

Первый этап. Для начала расчета выбираем некоторые разумные значения N_{\min} и N_{\max} , входящие в формулу шага (8). В эту формулу входят так же L и интеграл. До начала расчетов они неизвестны, поэтому задаются их правдоподобные оценки. После этого проводят расчет с выбором шага согласно (8) и продолжают его до тех пор, пока $u_0(t_n) \equiv t_n$ не превысит значение T. Полученный номер узла есть N для построенной сетки l_n . При этом автоматически вычисляется значение полной длины дуги для данной сетки

Добавлено примечание ([AV10]): [Ричардсон 28г.; Марчук, Шайдуров; книга НН 78г.; Хайрер, Ваннер; Калиткин, Альшины 2005г.]

Добавлено примечание ([AV11]): [книга НН, книга НН и Альшиных]

Добавлено примечание ([AV12]): [лит-ра]

 $L = l_N$. Попутно в ходе расчета вычисляют интеграл в (8) по какой-нибудь квадратурной формуле; допустима даже формула левых прямоугольников.

Найденное в этом расчете значение N может не совпадать с исходным значением $N_{\rm max}$. Разумеется, вычисленное значение L и интеграла в (8) не будут совпадать с теми величинами, которые использовались для начала расчета.

Затем удвоим значения N_{\min} , N_{\max} и построим сгущенную примерно вдвое сетку. В этом расчете будем использовать значения интеграла и L, найденные на предыдущей сетке. Практика показывает, что при этом N окажется примерно вдвое большим, чем на предыдущей сетке. Однако новые значения интеграла и L могут сильно отличаться от предыдущих значений, поскольку на первой сетке они были выбраны произвольно. Достаточно очевидно, что новая сетка будет примерно вдвое подробнее предыдущей, однако ее четные узлы не будут совпадать с узлами предыдущей сетки. Поэтому оценка точности по правилу Ричардсона невозможна.

Снова удвоим N_{\min} , N_{\max} и построим третью сетку. На третьей сетке значение N уже почти удваивается по сравнению со второй сеткой, а значения интеграла и L будут близки к соответствующим величинам второй сетки. Значения четных узлов третьей сетки так же будут существенно ближе к узлам второй сетки. Однако правило Ричардсона применять по-прежнему нельзя.

Эту процедуру удвоения сетки повторяем до тех пор, пока четные узлы новой сетки не станут достаточно близкими к узлам предыдущей сетки. Различные критерии близости сеток сравнивались в [лит-ра]; наилучшим был признан следующий критерий. Обозначим шаги исходной сетки через $h_n = l_n - l_{n-1}, 1 \le n \le N$. Шаги удвоенной сетки обозначим через $\hat{h}_n, 1 \le n \le \hat{N}$; на практике $\hat{N} \approx 2N$, хотя точного равенства может не быть. Шагу h_n в удвоенной сетке соответствует сумма шагов $\hat{h}_{2n-1} + \hat{h}_{2n}$. Будем считать сетки близкими, если

$$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \left(\sqrt{\xi_n} - \frac{1}{\sqrt{\xi_n}} \right)^2} \le \eta, \quad \xi_n = \frac{\hat{h}_{2n-1} + \hat{h}_{2n}}{h_n}; \tag{9}$$

разумную величину η надо подбирать на основе практических расчетов. При этом значения интеграла и L на этих сетках будут совпадать с приемлемой точностью. При выполнении критерия (9) первый этап заканчивается.

Второй этап. Будем считать, что последняя сетка первого этапа уже достаточно хорошо адаптирована к участкам быстрого изменения решения. Поэтому дальнейшие сгущения сеток будем производить так, чтобы можно было применять метод Ричардсона для оценки погрешности. Для этого надо проводить сгущения так, чтобы последовательность удвоенных сеток была квазиравномерной. Простейший способ такого сгущения имеет следующий вид.

