

Генерация численных методов решения дифференциальных уравнений высоких порядков

Дмитриева О.А., Куприй Я.А.

Кафедра ПМиИ, ДонНТУ

E-mail: dmitriv@r5.dgtu.donetsk.ua, kupriy.yana@mail.ru

Abstract

Dmitrieva O.A., Kupriy Y.A. Generation of numerical methods for high order differential equation solving. Creation of effective algorithms of differential equations solving is important problem in theory of dynamic modeling and application programming. At this article a method of 'rooted trees' for creating differential equation solvers of high order is considered as a way aiming at rising computational precision of differential equations.

Key words: numerical methods, ordinary differential equation, dynamic modeling, stability.

Введение

Расширение круга задач, описывающих поведение реальных динамических систем, породило новую волну конструирования и исследования численных методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Ранее известные методы были детально изучены и обобщены, построены новые классы методов, созданы методы, ориентированные на решение задач со специальными свойствами, например, так называемых жестких систем [1]. Но при том, что на поведение реальных систем влияет множество факторов, существующие математические модели, описывающие динамику таких систем, как правило, учитывают только наиболее существенные факторы, что, в первую очередь, оправдывается ограниченностью вычислительных ресурсов. Параллельные компьютерные системы позволили существенно ускорить вычисления, усложнить модели, повысить точность решения.

Одним из способов повышения точности и устойчивости численного решения является использование неявных методов или методов интегрирования высоких порядков. При этом, как правило, специфика решаемой задачи требует использования методов, позволяющих учитывать имеющиеся особенности. Данная статья посвящена вопросам генерации таких методов с использованием «помеченных деревьев» [2].

Общий вид методов решения

Рассматривается ОДУ вида (1):

$$f(t, y, y', \dots, y^{(m)}) = 0, \quad (1)$$

с начальными условиями (2):

$$\begin{aligned} y(t_0) &= y_0, \\ y'(t_0) &= y'_0, \\ &\dots \\ y^{(m-1)}(t_0) &= y_0^{(m-1)}, \end{aligned} \quad (2)$$

где f – некоторая функция, связывающая независимую переменную t , искомую функцию $y(t)$ и ее производные до m -го порядка включительно. Пусть u_t – приближенное решение задачи (1) в момент времени t .

Общий вид s -этапного метода типа Рунге-Кутты представлен соотношениями (3) [2, 3]:

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + h \cdot \varphi_s(u_n, t_n, h) \\ \varphi_s(u_n, t_n, h) &= b_1 k_1 + b_2 k_2 + \dots + b_s k_s \\ k_1 &= f(t_n, u_n), \\ k_2 &= f(t_n + c_2 h, u_n + a_{2,1} k_1 h), \\ &\dots \\ k_s &= f(t_n + c_s h, u_n + a_{s,1} k_1 h + a_{s,2} k_2 h + \dots + a_{s,s-1} k_{s-1} h), \end{aligned} \quad (3)$$

где a_{ij} , b_i , c_i – вещественные константы, которые и определяют метод [4, 5]. Метод (3) также можно представить в виде матрицы коэффициентов (4):

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{s,s-1} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & b_s \end{array} \quad (4)$$

При этом справедливо условие

$$c_i = \sum_j a_{ij}. \quad (5)$$

Условия, позволяющие вычислить значения констант, определяющих метод, формируются путем сопоставления

приближенного решения (3) с производными точных решений. Подобные вычисления являются очень трудоемкими, особенно для методов высоких порядков. Метод помеченных деревьев, изложенный в [2] позволяет значительно упростить вывод определяющих условий.

Метод помеченных деревьев

Для определения метода порядка q необходимо сформировать все абстрактные (непомеченные) деревья порядка $\leq q$. Каждое из таких деревьев tr определяет одно условие метода вида (6):

$$\Phi(tr) = \frac{1}{\gamma(tr)}, \quad (6)$$

где $\Phi(tr)$ – некоторая комбинация коэффициентов дерева tr ;

$\gamma(tr)$ – коэффициент, определяемый как произведение весовых коэффициентов вершин дерева.

Рассмотрим дерево $tr1$, изображенное на рис. 1

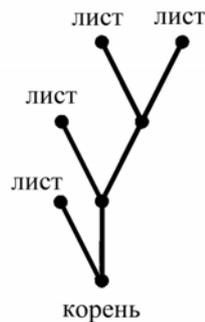


Рисунок 1. – Общий вид дерева

Поставим в соответствие корню дерева коэффициент b , листьям – коэффициенты c , а промежуточным вершинам – коэффициенты a . Полученное дерево изображено на рис. 2.

