

УДК 519.62

МЕТОД ЛОКАЛЬНОЙ ЛИНЕАРИЗАЦИИ ПРИ ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

ПАВЛОВ Б. В., РОДИОНОВА О. Е.

(Москва)

Метод локальной линеаризации в своем простейшем варианте обладает первым порядком точности и требует больших вычислительных затрат. Построена схема второго порядка точности, что привело к существенному повышению эффективности алгоритма.

Разностные методы численного интегрирования плохо приспособлены для решения жестких локально-неустойчивых систем обыкновенных дифференциальных уравнений и иногда приводят к качественно неверным результатам. Метод локальной линеаризации (м.л.л.) свободен от этого недостатка.

При решении задачи Коши для автономной системы

$$(1) \quad \dot{x}=f(x), \quad x(t_0)=x_0, \quad x=(x_1, \dots, x_n), \quad f=(f_1, \dots, f_n),$$

или эквивалентной ей системы в приращениях

$$(2) \quad \begin{aligned} \dot{u}(\tau) &= f(x_0+u) - f(x_0) + Au + \varphi(u), \quad u(0)=0, \\ \tau &= t-t_0, \quad u(\tau) = x(t-t_0), \quad A = \left. \frac{Df(x)}{Dx} \right|_{x=x_0}, \\ \varphi(u) &= f(x_0+u) - f(x_0) - Au, \end{aligned}$$

м.л.л. сводится по существу к решению интегрального уравнения

$$(3) \quad u(\tau) = C(\tau)f(x_0) + \int_0^\tau \exp[A(\tau-s)]\varphi(u(s))ds,$$

$$C(\tau) = [\exp(A\tau) - 1]A^{-1},$$

на интервале $\tau \in [0, h]$, где $u(\tau)$ мало отличается от $C(\tau)f(x_0)$, т. е. от решения линеаризованной системы

$$u_{\text{л}}(\tau) = f(x_0) + Au_{\text{л}}, \quad u_{\text{л}}(0) = 0.$$

Правая часть (3) не содержит линейного элемента Au , поэтому схемы, получаемые на основе (3), мало чувствительны к жесткости исходной системы (1) или (2), связанной с плохой обусловленностью вариационной матрицы $A = Df/Dx$. Основные трудности реализации такого подхода связаны с вычислением матрицы $C(\tau)$ и интеграла от нелинейной части $\varphi(u)$ в (3).

§ 1. Вычисление матрицы $C(\tau)$ и неявная схема

Общий способ вычисления $C(\tau)$ основан на использовании рекуррентного соотношения

$$C(2\tau) = C(\tau) + [E + C(\tau)A]C(\tau),$$

которое следует из функционального уравнения для $C(\tau)$:

$$C(t_1 + t_2) = C(t_1) + [E + C(t_1)A]C(t_2).$$

Начальное значение $C(\tau_0)$ при условии $\tau_0 \|A\| < \varepsilon$ вычисляется с помощью разложения в ряд:

$$C(\tau_0) = \tau_0 \left[E + \frac{1}{2} A \tau_0 + \dots + \frac{1}{n!} (A \tau_0)^{n-1} + \dots \right].$$

Формула обладает асимптотической устойчивостью, и практика показала высокую точность и надежность такого способа вычисления $C(\tau)$ (см. [1]).

В дальнейшем будем рассматривать случай, когда собственные значения λ_i матрицы A имеют малые мнимые части. Тогда для интеграла в (3) можно применить квадратурную формулу

$$\begin{aligned} \int_0^\tau \exp[A(\tau-s)] \varphi(z(s)) ds &\approx \\ &\approx \int_0^\tau \exp[A(\tau-s)] \varphi(z(\tau)) ds = C(\tau) \varphi(z(\tau)). \end{aligned}$$

Таким образом, приходим к неявной схеме м.л.л. [2]

$$(1.1) \quad \tilde{u}(\tau) = C(\tau) [f(x_0) + \varphi(\tilde{u}(\tau))].$$

Отметим важное асимптотическое свойство неявной схемы. Для слабо нелинейной системы (2) с устойчивой матрицей A существует устойчивая стационарная точка $u_c = u$ ($\tau \rightarrow \infty$), которая определяется уравнением $f(x_0) + Au_c + \varphi(u_c) = 0$. Тогда, если решение неявной схемы $\tilde{u}(\tau)$ ограничено на $\tau \in [0, \infty)$, то $\tilde{u}(\tau \rightarrow \infty) = u_c$, поскольку $\tilde{u}(\infty) = -A^{-1}[f(x_0) + \varphi(\tilde{u}(\infty))]$ при $\tau \rightarrow \infty$, и, следовательно, $\tilde{u}(\infty)$ удовлетворяет уравнению

$$f(x_0) + A\tilde{u}(\infty) + \varphi(\tilde{u}(\infty)) = 0.$$

Схемное решение $\tilde{u}(\tau)$, как функция τ , удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\dot{\tilde{u}} = [E - C(\tau) D\varphi(\tilde{u})/D\tilde{u}]^{-1} f(x + \tilde{u}), \quad \tilde{u}(0) = 0,$$

которое при условии

$$(1.2) \quad \|C(\tau) D\varphi(\tilde{u})/D\tilde{u}\| \ll 1, \quad \tau \in [0, h],$$