Добавлено примечание ([AV13]): [лит-ра]

Пусть исходная сетка имеет узлы l_n , $0 \le n \le N$ и шаги $h_n = l_n - l_{n-1}$. Пусть интервал сетки $[l_{n-1}, l_n]$ является внутренним: $2 \le n \le N-1$. Тогда узлы этого интервала являются четными узлами новой сетки \hat{l}_{2n-2} и \hat{l}_{2n} , а шаг h_n делится на два шага новой сетки \hat{h}_{2n-1} и \hat{h}_{2n} по следующим формулам:

$$\hat{h}_{2n-1} = h_n \frac{\sqrt[4]{h_{n-1}}}{\sqrt[4]{h_{n-1}} + \sqrt[4]{h_{n+1}}}, \quad \hat{h}_{2n} = h_n \frac{\sqrt[4]{h_{n+1}}}{\sqrt[4]{h_{n-1}} + \sqrt[4]{h_{n+1}}}, \quad 2 \le n \le N - 1.$$
(10)

Для левого граничного интервала шаг h_1 делится по формулам

$$\hat{h}_{1} = h_{1} \frac{\sqrt{h_{1}}}{\sqrt{h_{1}} + \sqrt{h_{2}}}, \quad \hat{h}_{2} = h_{1} \frac{\sqrt{h_{2}}}{\sqrt{h_{1}} + \sqrt{h_{2}}}.$$
(11)

Правый граничный шаг $h_{\scriptscriptstyle N}$ делится следущим образом:

$$\hat{h}_{2N-1} = h_N \frac{\sqrt{h_{N-1}}}{\sqrt{h_{N-1} + \sqrt{h_N}}}, \quad \hat{h}_{2N} = h_N \frac{\sqrt{h_N}}{\sqrt{h_{N-1} + \sqrt{h_N}}}.$$
 (12)

При таких формулах сгущения сетки число интервалов точно удваивается, а полная длина дуги L не меняется.

Можно доказать, что описанный способ удвоения сетки порождает последовательность квазиравномерных сеток. На такой последовательности правомерно однократное применение метода Ричардсона: по каждой паре соседних сеток можно находить разности функций в совпадающих узлах $l_n = \hat{l}_{2n}$, вычислять нормы этих разностей и определять асимптотически точное значение погрешности по известному порядку точности формулы интегрирования.

Однако этот способ имеет одно ограничение: нельзя пользоваться рекуррентным методом Ричардсона, то есть повышать порядок точности, используя 3 и более соседние сетки.

2. Апробация на тестах

2.1. Требования к тестам. Общепринятым способом апробации различных численных методов является расчет тестовых задач. Хороший тест должен удовлетворять нескольким требованиям. Во-первых, он должен содержать типичные трудности, на преодоление которых ориентирован исследуемый численный метод. Во-вторых, у него должно существовать легко реализуемое точное решение. Обычно под этим подразумевают, что точное

решение при любых значениях аргументов легко вычисляется с любой требуемой точностью. Реально для этого нужно, чтобы решение достаточно просто выражалось через элементарные функции; запись через специальные функции нежелательна, так как их реализация с любым требуемым числом значащих цифр далеко не всегда доступна. В-третьих, желательно, чтобы тест содержал один или несколько параметров, которыми можно регулировать его жесткость и другие качественные свойства.

При наличии такого теста апробация метода несложна. Проводят расчет исследуемым методом, причем этот метод выбирает сетку по своим естественным правилам. В узлах этой сетки вычисляют точное решение и непосредственно находят точное значение погрешности, то есть разности между сеточным и точным решением. При этом можно вычислить любую норму погрешности. Это будет достоверная оценка.

Задачи, в которых решение известно только в отдельных реперных точках, непригодны в качестве теста. Во-первых, они не позволяют найти нормы ошибки. Во-вторых, для сравнения с ними приходится проводить решение на таких сетках, некоторые узлы которых попадают в реперные точки. Для большинства алгоритмов такое построение сеток неестественно.

Для обыкновенных дифференциальных уравнений с аргументом t сравнительно легко конструируются различные тесты, в том числе для случаев высокой и сверхвысокой жесткости. Однако при переходе к аргументу l проблема существенно усложняется. Недостаточно, чтобы в элементарных функциях выражалось $\mathbf{u}(t)$. Нужно наличие решения в элементарных функциях так же для $\mathbf{u}(l)$. При этом все формулы не только прямого вычисления решения, но и вычисления обратных функций так же должны выражаться в элементарных функциях, причем достаточно просто. В противном случае, вычисление погрешностей при переходе от одного аргумента к другому будет практически невозможным.

До сих пор такие тесты не были построены. Нам удалось сконструировать два требуемых теста.