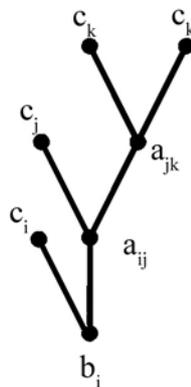


Рисунок 2. – Помеченное дерево порядка 7

Для данного дерева функция $\Phi(tr)$ примет вид (7):

$$\Phi(tr) = \sum_{i,j,k} b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k^2, \quad (7)$$

Для определения коэффициента $\gamma(tr)$ поставим в соответствие каждой вершине, являющейся «листом» дерева, весовой коэффициент, равный 1, а всем остальным вершинам – весовой коэффициент, равный сумме весов исходящих вершин плюс один. Формирование весовых коэффициентов для дерева $tr1$ приведено на рис. 3

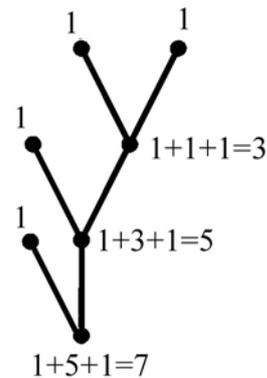


Рисунок 3. – Формирование весовых коэффициентов дерева

Таким образом, $\gamma(tr1) = 1*1*1*3*1*5*1*7=105$ и дереву $tr1$, изображенному на рис. 2, соответствует условие (8):

$$\sum_{i,j,k} b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{105}. \quad (8)$$

Аналогичным образом формируются условия для произвольного дерева tr .

Генерация помеченных деревьев

Как уже отмечалось, определение коэффициентов метода порядка q , требует формирования всех абстрактных деревьев, порядок которых укладывается в интервал от 1 до q . В [1] для генерации набора абстрактных деревьев произвольного порядка был предложен следующий подход:

- 1) формируются все возможные наборы абстрактных деревьев с общим порядком $q-1$;
- 2) деревья внутри каждого набора объединяются путем добавления общего корня.

Рассмотрим формирование деревьев порядка 3. Существует два возможных набора деревьев с суммарным порядком, равным двум. Это два дерева порядка 1 и одно дерево порядка 2. Формирование деревьев порядка 3 путем добавления корня к каждому набору деревьев приведено на рис. 4.

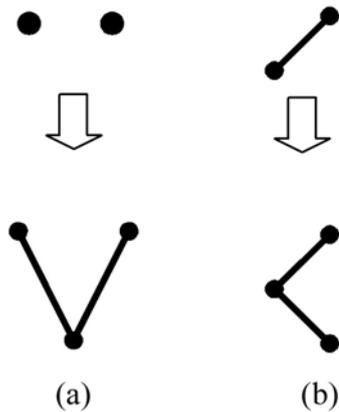


Рисунок 4. – Формирование деревьев порядка 3

Для формирования функции $\Phi(\text{tr})$ нового дерева перейдем от индексов i, j, k, l, \dots к индексам i_1, i_2, i_3, i_4 и т.д. Для нового дерева порядка q , формируемого из m деревьев, условие (6) будет определяться соотношением (9):

$$\sum b_{i_1} \prod_{j=1}^m \tilde{\Phi}(\text{tr}_j) = \frac{1}{q \prod_{j=1}^m \gamma(\text{tr}_j)}, \quad (9)$$

где $\tilde{\Phi}(\text{tr})$ – это преобразование функции $\Phi(\text{tr})$ по правилу (10)

$$\begin{aligned} b_{i_n} &\rightarrow a_{i_n, i_{n+1}} \\ a_{i_n, i_{n+1}} &\rightarrow a_{i_{n+1}, i_{n+2}} \\ c_{i_n} &\rightarrow c_{i_{n+1}} \end{aligned} \quad (10)$$

Рассмотрим формирование функций $\Phi(\text{tr})$ для деревьев третьего порядка, изображенных на рис. 4. Для дерева tr_1 (рис. 4 (a)), имеющего порядок, равный единице $\Phi(\text{tr}_1) = b_{i_1}$. Дерево третьего порядка формируется путем добавления корня к двум деревьям порядка 1. Функция $\Phi(\text{tr})$ будет иметь вид (11):

$$\Phi(\text{tr}) = \sum_i b_{i_1} a_{i_1 i_2}^2 \quad (11)$$

или с учетом (5):

$$\Phi(\text{tr}) = \sum_i b_{i_1} c_{i_1}^2 \quad (12)$$

При этом $\gamma(\text{tr}) = q \cdot \gamma(\text{tr}_1) = 3 \cdot 1 \cdot 1 = 3$.

Для дерева tr_2 второго порядка (рис. 4 (b)) $\Phi(\text{tr}_2) = b_{i_1} c_{i_1}$. Функция $\Phi(\text{tr})$ будет иметь вид

$$\Phi(\text{tr}) = \sum_i b_{i_1} a_{i_1 i_2} c_{i_2} \quad (13)$$

При этом $\gamma(\text{tr}) = q \cdot \gamma(\text{tr}_2) = 3 \cdot 2 = 6$.

