Труды Института математики НАН Беларуси. Минск. 2004. Том 12, No. 1. С. 45–48

УДК 519.62

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ ЗАДАЧ НА ОСНОВЕ ПРОЦЕССОВ УСТАНОВЛЕНИЯ

Б. В. Фалейчик

A general scheme of construction of numerical algorithms for the solution of stiff systems of ordinary differential equations is described. It is based on a class of analytic iteration processes which generalize Picard process. The computational formulae and basic convergence results are given. The proposed algorithms allow to increase accuracy of approximate solution without decreasing the discretization step.

Введение

Трудность численного решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений выражается в нескольких аспектах. При использовании традиционных явных пошаговых методов, основы которых были заложены более века назад, возникают сильные ограничения на длину шага интегрирования, обусловленные неудовлетворительными свойствами устойчивости таких методов. Начиная с пятидесятых годов двадцатого столетия, для интегрирования жестких задач стали применяться неявные одно- и многошаговые методы, обладающие хорошими свойствами устойчивости. Они позволяют находить приближенное решение жестких задач на достаточно больших шагах. Наиболее эффективными на данный момент считаются неявные коллокационные методы типа Рунге–Кутты. Однако и эти методы обладают существенным недостатком, который состоит в необходимости решения на каждом шаге системы нелинейных уравнений, размерность которой пропорциональна размерности дифференциального уравнения и количеству стадий метода. Поэтому машинная реализация таких методов является весьма громоздкой, и, кроме того, возникающие системы нелинейных уравнений в общем случае могут быть неразрешимы. Применение неявных методов также затрудняется необходимостью вычисления матрицы Якоби.

Стоит затронуть еще один важный момент, не относящийся напрямую к проблеме жесткости. Это вопрос о контроле точности приближенного решения. При пошаговом интегрировании для этих целей обычно используется техника «откатов»: если вычисленная (по правилу Рунге, например) оценка погрешности недостаточно мала, полученное приближение отбрасывается и вычисления повторяются заново с уже меньшей длиной шага. Такой подход, во-первых, не экономичен, так как полностью игнорируется полученное на данном шаге приближенное решение, которое может быть достаточно близким к точному. Вместо того, чтобы уменьшать шаг и повторять такие же вычисления, можно попытаться каким-то образом уточнить уже имеющееся приближение. Во-вторых, несколько «откатов» подряд могут привести к недопустимо малым значениям шага.

Keywords: *keywords*
2000 Mathematics Subject Classification: 65L05, 65L07

Таким образом, возникает потребность в методах, которые бы 1) позволили интегрировать жесткие начальные задачи на шагах естественной длины, 2) были просты в реализации и 3) позволяли повышать точность приближенного решения без уменьшения шага. Описанию подобных вычислительных алгоритмов посвящена эта работа.

1. Аналитические итерационные процессы установления

Пусть дана задача Коши для системы из n обыкновенных дифференциальных уравнений

$$u'(x) = \varphi(x, u(x)), \quad u(x_0) = u_0, \tag{1.1}$$

решение которой надо найти на отрезке $[x_0, x_0 + h]$. Предположим, что функция φ в правой части (1.1) удовлетворяет условию Липшица по второму аргументу с константой L_0. Путем замены переменных эта задача представима в виде интегрального уравнения Вольтерры на отрезке $[0, 1]$:

$$v = \mathcal{S}F(v). \tag{1.2}$$

Здесь $v \in V^n = C([0,1], \mathbb{R}^n)$ или $L_2([0,1], \mathbb{R}^n)$,
$\mathcal{S}$ — оператор интегрирования, $\mathcal{S}v(x) = \int_0^x v(z)dz$,
$F : V^n \to V^n, \quad (F(v))(x) = f(x, v(x)), \quad f(x, v) = h\varphi(x_0 + xh, u_0 + v), \quad x \in [0, 1].$

Решение системы интегральных уравнений (1.2) обозначим v^*. Оно существует и единственно, так как функция f липшицева по второму аргументу с константой $L = L_0 h$, что гарантирует сходимость процесса Пикара.