мало отличается от исходного уравнения (2); тем самым условие (1.2) ограничивает величину интервала $[0, h]$, на котором $\tilde{u} \approx u$. Практическая проверка (1.2) легко осуществляется при решении (1.1) прямыми итерациями:

$$\tilde{u}^{k+1}(\tau) = C(\tau) [f(x_0) + \varphi(u^k(\tau))].$$

Величина

$$M = \max_k \frac{\|\tilde{u}^{k+1} - \tilde{u}^k\|}{\|\tilde{u}^k - \tilde{u}^{k-1}\|} = \max_k \frac{\|C[\varphi(\tilde{u}^k) - \varphi(\tilde{u}^{k-1})]\|}{\|\tilde{u}^k - \tilde{u}^{k-1}\|}$$

оценивает $\|CD\varphi(\tilde{u})/D\tilde{u}\|$ на последовательности векторов $(\tilde{u}^k - \tilde{u}^{k-1})$. Та-

ким образом, прямые итерации в данном случае являются не только способом решения (1.1), но и методом выбора шага интегрирования h : если h таково, что $M \leq \varepsilon$, то $\|\tilde{u}(\tau) - C(\tau)f(x_0)\| \leq [\varepsilon/(1-\varepsilon)] \|C(\tau)f(x_0)\|$ и в качестве погрешности решения можно принять величину $C\varphi(\tilde{u})$. В первоначальном варианте метода [1] после вычисления решения по (1.1) с нужным шагом h производилась линеаризация и вычисление матрицы A в новой точке $x=x_1$. Такая организация требовала неоправданно большого количества дорогостоящих вычислений матрицы $C(\tau)$, что и являлось причиной невысокой эффективности алгоритма. Модификация алгоритма, предложенная в [3], позволила многократно использовать вычисленную матрицу $C(\tau)$; формула алгоритма в этом случае имеет вид

$$(1.3) \quad z_i = C(h_i) [f(x_i) + \Delta_i z_i + \varphi(z_i)],$$

где $z_i = x_{i+1} - x_i$, $x_i = x(t_i)$, $h_i = t_{i+1} - t_i$ и $(\Delta_i) = A(x_i) - A(x_0)$ — приращение вариационной матрицы к i -му шагу интегрирования. Однако схема (1.3) в отличие от схемы (1.1) имеет первый порядок точности и поэтому не приводит к существенному повышению эффективности алгоритма, поскольку в связи с ростом матрицы (Δ_i) регулярно уменьшается шаг интегрирования. Повышение эффективности алгоритма требует разработки схемы более высокого порядка точности. При этом желательно, чтобы она обладала асимптотическими свойствами схем (1.1), (1.3).

§ 2. Повышение порядка точности

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений

$$(2.1) \quad \dot{z}(\tau) = f + Az + \mu(z), \quad z(0) = 0$$

и эквивалентное ей интегральное уравнение

$$(2.2) \quad z(\tau) = C(\tau)f + \int_0^\tau \exp[A(\tau-s)] \mu(z(s)) ds,$$

где $z = (z_1, \dots, z_n)$, $f = (f_1, \dots, f_n)$ и $A = (A_{ik})$ — матрица n -го порядка, спектр которой лежит вблизи действительной оси, $\Delta = (\Delta_{ik})$ — некоторая матрица n -го порядка, $\mu(z) = \Delta z + \varphi(z)$, $\varphi(z)$ — полиномиальная функция z , не содержащая постоянных и линейных членов.

Поставим себе целью на основе неявной схемы построить схему второго порядка точности. Пусть

$$(2.3) \quad z_0(\tau) = C(\tau)[f + \mu(z_0)], \quad \tau \in [0, T].$$

Решение (2.2) будем искать на основе итерационного процесса

$$z_{n+1}(\tau) = z_0(\tau) + \int_0^\tau \exp[A(\tau-s)] \mu(z_n(s)) ds - C(\tau) \mu(z_0(\tau)).$$

Интервал $\tau \in [0, T]$, на котором $z_0(\tau)$ будем принимать за начальное приближение, определим условием

$$M = \max_k \frac{\|z_0^{k+1}(\tau) - z_0^k(\tau)\|}{\|z_0^k(\tau) - z_0^{k-1}(\tau)\|} < 0.5, \quad z_0^{k+1} = C(\tau)[f + \mu(z_0^k)],$$

при котором $\|z_0(\tau) - C(\tau)f\| \leq \|C(\tau)f\|$. За приближенное решение (2.1) при-

мем величину

$$(2.4) \quad z_1(\tau) = z_0(\tau) + y_1(\tau),$$

где

$$y_1(\tau) = \int_0^{\tau} \exp[A(\tau-s)] \mu(z_0(s)) ds - C(\tau) \mu(z_0(\tau)).$$

Погрешность приближенного решения будем характеризовать величиной

$$y_2(\tau) = \int_0^{\tau} \exp[A(\tau-s)] [\mu(z_0(s) + y_1(s)) - \mu(z_0(s))] ds.$$

Требование малости $\|y_2(\tau)\|$ и будет определять величину шага интегрирования $h = \tau_{\max} \in [0, T]$.