Коэффициенты метода Рунге-Кутты третьего порядка определяются системой уравнений, включающих условие первого порядка (14), условие второго порядка (15) и, определяемые с помощью формул (12)-(13), условия третьего порядка (16):

$$\sum_i b_{i_1} = 1 \quad (14)$$

$$\sum_i b_{i_1} c_{i_1} = \frac{1}{2} \quad (15)$$

$$\sum_i b_{i_1} c_{i_1}^2 = \frac{1}{3}$$

$$\sum_i b_{i_1} a_{i_1 i_2} c_{i_2} = \frac{1}{6} \quad (16)$$

Аналогичным образом формируются условия для метода любого порядка.

Конструирование методов высоких порядков

Рассмотрим зависимости, связывающие порядок и число стадий метода Рунге-Кутты с точностью получаемых решений. Сравним результаты численных реализаций, полученные с помощью классических четырехэтапных методов Рунге-Кутты третьего порядка, определяемых коэффициентами (17) и (18) с решениями, полученными сгенерированными методами. Для этого на основании описанного выше подхода были сгенерированы шестизэтапные методы (19) и (20) пятого порядка и семиэтапные методы шестого порядка (21) и (22).

Четырехэтапные методы:

0				
0,5	0,5			
0,5	0	0,5		
1	0	0	1	
	1/6	2/6	2/6	1/6

0				
1/3	1/3			
2/3	-1/3	1		
1	1	-1	1	
	1/8	3/8	3/8	1/8

Шестизэтапные методы:

0					
1/4	1/4				
1/4	1/8	1/8			
1/2	0	0	1/2		
3/4	3/16	-3/8	3/8	9/16	
1	-3/7	8/7	6/7	-12/7	8/7
	7/90	0	16/45	2/15	16/45
					7/90

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & & \\
 1/3 & 1/3 & & & & & \\
 2/5 & 4/25 & 6/25 & & & & \\
 1 & 1/4 & -3 & 15/4 & & & \\
 2/3 & 2/27 & 10/9 & -50/81 & 8/81 & & \\
 4/5 & 2/25 & 12/25 & 2/15 & 8/75 & 0 & \\
 \hline
 & 23 & 0 & 125 & 0 & -27 & 125 \\
 & 192 & & 192 & & 64 & 192
 \end{array} \quad (20)$$

Семиэтапные методы:

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & & \\
 1 & 1 & & & & & \\
 3 & 3 & & & & & \\
 2 & 0 & 2 & & & & \\
 3 & 3 & 3 & & & & \\
 1 & 1 & 1 & -1 & & & \\
 3 & 12 & 3 & 12 & & & \\
 5 & 25 & 55 & 35 & 15 & & \\
 6 & 48 & 24 & 48 & 8 & & \\
 1 & 3 & 11 & 1 & 1 & 1 & \\
 6 & 20 & 24 & 8 & 2 & 10 & \\
 1 & 261 & 33 & 43 & 118 & 32 & 80 \\
 \hline
 & 260 & 13 & 156 & 39 & 195 & 39 \\
 & 13 & 0 & 11 & 11 & 4 & 4 & 13 \\
 & 200 & & 40 & 40 & 25 & 25 & 200
 \end{array} \quad (21)$$

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & & \\
 2 & 2 & & & & & \\
 5 & 5 & & & & & \\
 4 & 0 & 4 & & & & \\
 5 & 5 & 5 & & & & \\
 2 & 169 & 110 & 65 & & & \\
 9 & 1458 & 729 & 1458 & & & \\
 8 & 44 & 88 & 76 & 336 & & \\
 15 & 675 & 175 & 351 & 325 & & \\
 0 & 21 & 0 & 105 & 324 & 45 & \\
 & 106 & & 689 & 689 & 106 & \\
 1 & 2517 & 55 & 10615 & 567 & 7245 & 2597 \\
 \hline
 & 4864 & 38 & 31616 & 7904 & 4864 & 2432 \\
 & 0 & 0 & 1375 & 6561 & 3375 & 53 & 19 \\
 & & & 4992 & 20384 & 12544 & 768 & 294
 \end{array} \quad (22)$$

Конструирование блочных методов

Блочные методы позволяют реализовать решение ОДУ на параллельных компьютерах. Основная идея таких блочных методов заключается в одновременном получении приближений точного решения в равноотстоящих точках блока. Если допустить, что приближения могут соответствовать неравноудаленным точкам блока, то можно свести решение к получению аппроксимаций, вычисляемых как в методе Рунге-Кутты.