В [1] описано семейство аналитических процессов последовательных приближений для решения уравнения (1.2), построенное на основе принципа установления. Оно базируется на дискретизации по времени интегро-дифференциального уравнения

$$\frac{\partial}{\partial t} y(x, t) = -y(x, t) + \int_0^x f(z, y(z, t))dz. \tag{1.3}$$

Доказано, что при условии дифференцируемости функции f любое решение уравнения (1.3) стремится к v^* в пространстве $C([0, 1], \mathbb{R}^n)$:

$$\|Y(t) - v^*\|_\infty \to 0 \quad \text{при} \quad t \to \infty,$$

где $Y : [0, +\infty) \to V^n, \quad (Y(t))(x) = y(x, t),$
$\|v\|_\infty = \max\limits_{x \in [0,1]} \|v(x)\|, \quad \|\cdot\|$ — произвольная норма в $\mathbb{R}^n$.

Аналогичное утверждение о сходимости в норме пространства $L_2([0,1], \mathbb{R}^n)$ удается доказать без требования дифференцируемости f.

Уравнение установления (1.3) можно записать в операторной форме

$$Y'(t) = \mathcal{F}(Y(t)). \tag{1.3$'$}$$

Здесь $\mathcal{F} : V^n \to V^n, \quad \mathcal{F} = \mathcal{S}F - \mathcal{I}; \quad \mathcal{I} : V^n \to V^n$ — тождественное отображение. Присоединяя к уравнению (1.3$'$) начальное условие $Y(0) = v_0$ и применяя для приближенного решения получившейся задачи Коши произвольный явный метод Рунге–Кутты (РК), получим множество аналитических процессов последовательных приближений к v^*:

$$v_{k+1} = \mathcal{M}_k(v_k), \quad k = 0, 1, \ldots \tag{1.4}$$

Здесь $M_k : V^n \to V^n$,

$$\mathcal{M}_k(v) = v + \tau_k \sum_{i=1}^{s} b_i \, \mathcal{K}_i(v), \tag{1.5a}$$

$$\mathcal{K}_i(v) = \mathcal{F}\left(v + \tau_k \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \, \mathcal{K}_j(v)\right), \quad i = \overline{1, s}, \tag{1.5b}$$

a_{ij}, b_i — вещественные коэффициенты метода. Итерационные процессы вида (1.4) будем называть итерационными процессами установления. Если в качестве базового метода РК в (1.5) взять метод Эйлера, получится простейший процесс типа (1.4). Он имеет вид

$$v_{k+1} = (1-\tau_k)v_k + \tau_k \mathcal{S}F(v_k) \tag{1.6}$$

и в дальнейшем будет называться обобщенным процессом Пикара, так как при $\tau_k = 1$ процесс (1.6) превращается в классический метод последовательных приближений Пикара. В [1] приведены результаты о сходимости обобщенного процесса Пикара, а также показаны преимущества этого процесса при решении жестких задач по сравнению с классическим.

2. Общая схема построения вычислительных алгоритмов

Итерационные процессы установления (1.4) являются аналитическими, и в общем случае их использование сопряжено с громоздкими вычислениями, которые практически не поддаются машинной реализации. Для построения вычислительных алгоритмов на их основе рассмотрим один шаг итерационного процесса установления, определяемый формулами (1.5). При его реализации необходимо выполнять следующие виды операций: умножение функции на скаляр, сложение функций, вычисление оператора F от функции и интегрирование. Нам нужно найти способ как можно точнее выполнять эти операции на ЭВМ. Так, умножение на скаляр, сложение и интегрирование функций могут легко выполняться в случае, когда каждая компонента приближенного решения представляет собой конечную линейную комбинацию m известных линейно независимых базисных функций $\phi_l^m : [0,1] \to \mathbb{R}$:

$$v_k = v_k^m = \sum_{l=1}^{m} \eta_l \phi_l^m, \quad \eta_l \in \mathbb{R}^n, \tag{2.1}$$

$$v_k^m \in V_m^n = \left\{ \sum_{l=1}^{m} \alpha_l \phi_l^m \;\middle|\; \alpha_l \in \mathbb{R}^n \right\}. \tag{2.2}$$

В этом случае функция v_k полностью описывается набором коэффициентов $(\eta_1, \ldots, \eta_m)$, и для умножения её на скаляр достаточно умножить на него все η_l. Сложение двух таких функций, очевидно, эквивалентно сложению соответствующих коэффициентов. Основная трудность заключается в том, что на каждой стадии (1.5) мы вычисляем линейные комбинации функций вида $\mathcal{S}F(v_k)$ и v_k, а в общем случае $\mathcal{S}F\left(\sum_{l=1}^m \eta_l \phi_l^m\right) \notin V_m^n$. В связи с этим возникает необходимость в аппроксимации функций $\mathcal{S}F(v_k^m)$ элементами множества V_m^n.