2.2. Гиперболический тест. Рассмотрим тестовое уравнение, содержащее один свободный параметр:

$$\frac{du}{dt} = f(u) \equiv sh(\lambda u), \quad \lambda > 0, \quad u(0) = u^0 > 0.$$
(13)

Точное решение этой задачи имеет следующий вид:

$$u(t) = \frac{1}{\lambda} \ln \frac{1 + B(t)}{1 - B(t)}, \quad B(t) = e^{\lambda t} t h(\lambda u^{0}/2). \tag{14}$$

Подставляя выражение (14) в формулу (2) и интегрируя, получим выражение для длины дуги:

$$l(t) = \frac{1}{\lambda} \ln \frac{sh[\ln(1 + B(t)) - \ln(1 - B(t))]}{sh(\lambda u^{0})}.$$
 (15)

Далее увидим, что жесткость задачи (13) быстро увеличивается с ростом λ . В задачу (13) нетрудно ввести еще один параметр — множитель α в правой части. Однако это не представляет интереса, так как заменой $\tilde{u}=u/\alpha$ и $\tilde{\lambda}=\alpha\lambda$ задача сводится форме (13).

Исследуем качественный вид решения (14). Функция u(t) положительна и монотонно возрастает. Она определена на конечном отрезке, поскольку

$$u(t) \rightarrow +\infty$$
 при $t \rightarrow t_* = \frac{1}{\lambda} \ln(cth(\lambda u^0/2)) > 0.$ (16)

Длина дуги при этом так же неограниченно возрастает: $l(t) \to +\infty$ при $t \to t_*$. Качественный вид решения u(t) изображен на рис. 1. Решение имеет продолжение влево на полуось $-\infty < t \le 0$.

Рис. 1. (Подпись: точное решение (14); <символ кружок> - начальная точка) Перейдем в уравнении (13) к переменной l. Учтем, что $1+f^2(u)=ch^2(\lambda u)$. Тогда форма записи (4) примет следующий вид:

$$\frac{du}{dl} = th(\lambda u), \quad \frac{dt}{dl} = \frac{1}{ch(\lambda u)}, \quad u(0) = u^0, \quad t(0) = 0, \quad 0 \le l \le +\infty.$$
 (17)

Для первого уравнения системы нетрудно написать точное решение:

$$u(l) = \frac{1}{\lambda} \ln(A(l) + \sqrt{A^{2}(l) + 1}), \quad A(l) = e^{\lambda l} sh(\lambda u^{0}), \quad 0 \le l \le +\infty.$$
 (18)

Время-функция так же явно выражается через длину дуги:

$$t(l) = \frac{1}{\lambda} \ln \frac{th[(1/2)\ln(A(l) + \sqrt{A^2(l) + 1})}{th(\lambda u^0/2)}, \quad 0 \le l \le +\infty.$$
 (19)

Качественный вид функции u(l) изображен на рис. 2. Интересно сопоставить эту зависимость с рис. 1. На рис. 1 решение резко возрастает при $t \to t_*$. Тем самым, численный расчет на этом участке возможен только очень малым шагом τ . Однако на рис. 2 этому участку соответствует правая часть графика, где наклон $du/dl \approx 1$. Тем самым, при аргументе l эту область решения можно проходить большим шагом h.

Рис. 2. (Подпись: точное решение (18), (19))

Приведем еще некоторые явные формулы, из которых особенно важно выражение кривизны:

$$t(u) = \frac{1}{\lambda} \ln \frac{th(\lambda u/2)}{th(\lambda u^0/2)},\tag{20}$$

$$l(u) = \frac{1}{\lambda} \ln \frac{sh(\lambda u)}{sh(\lambda u^0)},\tag{21}$$

$$\kappa = \frac{u_{tt}}{(1 + u_t^2)^{3/2}} = \frac{\lambda sh(\lambda u)}{ch^2(\lambda u)}.$$
 (22)

Кривизна немонотонно меняется вдоль интегральной кривой на рис. 1 или рис. 2. В левой части обоих графиков она возрастает, затем достигает максимума при условиях

$$\max \kappa = \frac{\lambda}{2}, \quad u_{extr} = \frac{1}{2\lambda} \ln\left(3 + 2\sqrt{2}\right), \quad t_{extr} = \frac{1}{2\lambda} \ln\left(\frac{1}{3 + 2\sqrt{2}} \frac{ch(\lambda u^0) + 1}{ch(\lambda u^0) - 1}\right). \tag{23}$$

и затем монотонно убывает до 0 в правой части графиков. Отсюда хорошо видна связь параметра λ с максимальной кривизной интегральной кривой и жесткостью задачи.

Данный тест является уникальным. Во-первых, в нем все значимые величины выражаются друг через друга с помощью несложных комбинаций элементарных функций. Во-вторых, выбирая большие значения λ , можно сделать задачу сколь угодно жесткой.