§ 3. Вычисление интегралов

Вычислять интегралы будем с помощью специально подобранных аппроксимирующих функций, интегрируемых аналитически. Рассмотрим интегралы вида

$$\Phi(\tau) = \int_0^{\tau} \exp[A(\tau-s)] \mu(z(s)) ds,$$

где $z(s) = (z_1(s), \dots, z_n(s))$. В дальнейшем будем аппроксимировать $C(\tau-s)$, а не $\exp[A(\tau-s)]$, поэтому перепишем интеграл в виде

$$(3.1) \quad \Phi(\tau) = \frac{d}{d\tau} \int_0^{\tau} C(\tau-s) \mu(z(s)) ds.$$

Такая запись определяет и порядок операций после аппроксимации подынтегральной функции, который необходимо соблюдать: если аппроксимируем $C(\tau-s)$ некоторой гладкой функцией $Q(\tau-s)$, то, согласно (3.1),

$$\Phi(\tau) = Q(0) \mu(z(\tau)) + \int_0^{\tau} Q'_{\tau-s}(\tau-s) \mu(z) ds,$$

что в случае $Q(0) = 0$ эквивалентно сингулярному приближению ядра

$$\exp[A(\tau-s)] = Q(0) \delta(\tau-s) + Q'_{\tau-s}(\tau-s).$$

Пусть даны две матрицы, $Q_1(s, h)$ и $Q_2(s, h)$, приближающие $C(s)$, и два вектора, $q_1(s, h)$ и $q_2(s, h)$, приближающие $z(s)$ на отрезке $[0, h]$, причем Q_2 и q_2 приближают C и z лучше, чем Q_1 и q_1 , т. е.

$$\|C(s) - Q_2(s)\| < \|C(s) - Q_1(s)\|, \quad \|z(s) - q_2(s)\| < \|z(s) - q_1(s)\|.$$

Тогда, полагая $\delta C(\tau-s) \approx Q_2(\tau-s) - Q_1(\tau-s)$, $\delta z(s) \approx q_2(s) - q_1(s)$, получаем выражения для приближенного значения $\Phi(h)$ и его погрешности:

$$(3.2a) \quad \Phi(h) = \left[\frac{d}{d\tau} \int_0^{\tau} Q_1(\tau-s) \mu(q_1(s)) ds \right]_{\tau=h},$$

$$(3.26) \quad \delta\Phi(h) = \left\{ \frac{d}{d\tau} \left[\int_0^\tau \delta C(\tau-s) \mu(q_1(s)) ds + \right. \right. \\ \left. \left. + \int_0^\tau Q_1(\tau-s) \frac{D\mu(q_1)}{Dq_1} \delta z(s) ds \right] \right\}_{\tau=h}.$$

§ 4. Подбор аппроксимирующих функций

Уравнение (2.3) определяет $z_0(\tau)$ как некоторую функцию собственных значений матрицы $C(s)$, равных $c_i(s) = \lambda_i^{-1} [\exp(\lambda_i s) - 1]$, поэтому при подборе аппроксимирующих функций будем ориентироваться на свойства функции $c(\lambda s) = \lambda^{-1} [\exp(\lambda s) - 1]$. Рассмотрим полиномы двух типов: с равными и отличными от нуля свободными членами. Для удобства будем по-разному обозначать матричные полиномы

$$P^{(h)}(s) = \sum_{i=0}^h P_i^{(h)} s^i \quad \text{и} \quad R^{(h)}(s) = \sum_{i=1}^h R_i^{(h)} s^i$$

и соответствующие векторные полиномы

$$p^{(h)}(s) = \sum_{i=0}^h p_i^{(h)} s^i \quad \text{и} \quad r^{(h)}(s) = \sum_{i=1}^h r_i^{(h)} s^i$$

первого (P и p) и второго (R и r) типов. Подбор и проверка годности полиномов проводились на примере вычисления матричного интеграла

$$\Phi^0(\tau) = \int_0^\tau \exp[A(\tau-s)] \Delta C(s) ds = \frac{d}{d\tau} \int_0^\tau C(\tau-s) \Delta C(s) ds,$$

который является первой итерацией матричного интегрального уравнения

$$B(\tau) = C(\tau) + \int_0^\tau \exp[A(\tau-s)] \Delta B(s) ds$$

и получается при подстановке в (3.1) величин $\mu(z(s)) = \Delta z(s)$, $z(s) = C(s)$, где Δ — произвольная матрица. В собственном базисе матрицы A матричные элементы таковы:

$$\hat{\Phi}_{ik}^0(\tau) = \int_0^\tau \exp[\lambda_i(\tau-s)] [\exp(\lambda_k s) - 1] \lambda_k^{-1} \hat{\Delta}_{ik} ds,$$

где $\hat{\Delta}_{ik}$ — элементы матрицы Δ в том же базисе. После интегрирования получаем формулу

$$(4.1) \quad \hat{\Phi}_{ik}^0(\tau) = (\lambda_i - \lambda_k)^{-1} [c_i(\tau) - c_k(\tau)] \hat{\Delta}_{ik}, \\ c_i(\tau) = \lambda_i^{-1} [\exp(\lambda_i \tau) - 1],$$

которая используется для прямой проверки получаемых приближенных значений $\Phi^0(h)$.