Для каждого целого $m \geq 1$ множество функций (2.2), очевидно, образует подпространство пространства V^n. Кроме этого, в пространстве V^n рассмотрим еще одно подпространство

$$U_m^n = \left\{ \sum_{l=1}^{m} \alpha_l \varphi_l^m \;\middle|\; \alpha_l \in \mathbb{R}^n, \quad \varphi_l^m : [0,1] \to \mathbb{R} \right\}.$$

Функции φ_l^m при фиксированном m предполагаются линейно независимыми. Введем также линейные операторы проектирования

$$\Pi_m : V^n \to U_m^n, \quad \Pi_m^2 = \Pi_m,$$

которые фактически определяют способ аппроксимации функций из V^n элементами подпространства U_m^n. Будем предполагать, что проектор Π_m полностью определяется набором линейных операторов

$$Q_l^m : V^n \to \mathbb{R}^n,$$

$$\Pi_m v = \sum_{l=1}^{m} Q_l^m(v) \varphi_l^m, \quad \forall v \in V^n.$$

Итак, главный принцип построения вычислительных алгоритмов на основе итерационных процессов установления будет состоять в поиске приближенного решения исходного интегрального уравнения (1.2) среди элементов некоторого подпространства V_m^n пространства V^n. Этот принцип во многом схож с методом проекций для приближенного решения интегральных уравнений Фредгольма, описанным в [2, сс. 75-81]. В такой постановке один шаг итерационного процесса установления, заключающийся в переходе от текущего приближения v_k^m к уточненному v_{k+1}^m, эквивалентен отображению $\eta \mapsto \hat{\eta}$, где коэффициенты $\{\hat{\eta}_l\}_{l=1}^m = \hat{\eta}$ определяют

$$v_{k+1}^m = \sum_{l=1}^m \hat{\eta}_l \phi_l^m,$$

а $\eta = \{\eta_l\}_{l=1}^m$, см. (2.1).

Как уже говорилось, для осуществления такого перехода нужно, чтобы функции v_k и $\mathcal{S}F(v_k)$ находились в одном подпространстве V_m^n. Для этого приблизим $F(v_k)$ с помощью проектора Π_m, а затем вычислим интеграл:

$$\mathcal{S}F(v_k^m) \approx \mathcal{S}\Pi_m F(v_k^m).$$

Точное нахождение неопределенного интегала не представляет особых затруднений, так как

$$\mathcal{S}\Pi_m F(v_k^m) = \mathcal{S}\sum_{l=1}^m Q_l^m(F(v_k^m))\varphi_l^m = \sum_{l=1}^m \sigma_l \mathcal{S}\varphi_l^m, \tag{2.3}$$

а функции $\mathcal{S}\varphi_l^m$ можно найти заранее. В этом случае приближенное решение будет представимо в виде разложения по базису, состоящему из функций $\mathcal{S}\varphi_l^m$, то есть $\phi_l^m = \mathcal{S}\varphi_l^m$.

Таким образом, чтобы формально получить из данного итерационного процесса установления (1.4) алгоритм, пригодный для численной реализации, достаточно в формулах (1.4), (1.5), заменить $\mathcal{F}$ на $\mathcal{F}^m$, а все пространство V^n — на подпространство V_m^n:

$$v_{k+1}^m = \mathcal{M}_k^m(v_k^m), \quad \mathcal{M}_k^m : V_m^n \to V_m^n, \tag{2.4a}$$

$$\mathcal{M}_k^m(v) = v + \tau_k \sum_{i=1}^s b_i\, \mathcal{K}_i^m(v), \tag{2.4b}$$

$$\mathcal{K}_i^m(v) = \mathcal{F}^m\left(v + \tau_k \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\, \mathcal{K}_j^m(v)\right), \quad v \in V_m^n, \quad i = \overline{1, s}, \tag{2.4c}$$

$$\mathcal{F}^m = \mathcal{S}\Pi_m F - \mathcal{I}, \quad V_m^n = \mathcal{S}U_m^n = \left\{\sum_{l=1}^m \alpha_l \mathcal{S}\varphi_l^m \,\middle|\, \alpha_l \in \mathbb{R}^n\right\}.$$