Трудность задачи. Трудность определяется тем числом шагов N, которое необходимо сделать при оптимальном выборе шага. Из формулы оптимального шага (8) нетрудно понять, что это число шагов пропорционально входящему в нее интегралу

$$I = \int_{0}^{L} \kappa^{2/5}(l')dl' \tag{24}$$

Величина этого интеграла зависит не только от кривизны $\kappa(l)$, но и от отрезка интегрирования [0,L] . Такой критерий определения трудности можно применять для любых тестовых или прикладных задач.

Для гиперболического теста зависимость $\kappa(l)$ можно получить, подставляя формулу (18) в формулу (22):

$$\kappa(l) = \frac{\lambda A(l)}{1 + A^2(l)} = \frac{\lambda e^{\lambda l} sh(\lambda u^0)}{1 + e^{2\lambda l} sh^2(\lambda u_0)}$$
(25)

Подстановка величины (25) в интеграл (24) и замена переменных $\zeta = e^{(2/5)\lambda l} (sh(\lambda u^0))^{2/5}$ дают

$$I = \int_{0}^{L} \frac{\lambda^{2/5} e^{(2/5)\lambda l} s h^{2/5} (\lambda u^{0})}{(1 + e^{2\lambda l} s h^{2} (\lambda u^{0}))^{2/5}} dl = \frac{5}{2} \lambda^{-3/5} \int_{\zeta_{0}}^{\zeta_{L}} \frac{d\zeta}{(1 + \zeta^{5})^{2/5}}.$$
 (26)

Пределы интегрирования $0 < \zeta_0 < \zeta_L < +\infty$, поэтому последний интеграл в (26) не превышает 2. С учетом множителя $\lambda^{-3/5}$ перед интегралом видно, что данный тест нельзя назвать по настоящему трудным. Однако более хорошего теста с такими уникальными выражениями через элементарные функции найти не удалось.

2.3. Тригонометрический тест. Упомянем еще один тест, в котором явно вычисляется длина дуги и все имеющиеся величины выражаются через элементарные функции как аргумента t, так и аргумента l. Приведем набор формул этого теста (текстовые пояснения опускаем, поскольку они аналогичны гиперболическому тесту):

$$\frac{du}{dt} = tg(\lambda u)(27)$$
(пямбда > 0)
$$u(t) = (28)$$
(29)
(30)
(31)
(32)
(33)

(34)

Качественный вид решения при аргументе t изображен на рис. 3, а при аргументе l — на рис. 4. Поскольку мы положили $\lambda > 0$, то решение u(t) монотонно возрастает на конечном промежутке времени от 0 до $t_* = lambda^-1...$ При этом функция достигает значения u_* тождественно = $u(t_*) = pi$ / (2 lambda), а производная в этой точке $u_*t(t_*) = +inf$. Решение не имеет продолжения за точку t_* .

Если $u^0 \to 0$, то $t_* \to +inf$ и полная длина дуги $l_* \to +inf$, хотя $u_* \to +inf$ остается конечным. Последнее объясняется тем, что при $u^0 \to 0$ правая часть $f(u^0) \to 0$, и движение вдоль интегральной кривой начинается очень медленно, так что полное время движения стремится к бесконечности; соответственно стремится к бесконечности длина дуги.

Отметим, что можно рассмотреть случай lambda < 0. В этом случае решение u(t) будет монотонно убывать, асимптотически стремясь к 0 при $t \rightarrow +inf$. Это решение несколько напоминает известный тест Далквиста.

Тригонометрический тест не позволяет получить задачи произвольно высокой жесткости. Поэтому он менее интересен для тестирования методов, чем гиперболический тест.

3. Численные расчеты

3.1. Условия тестирования. Для численных иллюстраций был выбран гиперболический тест со следующим набором параметров $\lambda = 10^{\nu}$, $\nu = 1, 2, ..., 6$. Для каждого λ начальный и конечный моменты расчета определялись так, чтобы в них выполнялось условие $\kappa = 1$. Для t = 0, согласно формуле (), полагалось

$$u^{0} = \frac{1}{\lambda} \operatorname{arcsh}\left(\frac{\lambda - \sqrt{\lambda^{2} - 4}}{2}\right) \tag{35}$$

Далее выполнялся расчет по выбранной схеме интегрирования; в нем вычислялись u, L и κ . Кривизна κ сначала возрастала от 1 до $\sim \lambda/2$, а затем начинала убывать. Когда выполнялось условие $\kappa < 1$, то расчет прекращался.