Случай устойчивого спектра. Если $\lambda < 0$, то $c(\lambda s)$ является монотонной, ограниченной на $[0, \infty)$ функцией от s . Пусть $s \in [0, h]$ и $\lambda h \ll -1$, тогда почти на всем интервале $[0, h]$ имеем $c(\lambda s) \sim -\lambda^{-1}$. Это важное асимптотическое свойство можно сохранить, если в качестве аппрок-

аппроксимирующей функции взять полином первого типа: $c(\lambda s) \approx p^{(h)}(s)$. Ограничимся рассмотрением полиномов первого и второго порядка. Коэффициенты полинома $p^{(1)}(s, h) = p_0^{(1)} + p_1^{(1)}s$ определим из условия его совпадения с аппроксимируемой функцией $c(\lambda s)$ в середине и в конце интервала $[0, h]$:

$$p^{(1)}(h, \lambda h) = c(\lambda h), \quad p^{(1)}(h/2, \lambda h) = c(\lambda h/2).$$

Тогда

$$(4.2) \quad p_0^{(1)} = 2c(\lambda h/2) - c(\lambda h), \quad hp_1^{(1)} = 2[c(\lambda h) - c(\lambda h/2)].$$

При определении коэффициентов полинома второго порядка $p^{(2)}(s, \lambda h) = p_0^{(2)} + p_1^{(2)}s + p_2^{(2)}s^2$ добавим условие равенства производных при $s=h$:

$$\frac{d}{ds} p^{(2)}(s, h) = \frac{d}{ds} c(\lambda s);$$

тогда

$$p^{(2)}(h, \lambda h) = c(\lambda h), \quad p^{(2)}(h/2, \lambda h) = c(\lambda h/2),$$

$$[p^{(2)}(s, \lambda h)]'_{s=h} = \exp(\lambda h)$$

и для коэффициентов $p_0^{(2)}, p_1^{(2)}, p_2^{(2)}$ получим

$$p_0^{(2)} = p_0^{(1)} + \frac{1}{2} p_2^{(2)} h^2, \quad hp_1^{(2)} = hp_1^{(1)} - \frac{3}{2} p_2^{(2)} h^2,$$

$$2p_2^{(2)} h^2 = [\exp(\lambda h) - p_1^{(1)}] h.$$

При $\lambda h \ll -1$ имеем $c(\lambda h) \sim -\lambda^{-1}$, тогда $p_1^{(1)}, p_1^{(2)}, p_2^{(2)} \sim 0$, а $p_0^{(1)}$ и $p_0^{(2)}$ стремятся к $-\lambda^{-1}$. Таким образом, аппроксимирующие полиномы первого типа сохраняют асимптотическое свойство функции $c(\lambda s)$. Используя рассмотренную аппроксимацию и применяя формулы (3.1), (3.2), вычисляем приближенные значения. Полагая $c(\tau-s) = c_i(\tau-s)$, $\mu(z) = \Delta_{ik} c_k(s)$ в (3.1) и $Q_1(\tau-s) = p^{(1)}(\tau-s, \lambda_i h)$, $q_1(s) = p^{(1)}(s, \lambda_k h)$ в (3.2) и используя условие (4.2) для определения коэффициентов, после соответствующих вычислений получаем

$$(4.3) \quad \hat{\Phi}_{ik}^0(h) = \left\{ c_i(h) c_k(h) - 2 \left[c_i(h) - c_i\left(\frac{h}{2}\right) \right] \times \right. \\ \left. \times \left[c_k(h) - c_k\left(\frac{h}{2}\right) \right] \right\} \hat{\Delta}_{ik}.$$

Теперь можно провести прямое сравнение точного (4.1) и приближенного (4.3) значений для $\Phi_{ik}^0(\lambda)$. Численная проверка показала, что в квадрате $\lambda_i h, \lambda_k h < 0.3$ выражение (4.3) имеет погрешность во втором знаке. В исходном базисе формула для $\Phi^0(h)$ имеет вид

$$\Phi^0(h) = C(h) \Delta C(h) - 2 \left[C(h) - C\left(\frac{h}{2}\right) \right] \Delta \left[C(h) - C\left(\frac{h}{2}\right) \right].$$

Случай неустойчивого спектра. При $\lambda > 0$ аппроксимирующая функция первого типа $p(s, h)$ удовлетворительно приближает функцию $\lambda^{-1}[\exp(As) - 1]$ лишь на малом интервале $h: \lambda h < 0.3$, что серьезно затрудняет контроль за выполнением этого условия. Значительно лучше подошли бы полиномы второго типа, однако они совершенно не годятся для приближения $c(s\lambda)$ при $\lambda h \ll -1$. Сложность задачи приближения $C(As)$ для жесткой неустойчивости матрицы A как раз и связана с тем, что отрицательные и положительные собственные значения требуют своего типа аппроксимации. Это легко сделать в случае диагональной (или

треугольной) формы матрицы A , но в общем случае приходится прибегать к специальным приемам. Опыт показал, что вполне удовлетворительные результаты дает приводимая ниже комбинация аппроксимаций первого и второго типа.