Получаемые процессы последовательных приближений в дальнейшем будем называть дискретными итерационными процессами установления. Для вывода расчетных формул, описывающих эти процессы, вычислим $\mathcal{F}^m$ на произвольном элементе пространства V_m^n. Пусть $v = \sum_{l=1}^m \alpha_l \phi_l^m$, тогда

$$\mathcal{F}^m(v) = \mathcal{S}\Pi_m F(v) - v = \mathcal{S}\sum_{l=1}^m Q_l^m\Big(F\Big(\sum_{p=1}^m \alpha_p \phi_l^m\Big)\Big)\varphi_l^m - \sum_{l=1}^m \alpha_l \mathcal{S}\varphi_l^m =$$

$$= \sum_{l=1}^m \left(Q_l^m\Big(F\Big(\sum_{p=1}^m \alpha_p \phi_l^m\Big)\Big) - \alpha_l\right)\phi_l^m. \tag{2.5}$$

По формуле (2.5) получаем выражение для коэффициентов $\kappa_i = \{\kappa_{i,l}\}_{l=1}^m \in \mathbb{R}^{mn}$, определяющих

$\mathcal{K}_i^m(v_k^m) = \sum_{l=1}^m \kappa_{i,l}\,\phi_l^m$ аналогично (1.5b):

$$\mathcal{K}_i^m(v_k^m) = \mathcal{F}^m\left(\sum_{l=1}^m\Bigl(\eta_l + \tau_k\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}\kappa_{j,l}\Bigr)\phi_l^m\right) = \sum_{l=1}^m\left(Q_l^m\Bigl(F\Bigl(\sum_{p=1}^m\gamma_{i,p}\phi_l^m\Bigr)\Bigr)-\gamma_{i,l}\right)\phi_l^m, \tag{2.6a}$$

$$\gamma_{i,l} = \eta_l + \tau_k\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}\kappa_{j,l}, \quad \gamma_i \in \mathbb{R}^{mn}. \tag{2.6b}$$

По формулам (2.6) нетрудно получить общий вид вычислительного алгоритма, описывающего один шаг дискретного итерационного процесса установления.

Вход: $\eta = \{\eta_l\}_{l=1}^m \in \mathbb{R}^{mn}$.
Выход: $\hat\eta = \{\hat\eta_l\}_{l=1}^m \in \mathbb{R}^{mn}$.
Вспомогательные переменные: $\gamma = \{\gamma_l\}_{l=1}^m \in \mathbb{R}^{mn}$,
$\kappa_i = \{\kappa_{i,l}\}_{l=1}^m \in \mathbb{R}^{mn}, \quad i = \overline{1,s}$.

$$\left.\begin{array}{l} \gamma \leftarrow \eta + \tau_k\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}\kappa_j, \\ \kappa_{i,l} \leftarrow Q_l^m\Bigl(F\Bigl(\sum_{p=1}^m\gamma_p\mathcal{S}\varphi_p^m\Bigr)\Bigr)-\gamma_l, \quad l=\overline{1,m}, \end{array}\right] \quad i=\overline{1,s};$$

$$\hat\eta \leftarrow \eta + \tau_k\sum_{i=1}^s b_i\kappa_i.$$

3. Теоретическое обоснование

Для обоснования дискретных итерационных процессов установления нужно доказать следующие два факта.
1) Сходимость итерационного процесса: $\|v_k^m - v^m\| \to 0$ при $k\to\infty$ $\forall m \ge 1$.
2) Сходимость v^m к решению задачи (1.2): $\|v^m - v^*\| \to 0$ при $m \to \infty$.

К сожалению, так же как и для произвольных s-стадийных итерационных процессов установления, о сходимости дискретных итерационных процессов установления в общем случае нам пока известно очень мало. Поэтому рассмотрим лишь частный случай — дискретный обобщенный процесс Пикара

$$v_{k+1}^m = (1-\tau_k)v_k^m + \tau_k\mathcal{S}\Pi_m F(v_k^m). \tag{3.1}$$

Справедлив следующий результат о сходимости этого процесса.

Лемма 3.1. *Дискретный обобщенный процесс Пикара* (3.1) *сходится при всех* $\tau_k \in [\varepsilon, 1]$, $0<\varepsilon\le 1$, *если*

$$\|\mathcal{S}\Pi_m\|L < 1, \tag{3.2}$$

где $\|\cdot\|$ *— норма оператора, согласованная с нормой в пространстве* V^n, L *— константа Липшица для функции* f.