Опишем расчет κ_n . Для всех использованных схем он выполнялся одинаково по формулам точности $\mathrm{O}(h)$. В начальный момент времени $t_0=0$, согласно выбору начального условия, $\kappa_0=1$, $l_0=0$, а вектор правых частей системы (4) для задачи (17) вычисляется по начальным данным. Мы можем вычислить величину первого шага h_1 по кривизне κ_0 по формуле (8), провести вычисление по выбранной схеме и найти узел l_1 и величины u_1 , t_1 в этом узле.

По найденным u_1 , t_1 вычисляем правые части системы (17) в узле l_1 . Находим длину вектора изменения правых частей и делим ее на величину шага по длине дуги; это дает нам кривизну в первом узле

$$\kappa_{\rm i} =$$
 (36)

с точностью $\mathrm{O}(h)$. Аналогичная процедура повторяется на всех последующих шагах.

Для расчета необходимо выбрать настроечные параметры формулы (8) для первой сетки. Мы не стали проводить специальные настройки и взяли следующие значения: $N_{\min}=6$, $N_{\max}=20$, L=1, $\int ... dl=1$. Для перехода с первого этапа сгущения сеток на второй выбиралось значение критерия $\eta=0.1$.

Надежность программы. В жестких задачах сравнительно легко происходит срыв расчета, то есть программа оказывается недостаточно надежной. Опишем здесь две типичные ситуации.

 ${f 1}^0$ В жестких задачах при аргументе t правые части f_m нередко оказываются сопоставимыми с максимально допустимыми на машине числами. При аргументе l правые части невелики: сумма их квадратов есть 1. Однако при вычислении знаменателей этих правых частей суммируются квадраты величин f_m . При этом может произойти переполнение в промежуточных вычислениях. Это приводит к срыву расчетов.

Поэтому надо тщательно продумывать написание правых частей ОДУ и при появлении слишком больших чисел автоматически производить явное сокращение максимальных множителей в числителях и знаменателях формул. По существу, это означает введение автоматического масштабирования. Этот прием полезен и для не особенно жестких задач.

 2^{0} Задачи малой жесткости все схемы считают успешно. Однако при достаточном увеличении жесткости каждая схема может сорваться. В наших расчетах схема ERK4 успешно работала при $\lambda=10^{4}$, но срывалась при $\lambda=10^{5}$. Схемы ERK2 и ERK1 работали при $\lambda=10^{5}$, но срывались при $\lambda=10^{6}$.

Анализ показал, что на первом этапе шаг $h_{\rm l}$ оказывается огромным, и дает сетку только с одним интервалом: N=1. При этом неправильно работают формулы дробления сетки на втором этапе. Удалось ликвидировать срывы, следующим образом исправив формулы второго этапа (10-12).

Если N=1, то шаг h_1 делится точно пополам. Если N=2, то производится расчет только для граничных интервалов (11, 12). Если $N \ge 3$, то включается вычисление и для внутренних интервалов (10).

Выбор схемы. Формула выбора шага (7) геометрически согласовывалась лишь со схемами первого порядка точности. Однако мы провели расчет с несколькими схемами разного порядка точности. Наиболее просты и мало

трудоемки явные схемы. Поэтому мы взяли три явные схемы Рунге-Кутта ERK1, ERK2, ERK4 точностей $\mathrm{O}(h)$, $\mathrm{O}(h^2)$ и $\mathrm{O}(h^4)$ соответственно. Обычно надежность схем уменьшается с повышением их порядка точности, причем на жестких задачах это сказывается особенно сильно. Поэтому такое тестирование различных схем интересно.

3.2. Результаты расчетов. Все расчеты проводились с аргументом l. На каждой сетке локальная погрешность в каждой точке сетки l_n находилась путем вычитания численного решения u_n и t_n из точного u(l) и t(l). Затем вводилась интегральная погрешность

$$\Delta = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^{N} \frac{(u_n - u(l_n))^2 + (t_n - t(l_n))^2}{u^2(l_n) + t^2(l_n)} h_n}{\sum_{n=1}^{N} h_n}}.$$
(37)

Такое определение погрешности удобно следующим: а) оно учитывает не абсолютные погрешности, а относительные, то есть адаптируется к масштабам конкретного решения; б) одновременно учитывает ошибки обеих функций системы (17); в) автоматически настраивается на длину дуги; г) является интегральной, что облегчает визуализацию погрешности и проведение сравнений. На дальнейших рисунках будет показана зависимость нормы погрешности от числа шагов сетки *N*. Рисунки выполнены в двойном логарифмическом масштабе. Тогда прямая линия означает степенной характер зависимости, а тангенс угла ее наклона есть эффективный порядок точности. Это легко позволяет проверить, соответствует ли скорость сходимости теоретическому порядку точности схемы.