Разобьем интервал $[0, h]$ на две равные части. Тогда для $\Phi^0(h)$ получим

$$\hat{\Phi}_{ik}^0(h) = \left\{ \exp\left(\lambda_i \frac{h}{2}\right) \left[\frac{d}{d\tau} \int_{\tau=h/2}^{\tau} c_i(\tau-s) c_k(s) ds \right] + \right. \\ \left. + c_i\left(\frac{h}{2}\right) c_k\left(\frac{h}{2}\right) + \left[\frac{d}{d\tau} \int_0^{\tau} c_i(s) c_k(\tau-s) ds \right]_{\tau=h/2} \exp\left(\lambda_k \frac{h}{2}\right) \right\} \hat{\Delta}_{ik}.$$

Данная формула устроена таким образом, что $c_i(s)$ входит с фактором $\exp(\lambda_i h/2)$ в первом интеграле, то же самое имеет место во втором интеграле для $c_k(s)$, так что при $\lambda_i h, \lambda_k h \ll -1$ эти интегралы экспоненциально малы независимо от типа приближения, выбранного для $c_i(s), c_k(s)$. Это обстоятельство позволяет приблизить их полиномами второго типа (без свободного члена), которые хорошо подходят при $0 < \lambda h < 1$:

$$c_i(s) \approx r_i^{(k)}(s) = \sum_{v=1}^k r_{iv}^{(k)} s^v.$$

Далее, по-прежнему приближая $c_k(s)$ в первом и $c_i(s)$ во втором интегралах полиномами первого типа, вычисляем $\Phi^0(h)$, ограничиваясь полиномами первого порядка ($k=1$). Тогда в первом интеграле $c_i(\tau-s) = r_1^{(1)}(\tau-s)$, $c_k(s) = p_0^{(1)} + p_1^{(1)}s$ и коэффициенты $r_1^{(1)}, p_0^{(1)}, p_1^{(1)}$ определяются из уравнений

$$r_1^{(1)} \frac{h}{2} = c_i\left(\frac{h}{2}\right), \quad p_0^{(1)} + p_1^{(1)} \frac{h}{2} = c_k\left(\frac{h}{2}\right), \\ p_0^{(1)} + p_1^{(1)} \frac{h}{4} = c_k\left(\frac{h}{4}\right).$$

Для второго интеграла имеем $c_i(s) = p_0^{(1)} + p_1^{(1)}s$, $c_k(\tau-s) = r_1^{(1)}(\tau-s)$, где коэффициенты определим из условий

$$p_0^{(1)} + p_1^{(1)} \frac{h}{2} = c_i\left(\frac{h}{2}\right), \quad p_0^{(1)} + p_1^{(1)} \frac{h}{4} = c_i\left(\frac{h}{4}\right), \\ r_1^{(1)} \frac{h}{2} = c_k\left(\frac{h}{2}\right).$$

Проведя нужные вычисления, получим

$$(4.4) \quad \hat{\Phi}_{ik}^0(h) = \left\{ \left[c_i(h) - c_i\left(\frac{h}{2}\right) \right] c_k\left(\frac{h}{4}\right) + c_i\left(\frac{h}{2}\right) c_k\left(\frac{h}{2}\right) + \right. \\ \left. + c_i\left(\frac{h}{4}\right) \left[c_k(h) - c_k\left(\frac{h}{2}\right) \right] \right\} \hat{\Delta}_{ik}.$$

Проверка показала, что такой «кусочный» способ аппроксимации можно считать вполне удовлетворительным: приближенные значения для $\hat{\Phi}_{ik}^0(h)$, вычисленные по (4.4) с погрешностью менее 3%, совпадают с точными, вычисленными по (4.1) при $\lambda_i h, \lambda_k h \leq 1$, и контроль за выполнением этого условия уже легко осуществим (см. § 5). В исходном базисе

формула для $\Phi^0(h)$, очевидно, будет иметь вид

$$\begin{aligned}\Phi^0(h) = & \exp\left(A \frac{h}{2}\right) C\left(\frac{h}{2}\right) \Delta C\left(\frac{h}{4}\right) + C\left(\frac{h}{2}\right) \Delta C\left(\frac{h}{2}\right) + \\ & + C\left(\frac{h}{4}\right) \Delta C\left(\frac{h}{2}\right) \exp\left(A \frac{h}{2}\right) = \left[C(h) - C\left(\frac{h}{2}\right) \right] \Delta C\left(\frac{h}{4}\right) + \\ & + C\left(\frac{h}{2}\right) \Delta C\left(\frac{h}{2}\right) + C\left(\frac{h}{4}\right) \Delta \left[C(h) - C\left(\frac{h}{2}\right) \right].\end{aligned}$$

Приближая $C(s)$ полиномами второго порядка, можно вычислить и $\delta\Phi_{ik}^0(h)$, но получаемые формулы слишком громоздки. Не приводя их, заметим, что они дают правильный порядок погрешности.

§ 5. Решение интегрального уравнения

Используя полученные результаты, рассмотрим методику решения интегрального уравнения м.л.л.