Доказательство этой леммы является простым следствием теоремы Банаха о неподвижной точке сжимающего отображения. Напомним, что $L = L_0h$, где L_0 — константа Липшица функции φ в исходном дифференциальном уравнении (1.1), а h — длина шага интегрирования. Поэтому выполнение условия (3.2) всегда можно обеспечить за счет выбора h. Кроме этого, условие (3.2) является лишь достаточным, и в реальности дискретный обобщенный процесс Пикара может сходится при гораздо больших, чем $\|\mathcal{S}\Pi_m\|^{-1}$, значениях L (см. [3], табл. 2). С другой стороны, даже при таком ограничении на условия сходимости, для дальнейшего повышения точности приближенного решения нам не придется уменьшать шаг, потому что мы можем ее регулировать количеством итераций по k, а также за счет увеличения m. В последнем случае начинать итерации при новом m можно с уже достигнутого приближения: $v_0^{m+1} = v_{k_0}^m$. При этом достаточным для сходимости условием является $\|\mathcal{S}\Pi_{m+1}\| \leq \|\mathcal{S}\Pi_m\|$.

Нетрудно заметить, что если любой дискретный итерационный процесс установления (2.4) при данном m сходится к некоторому приближенному решению $v^m \approx v^*$, то справедливо

$$\mathcal{F}^m(v^m) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad v^m = \mathcal{S}\Pi_m F(v^m), \quad v^m \in V_m^n. \tag{3.3}$$

Согласно лемме 3.1, при выполнении условия (3.2), v^m, удовлетворяющие (3.3), существуют при любом m. Теперь нужно доказать, что последовательность $\{v^m\}$ сходится к точному решению v^*. Этот факт доказан для автономных задач (1.1). Этим мы не нарушим общности, так как любую систему дифференциальных уравнений путем увеличения размерности можно свести к автономной.

Т е о р е м а 3.1. *Предположим, что исходное дифференциальное уравнение в* (1.1) *автономно и при всех* $m \geq m_0$ *выполнено условие (3.2). Пусть* $V^n = C([0,1], \mathbb{R}^n)$, $\|\cdot\| = \|\cdot\|_\infty$ *и последовательность операторов* $\mathcal{S}\Pi_m$ *сходится сильно:*

$$\|\mathcal{S}\Pi_m v - \mathcal{S}v\| \to 0 \quad \textit{при} \quad m \to \infty \quad \forall\, v \in V^n.$$

Тогда функции v^m*, удовлетворяющие (3.3), существуют при* $m \geq m_0$ *и*

$$\|v^m - v^*\| \to 0 \quad \textit{при} \quad m \to \infty,$$

где v^* *— решение уравнения (1.2).*

Доказательство этой теоремы базируется на оценках, следующих из принципа сжимающих отображений, теореме Арцела-Асколи, а также на лемме 4.3.7 из [2, с. 76].

Заключение

Описанная схема построения вычислительных алгоритмов является весьма общей. В частности, в нее вписывается дискретный процесс Пикара [3] и метод дифференциальных невязок [4]. Главной чертой этих алгоритмов является «квазианалитичность». Приближения к решению представляют собой не набор значений в заданных точках, а функцию из некоторого подпространства пространства V^n. Это позволяет достичь одной из заявленных в начале статьи целей — повышать точность приближенного решения, не уменьшая шаг. Кроме того, все эти численные методы просты в реализации. Предварительные численные эксперименты с дискретным обобщенным процессом Пикара показали, что он позволяет интегрировать жесткое уравнение Ван-дер-Поля на шагах естественной длины.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ, грант Ф06Р-040.

Литература

1. **Фалейчик Б. В.** Методы установления для приближенного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Вестник Полоцкого государственного университета. Серия С, Фундаментальные науки. 2006, №10. С. 41-44.

2. **Hackbusch, Wolfgang.** Integral equations: theory and numerical treatment. – Basel; Boston; Berlin: Birkhäuser, 1995 (International series of numerical mathematics; Vol. 120).

3. **Фалейчик Б. В.** Обобщение процесса Пикара и варианты его численной реализации // Труды XXVIII Конференции молодых ученых механико-математического факультета МГУ. — Москва, 2006. С. 201-206.

4. **Бобков В. В., Кучмиенко И. А., Фалейчик Б. В.** Дискретный аналог метода Пикара // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 2002. №3. С. 68-71

5. **Бобков В.В., Фалейчик Б.В.** Решение начальных задач на основе принципа дифференциальных невязок // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1, 2005. №3. С. 60-64.