На каждой линии точки первого этапа обозначены светлыми кружками, а точки второго этапа – черными.

Точность. На рис. 5 показаны погрешности для схем разного порядка точности ERK1, ERK2, ERK4 при одинаковой жесткости $\lambda=10^4$. Эта жесткость не слишком велика, и все схемы ведут расчет в обычном режиме. Видно, что начала всех линий близки и соответствуют очень большой погрешности $\sim 10^0$. Начала всех линий искривлены, но уже в пределах первого этапа линии переходят в прямые, а их наклоны соответствуют теоретическим порядкам точности.

Поэтому при увеличении числа узлов погрешность убывает тем быстрее, чем выше порядок точности схемы. Данные расчеты проводились до $N \sim 10^4$ узлов. При таком числе узлов погрешность для схемы ERK1 убывает до $\sim 10^{-3}$, а для схемы ERK2 – до $\sim 10^{-6}$. Для схемы ERK4 погрешность успевает выйти на ошибки округления, которые для данного λ составляют $\sim 10^{-10}$. Такие большие

ошибки округления (при вычислениях теряется 6 знаков) связаны с достаточно большой жесткостью задачи.

Рис. 5. Погрешности схем ERK для $\lambda = 10^4$. Около каждой кривой указан порядок точности схемы. < Кружки> - первый этап, < жирные точки> - второй этап.

Линии вторых этапов являются прямыми и практически точно продолжают прямые первых этапов; не наблюдается никакого скачка или излома между первым и вторым этапами. Последнее обстоятельство является неожиданным. Во всех ранее проводимых работах между первым и вторым этапом наблюдались изломы или скачки. По-видимому, это связано с тем, что данная работа является первым расчетом, в котором использован тест с явными выражениями всех величин через длину дуги.

Заметим, что для всех схем на первом этапе число узлов при каждом сгущении увеличивается не в 2 раза, особенно на первом сгущении; но на последующих сгущениях первого этапа отношение чисел интервалов N приближается к 2. Это свидетельствует о том, что заключительная сетка первого этапа близка к квазиравномерной.

Разумеется, на втором этапе числа шагов N увеличиваются вдвое при каждом сгущении. Точное удвоение начинается с заключительной сетки первого этапа.

Отметим важное обстоятельство. Формула (7) выбора оптимального шага согласована лишь со схемами первого порядка точности, и само κ мы вычисляем по формуле точности O(h). Однако это не препятствует тому, чтобы схемы ERK2 и ERK4 реализовали свой, более высокий порядок точности. Это свидетельствует об удачном выборе формулы оптимального шага.

Надежность. На каждом из рис. 6-8 даны графики погрешности только одной из схем ERK, зато для разных жесткостей. Значения жесткости указаны около каждой кривой. Сравним эти рисунки.

 1^0 На рис. 6 приведены расчеты для схемы ERK1. Схема оказалась исключительно надежной, и даже при $\lambda=10^8$ не было обнаружено никаких срывов расчета; лишь при $\lambda=10^{10}$ расчет сорвался. При небольших $\lambda<\sim100$ линии погрешности с самого начала являются прямыми с наклоном -1, соответствующим теоретическому порядку точности. При большей жесткости начала кривых искривлены, и могут стать даже немонотонными. Однако уже в пределах первого этапа линии становятся прямыми с наклоном -1, а затем гладко переходят в прямые второго этапа.

Рис. 6. Погрешности схемы ERK1 для различных жесткостей $\lambda = 10^{\nu}$; около линий указаны значения ν . <Кружки> - первый этап, <Жир. точка> - второй этап.

При повышении жесткости от $\lambda=10$ до $\lambda=10^8$ происходит ухудшение точности расчета при одинаковом числе узлов. Однако наблюдаемую закономерность такого ухудшения мы не будем анализировать, так как она может относиться только к выбранному тесту.

Добавлено примечание ([AV14]): Объединить абзапы?