Согласно § 2, за решение уравнения (2.2) принимается сумма двух первых членов ряда, который получится в результате итерации (2.2):

$$z(\tau) = z_0(\tau) + y_1(\tau).$$

Процесс решения состоит из следующих этапов:

1) вычисление начального приближения $z_0(\tau)$ путем решения уравнения

$$(5.1) \quad z_0(\tau) = C(\tau) [f + \mu(z_0(\tau))]$$

методом прямых итераций; требуется достаточно быстрая сходимость, что ограничивает величину интервала h , на котором приемлемо начальное приближение $z_0(\tau)$;

2) вычисление следующего члена ряда:

$$(5.2) \quad y_1(h) = \int_0^h \exp[A(h-s)] \mu(z_0(s)) ds - C(h) \mu(z_0(h)),$$

которое сводится к вычислению интеграла с помощью того или иного способа аппроксимации $z_0(s)$ на $s \in [0, h]$;

3) вычисление по формулам (3.1) погрешности $\delta z_{\text{ап}}$, связанной с аппроксимацией;

4) вычисление интеграла

$$y_2(h) = \int_0^h \exp[A(h-s)] [\mu(z_0(s) + y_1(s)) - \mu(z_0(s))] ds,$$

который характеризует величину погрешности, связанной с «обрывом» итерационного процесса решения (2.2).

Заметим, что вычисление погрешности $\delta z_{\text{ап}}$ необходимо лишь тогда, когда в спектре A имеются собственные значения с большой мнимой частью. Аппроксимации, рассмотренные в § 4, в случае действительного спектра проверены непосредственно и дают вполне удовлетворительный результат (для практических целей). Что касается $y_2(h)$, то его роль сводится к «уточнению» величины интервала интегрирования h из условия малости $\|y_2(h)\|$, которое с тем же успехом можно заменить на $\|y_1(h)\|$.

Таким образом, в случае действительного спектра A процедура решения (2.2) по существу сводится к пп. 1) и 2). Это обстоятельство упрощает алгоритм и повышает его эффективность, поскольку хотя вычисление $\delta z_{\text{ан}}$ и $y_2(h)$ не представляет принципиальной трудности, оно связано с определенными машинными затратами ввиду крайней громоздкости формул.

Остановимся подробно на вычислении $y_1(h)$ с использованием кусочного способа аппроксимации, рассчитанного на присутствие в спектре A положительных собственных значений. Согласно (2.4),

$$y_1(h) = \Phi(h) - C(h)\mu(z_0(h)),$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(h) &= \left[\frac{d}{d\tau} \int_0^\tau C(\tau-s)\mu(z_0(s))ds \right]_{\tau=h} = \\ &= \exp\left(A\frac{h}{2}\right) \left[\frac{d}{d\tau} \int_0^\tau C(\tau-s)\mu(z_0(s))ds \right]_{\tau=h/2} + \\ &+ C\left(\frac{h}{2}\right)\mu\left(z_0\left(\frac{h}{2}\right)\right) + \\ &+ \left\{ \frac{d}{d\tau} \int_0^\tau C(s) \left[\mu\left(z_0\left(\frac{h}{2} + \tau - s\right)\right) - \mu\left(z_0\left(\frac{h}{2}\right)\right) \right] ds \right\}_{\tau=h/2}. \end{aligned}$$

В соответствии с методикой кусочной аппроксимации, в первом интеграле полагаем $C(\tau-s) \approx R_1^{(1)}(\tau-s)$, где коэффициент $R_1^{(1)}$ определяется из условия $C(h/2) = R_1^{(1)}h/2$, и $z_0(s) \approx p_0^{(1)} + p_1^{(1)}s$, где коэффициенты $p_0^{(1)}$, $p_1^{(1)}$ определяются из условий $z_0(h/2) = p_0^{(1)} + p_1^{(1)}h/2$, $z_0(h/4) = p_0^{(1)} + p_1^{(1)}h/4$, откуда

$$p_0^{(1)} = 2z_0\left(\frac{h}{4}\right) - z_0\left(\frac{h}{2}\right), \quad p_1^{(1)} = \left(\frac{h}{4}\right)^{-1} \left[z_0\left(\frac{h}{2}\right) - z_0\left(\frac{h}{4}\right) \right].$$

Во втором интеграле $C(s) = P_0^{(1)} + P_1^{(1)}s$ и коэффициенты $P_0^{(1)}$, $P_1^{(1)}$ определяются из условий $C(h/2) = P_0^{(1)} + P_1^{(1)}h/2$, $C(h/4) = P_0^{(1)} + P_1^{(1)}h/4$, откуда

$$P_0^{(1)} = 2C\left(\frac{h}{4}\right) - C\left(\frac{h}{2}\right), \quad P_1^{(1)} = \left(\frac{h}{4}\right)^{-1} \left[C\left(\frac{h}{2}\right) - C\left(\frac{h}{4}\right) \right];$$

$z_0(h/2 + \tau - s) - z_0(h/2) = r_1^{(1)}(\tau - s)$ и коэффициент $r_1^{(1)}$ определяется из условия $z_0(h) - z_0(h/2) = r_1^{(1)}h/2$.

Конкретные вычисления можно провести лишь тогда, когда задана структура функции $\mu(z)$. Пусть

$$\mu(z) = [\Delta + K(z)]z,$$

где Δ — матрица с постоянными коэффициентами, а $K(z)$ — матрица, коэффициенты которой являются линейными однородными функциями z :

$$K_{ik} = \sum l_{ik}^s z_s.$$

Тогда после необходимых вычислений получим

$$\begin{aligned} \Phi(h) &= \exp\left(A\frac{h}{2}\right) C\left(\frac{h}{2}\right)\mu\left(z_0\left(\frac{h}{4}\right)\right) + C\left(\frac{h}{2}\right)\mu\left(z_0\left(\frac{h}{2}\right)\right) + \\ &+ C\left(\frac{h}{4}\right) \left[\mu(z_0(h)) - \mu\left(z_0\left(\frac{h}{2}\right)\right) \right] + \end{aligned}$$

$$+\frac{1}{96}h^3\left[\exp\left(A\frac{h}{2}\right)R_1^{(1)}\varphi(p_1^{(1)})-2P_1^{(1)}\varphi(r_1^{(1)})\right],$$

где $\varphi(z)=K(z)z$.

В этой формуле можно отбросить член с коэффициентом $h^3/96$, поскольку подобный член с коэффициентом $\sim h^3/3$ содержится в первой части формулы. В результате для $\Phi(h)$ получим удобную квадратурную формулу второго порядка точности по h , которая справедлива уже при любой структуре $\mu(z)$:

$$\begin{aligned}\Phi(h) &= \left[C(h) - C\left(\frac{h}{2}\right) \right] \mu\left(z_0\left(\frac{h}{4}\right)\right) + C\left(\frac{h}{2}\right) \mu\left(z_0\left(\frac{h}{2}\right)\right) + \\ &+ C\left(\frac{h}{4}\right) \left[\mu(z_0(h)) - \mu\left(z_0\left(\frac{h}{2}\right)\right) \right].\end{aligned}$$

Тогда для $y_1(h)$ после тождественных преобразований получим

$$\begin{aligned}(5.3) \quad y_1(h) &= -\left\{ \left[C(h) - C\left(\frac{h}{2}\right) \right] \left[\mu\left(z_0\left(\frac{h}{2}\right)\right) - \mu\left(z_0\left(\frac{h}{4}\right)\right) \right] + \right. \\ &\left. + \left[C(h) - C\left(\frac{h}{4}\right) \right] \left[\mu(z_0(h)) - \mu\left(z_0\left(\frac{h}{2}\right)\right) \right] \right\}.\end{aligned}$$

Из (5.3) следует, что если $z_0(h)$ ограничена на $[0, \infty)$ и матрица A устойчива, то $y_1(h \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, поскольку $C(h \rightarrow \infty) \rightarrow -A^{-1}$. Таким образом, функция $z_1(h) = z_0(h) + y_1(h)$ обладает асимптотическим свойством $z_0(h)$.

Оценка правой границы спектра. Формулы (5.2), (5.3) дают хорошие результаты при условии $\lambda h \leq 1$, поэтому необходим контроль за его выполнением. При вычислении $\Phi(h)$, $h = 2^m h_0$, в наличии имеется набор матриц $\exp(Ah_k)$, $h_k = 2^k h_0$, и, следовательно, значения следа

$$\text{Tr} \exp(Ah_k) = \sum_{i=1}^n \exp(\lambda_i h_k)$$

при всех $k \leq m$; используя последние, можно весьма точно оценивать правую границу спектра матрицы $\exp(Ah)$. Однако для практических целей при решении дифференциальных уравнений «средней» размерности не более 50 удовлетворительна оценка, основанная на использовании трехчлена четвертого порядка $p(x) = x^4 - 2x^2 + x$, который достаточно мал при $x \in [0, 1]$:

$$(5.4) \quad \sup_{x \in [0, 1]} |p(x)| \approx 1/8.$$

Обозначим

$$\begin{aligned}x_i &= \exp(\lambda_i h), \quad M_0 = \text{Tr} \exp(Ah) = \sum_{i=1}^n x_i, \\ M_1 &= \text{Tr} \exp(2Ah) = \sum_{i=1}^n x_i^2, \quad M_2 = \text{Tr} \exp(4Ah) = \sum_{i=1}^n x_i^4, \\ \sum_{i=1}^n p(x_i) &= M_2 - 2M_1 + M_0.\end{aligned}$$

Очевидно, что для любого x_k справедливо

$$p(x_k) = M_2 - 2M_1 + M_0 - \sum_{i \neq k}^n p(x_i),$$

$$p(x_k) \leq M_2 - 2M_1 + M_0 - \inf \left[\sum_{i \neq k}^n p(x_i) \right], \quad \inf p(x) \approx 0.075.$$

Отсюда следует, что $p(x_{\max}) \leq M_2 - 2M_1 + M_0 + 0.075(n-1)$, $x_{\max} = \exp(\lambda_{\max} h)$.
Если

$$(5.5) \quad M_2 - 2M_1 + M_0 + 0.075(n-1) \leq p(\exp(1)) \approx 40,$$

то $\lambda_{\max} h < 1$, так что (5.5) является практическим критерием для оценки $\lambda_{\max} h$. Согласно (5.4), для устойчивой матрицы A имеем

$$\sup(M_2 - 2M_1 + M_0) \approx 0.125n,$$

так что (5.5) выполняется при всех $n < 200$, и, следовательно, (5.5) не ограничивает шага, если A устойчива.