Заметим, что при всех жесткостях переход с первого на второй этап происходит при почти одинаковом уровне погрешности ~ 0.02 (но разумеется, при разных числах узлов). Остается открытым вопрос - является это обстоятельство случайным или закономерным? Ведь переход на второй этап производится не по уровню погрешности, а по критерию установления квазиравномерности сетки.

 2^0 Расчеты по схеме ERK2 дали срыв при $\lambda=10^8$, то есть несколько ранее, чем для схемы ERK1. Поэтому по надежности схема ERK2 уступает схеме ERK1, как и следовало ожидать. Кривые погрешностей для жесткостей $\lambda \leq 10^7$ приведены на рис. 7.

Рис. 7. Погрешности схемы ERK2; обозначения идентичны рис. 6.

Поведение кривых качественно соответствует тому, что наблюдалось для схемы ERK1. Линии вторых этапов являются прямыми с наклоном -2, что соответствует теоретическому порядку точности. Конечные участки первых этапов так же являются прямыми с наклоном -2, и они гладко сопрягаются со вторыми этапами. Разумеется, поведение начальных участков первых этапов нерегулярно.

Здесь так же переход с первого на второй этапы происходит при почти одинаковом уровне погрешности ~ 0.0003 . Этот уровень погрешности существенно меньше, чем для схемы ERK1.

 3^{0} Расчеты по схеме ERK4 срывались при $\lambda = 10^{6}$. Таким образом, схема оказалась менее надежной, чем ERK2, не говоря уже о ERK1. Кривые погрешности для $\lambda \leq 10^{5}$ приведены на рис. 8.

Рис. 8. Погрешности схемы ERK4; обозначения идентичны рис. 6.

На рис. 8 для $\lambda \leq 10^4$ все линии вторых этапов являются прямыми с наклоном -4, что соответствует теории. Концы линий первых этапов так же являются прямыми с наклоном -4, и гладко сопрягаются с линиями вторых этапов. Видно, что при этих жесткостях схема ERK4 работает очень надежно.

Однако при $\lambda=10^5$ начало линии является сильно искривленным, и лишь при $N\sim100$ линия становится прямой с теоретическим наклоном 4. При этом первый этап расчета фактически отсутствует (N=1), а сетка второго этапа оказывается не адаптированной, а просто равномерной. Поэтому при $\lambda=10^5$ не происходит построения оптимальной сетки. Можно сказать, что при такой жесткости схема ERK4 работает на грани срыва.

Пока схема ведет себя надежно, расстояния между последовательными кривыми 1-2, 2-3, 3-4 уменьшаются. Однако расстояние между прямолинейными участками 4-5 сильно увеличивается. Это показывает, что, когда предел надежности схемы нарушен, точность расчета сразу ухудшается.

В следствие высокого порядка точности схемы ERK4 погрешности быстро убывают при увеличении числа узлов. Поэтому каждая линия успевает выйти на ошибки округления. При всех жесткостях это происходит при числе узлов $N \sim 10^4$. Но уровень ошибок округления существенно возрастает при увеличении

Добавлено примечание ([AV15]): Градус вместо нолика

 λ : это $\sim 10^{-14}$ при $\lambda = 10$, $\sim 10^{-13}$ при $\lambda = 100$, $\sim 10^{-12}$ при $\lambda = 10^3$ и $\sim 10^{-10}$ при $\lambda = 10^4$ и 10^5 .

Замечание. Срывы всех схем зависят не только от величины λ , но и от параметров для выбора начальной сетки (8): N_{\min} , N_{\max} , L и интеграла. Мы намеренно выбрали небольшие значения этих параметров, чтобы тестировать схемы в трудных условиях. Если увеличивать N_{\min} и N_{\max} , а также найти более удачные формулы для выбора L и интеграла, можно построить алгоритмы более высокой надежности с использованием тех же схем.

3.3. Смешанная стратегия. Рассмотрим несложный способ повышения надежности алгоритма. Схема ERK1 наиболее надежна среди явных схем. Проведем расчеты первого этапа по этой схеме. Результатом расчета даже в случае очень высокой жесткости будет построение хорошей начальной сетки для второго этапа.

Поскольку на первом этапе построена хорошая сетка, второй этап можно выполнять по менее надежной, но гораздо более точной схеме ERK4. При этом следует ожидать гораздо более высокой точности, чем при использовании схемы ERK1 на обоих этапах. Такая стратегия может дать хорошие результаты в тех случаях, когда расчет только по схеме ERK4 срывается из-за большой жесткости.