§ 6. Интегрирование системы обыкновенных дифференциальных уравнений

Полагая

$$\begin{aligned} z &= z^{n+1} = x^{n+1} - x^n, & x^0 &= x(t_0), & f &= f(x^n), \\ A &= \left. \frac{Df(x)}{Dx} \right|_{x=x_0}, & \Delta &= \left. \frac{Df(x)}{Dx} \right|_{x=x^n} - A, \\ \varphi(z) &= \varphi(z^n) = f(x^n + z^n) - f(x^n) - Az^n, & \mu(z) &= \Delta z + \varphi(z) \end{aligned}$$

и используя формулы (5.1) для $z_0(h)$ и (5.2) для $y_1(h)$, получаем схему n -го шага интегрирования с фиксированной матрицей $A = Df(x^0)/Dx$ для системы

$$\dot{x} = f(x), \quad x(t_0) = x^0, \quad x^{n+1} = x^n + z_0^{n+1}(h) + y_1^{(n+1)}(h),$$

где $x^n = x(t_n)$.

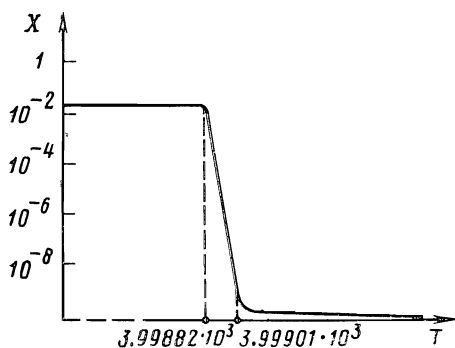
В этой схеме шаг контролируется двумя критериями:

- 1) ограничением скорости сходимости итераций уравнения (5.1), т. е. условием $M \leq 0.5$ (этот критерий определяет интервал интегрирования h , на котором приемлемо начальное приближение $z_0(h)$);
- 2) относительной погрешностью $K = \|y_1(h)\| / \|x^{n+1} - x^n\| < \epsilon$.

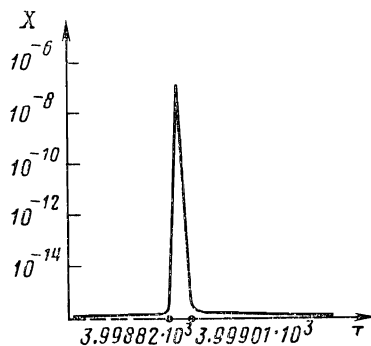
Условие 2) следит за локальной точностью интегрирования. В пределах, определяемых критерием M , шаг выбирается в соответствии с критерием K . Если же h по K оказывается больше, чем по M , то в точке $x_1 = x^{n+1}$ производится новая линеаризация и процесс повторяется. Такая организация алгоритма позволяет заметно сократить количество вычислений матрицы $C(h)$, с чем и связана его эффективность.

На основе рассмотренного подхода разработан алгоритм и создана экспериментальная программа интегрирования системы дифференциальных уравнений. Эксперименты по интегрированию конкретных систем показали, что заметный выигрыш в скорости счета (на 1–2 порядка) по сравнению с м.л.л. первого порядка (см. [3]) наблюдается для жестких систем с отчетливо выраженной локальной неустойчивостью [4], когда траектория решения проходит через область, где $A = Df(x)/D(x)$ имеет большие положительные собственные значения. Разностные алгоритмы в этом случае могут давать качественно неверные решения, если задается недостаточно высокая локальная точность интегрирования. Испытания проводились на специально сконструированном примере локально неустойчивой

16-мерной системы дифференциальных уравнений изотермической химической кинетики, которая моделирует процесс взрывного типа с отчетливо выраженным индукционным периодом. Характерные графики решений для исходного и одного из промежуточных веществ указаны, соответственно, на фиг. 1 и 2.



Фиг. 1



Фиг. 2

Таким образом, можно констатировать, что рассмотренный метод интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений предпочтительнее широко распространенных разностных методов. Основной интерес представляет полиномиальное приближение для $C(s)$, которое сохраняет асимптотические свойства этой функции при $h \rightarrow \infty$. При получении конкретных схем аналогичное приближение использовалось и для самого решения, однако в других случаях могут оказаться предпочтительнее иные способы приближения решения $z(s)$.

Авторы благодарят К. И. Бабенко и Р. П. Федоренко за обсуждение настоящей работы.

Литература

1. Павлов Б. В. О численном интегрировании «жестких» систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Тр. Всес. конф. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1973. С. 19–27.
2. Павлов Б. В., Повзнер А. Я. Об одном методе численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1973. Т. 13. № 4. С. 1056–1059.
3. Гольденберг М. Я., Крестинин А. В. Численное интегрирование дифференциальных уравнений химической кинетики: Препринт. М.: Ин-т хим. физ. АН СССР, 1974.
4. Родионова О. Е., Павлов Б. В. О численном интегрировании жестких локально-неустойчивых систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Тр. Всес. конф. Грозный: Грозненский нефтяной и-и. ин-т, 1985. С. 31.

Поступила в редакцию 28.VI.1985
Переработанный вариант 4.XI.1986