Были проведены расчеты по сравнению смешанной и «чистой» стратегий. На рис. 9 показаны результаты при умеренной жесткости $\lambda=10^3$. На нем видны две прямые линии. Верхняя прямая — расчет обоих этапов по схеме ERK1; ее наклон есть -1. Нижняя линия — расчет обоих этапов по схеме ERK4; ее наклон равен -4. Если выполнить первый этап по схеме ERK1, и затем перейти на схему ERK4, то второй этап расчета точно ложится на нижнюю линию.

Рис. 9. Погрешности для $\lambda = 10^3$. Около линий подписаны схемы. <Кружочки> - первый этап, <жирные точки> - второй этап.

Поэтому при умеренной жесткости смешанная стратегия дает ту же самую точность, что «чистая» схема высокого порядка точности. Получается только два преимущества. Первое — небольшое уменьшение объема расчетов, так как первый этап выполняется по менее трудоемкой схеме ERK1. Второе — увеличение надежности, так как начало расчетов выполняется по более надежной схеме ERK1.

На рис. 10 показаны аналогичные расчеты для значительной жесткости $\lambda=10^5$. Здесь картина иная. «Чистый» расчет по схеме ERK4 близок к срыву и прямолинейный участок его кривой лежит довольно высоко. Расчет по смешанной стратегии надежно проходит первый этап, и затем резким скачком переходит ко второму этапу. Его линия второго этапа лежит существенно ниже, уже почти сразу приближаясь к ошибкам округления. Поэтому в данном случае смешанная стратегия дает существенное превосходство в точности. Она дает также заметный выигрыш в трудоемкости, так как расчет можно закончить на одну-две сетки раньше.

Рис. 10. Погрешности для $\lambda = 10^5$; обозначения идентичны рис. 9.

На рис. 11 показан расчет для большей жесткости $\lambda=10^6$. Расчет по «чистой» схеме ERK4 здесь срывается на первой же сетке. Однако расчет по смешанной стратегии благополучно проходит. При этом после первого этапа происходит переход на схему ERK4, и сразу же достигаются ошибки округления. Для такого уровня при «чистом» использовании схем ERK1 или даже ERK2 пришлось бы провести еще много сгущений сеток. Эти примеры наглядно иллюстрируют преимущество смешанной стратегии.

Рис. 11. Погрешность для $\lambda = 10^6$; обозначения идентичны рис. 9.

4. Заключение

Проведены численные расчеты жестких задач для ОДУ с оптимальным выбором шага по кривизне интегральной кривой. Построен тест, в котором решение выражается в элементарных функциях при использовании в качестве аргумента как времени t, так и длины дуги l. Этот тест позволил провести точное и количественное сравнение различных методов решения.

Показано, что при оптимальном выборе шага расчеты задач даже высокой жесткости удается проводить по явным схемам Рунге-Кутты. При этом схема первого порядка точности обладает наибольшей надежностью (расчет срывается только при очень высоких жесткостях), но точность ее мала. Схема второго порядка имеет заметно меньшую надежность, но более высокую точность. Схема четвертого порядка наиболее точна, но наименее надежна. Найдена смешанная стратегия, при которой первый этап — построение удовлетворительно адаптированной к решению сетки — происходит по схеме первого порядка; второй этап — сгущение адаптированной сетки — выполняется по схеме четвертого порядка. Это обеспечивает хорошую надежность и высокую точность численного метода.

Данная работа поддержана грантом РФФИ №18-01-00175.

Библиографический список

- 1 Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999, 685 с.
- 2 Шалашилин В.И., Кузнецов Е.Б. Метод продолжения решения по параметру и наилучшая параметризация. -- М.: Эдиториал УРСС, 1999.

Расчеты на тестах:

- 3 Белов А.А., Калиткин Н.Н., Пошивайло И.П. Геометрически-адаптивные сетки для жестких задач Коши // Доклады Академии наук. **466**:3 (2016), 276–281.
- 4 Белов А.А., Калиткин Н.Н. Выбор шага по кривизне для жестких задач Коши // Математическое моделирование. **28**:11 (2016), 97–112.
- 5 Белов А.А., Булатов П.Е., Калиткин Н.Н. Сравнительный анализ алгоритмов автоматического выбора шага для жестких задач Коши // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 146 (2019), 34 с.
- 6 Белов А.А., Калиткин Н.Н. Экономичные методы численного интегрирования задачи Коши для жестких систем ОДУ // Дифференциальные уравнения. 55:7 (2019), 907–918.