Блочный s-этапный блочный метод задается (23) с матрицей коэффициентов (24) [9-11]:

$$Y^{(i)} = A_i Y_n + h \sum_{j=1}^s A_j f(Y^{(i)}), \quad i=1, \dots, s; \quad (23)$$

$$Y_{n+1} = B_0 Y_n + h \sum_{j=1}^s B_j f(Y^{(i)}), \quad n=0, 1, \dots,$$

$$y_{n+1} := (e_k)^T Y_{n+1},$$

где k – число аппроксимаций решения;

A_i, A_{ij}, B_0 и B_j – матрицы коэффициентов, размерностью r^*k, r^*r, k^*k и k^*r ;

e_k – k-й единичный вектор;

$$Y_{n+1} := (y_{n+c_1}, y_{n+c_2}, \dots, y_{n+c_k})^T \quad - \quad k\text{-мерный}$$

блочный вектор, компонентами которого являются приближения значений точного решения $y(t_n+c_j h)$. При этом, $c_k = 1$, другие значения c_j – могут быть положены равными любому действительному значению.

Рассмотрим двухэтапный блочный метод, заданный матрицей коэффициентов (24):

$$\begin{array}{c|cc}
 1 & 0 & \\
 0 & 1 & \\
 5 & -4 & 1 \quad 2 \\
 28 & -27 & 6 \quad 9 \\
 \hline
 0 & 1 & -1/48 \quad 13/48 \quad 13/48 \quad -1/48 \\
 0 & 1 & 0 \quad 1/6 \quad 2/3 \quad 1/6 \\
 \hline
 & & c = (1/2, 1)^T
 \end{array} \quad (24)$$

Численные эксперименты

В качестве тестового рассмотрим решение уравнения, приведенного в [9]:

$$y'(t) = \sin(y^5) - \sin(\sin^5(t)) + \cos(t), \quad y(0) = 0 \quad (25)$$

с известным точным решением $y(t) = \sin(t)$.

На интервале $[0, 1]$ все методы дают достаточно хорошее решение даже при шаге $h=0,5$ (см. табл. 1). Однако с увеличением интервала при шаге $h=0,2$ хорошее решение дают только методы высоких порядков (см. табл. 2).

Таблица 1. – Абсолютная погрешность методов в точке 1 с точным решением 0,84147

Метод	h=0,01	h=0,1	h=0,2	h=0,5
2х-этапн.				
блочный (24)	0,0043	0,0197	0,1393	0,5957
4х-этапн. (17)	0,00001	0,0001	0,0007	-0,003
4х-этапн. (18)	0,00001	0,0001	0,0005	0,007
6ти-этапн. (19)	0,000002	0,00001	0,0001	0,001
6ти-этапн. (20)	0,000003	0,00001	0,0002	0,001
7ми-этапн. (21)	0,0000001	0,000001	0,00001	-0,0001
7ми-этапн. (22)	0,0000001	0,000001	0,00001	-0,0002

Таблица 2. – Абсолютная погрешность методов в точке 7 с точным решением 0,65699

Метод	h=0,1	h=0,2	h=0,5
2х-этапный блочный (24)	0,4314	1,0285	1,2988
4х-этапный (17)	-0,0220	-0,2970	-1,5119
4х-этапный (18)	-0,0086	-0,1125	-0,9263
6ти-этапный (19)	-0,0001	-0,0051	-0,7511
6ти-этапный (20)	0,0001	-0,0083	-0,2202
7ми-этапный (21)	-0,00002	-0,0009	-0,07117
7ми-этапный (22)	-0,00002	-0,0009	-0,05935

Методы высоких порядков (пятого или шестого) позволяют при шаге интегрирования $h=0,1$ получить решение с заданной точностью, увеличивая интервал до 10 (см. рис. 5).

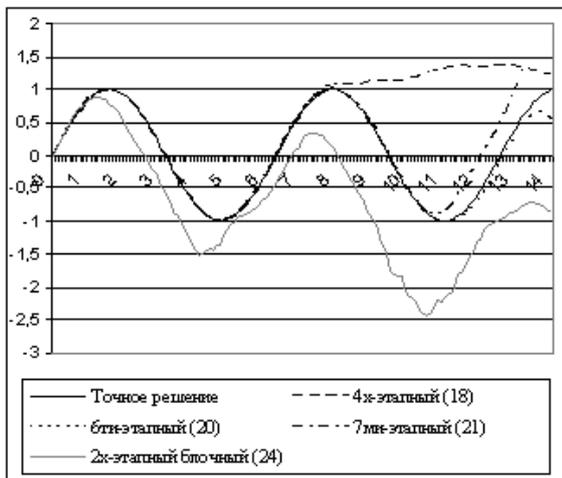


Рисунок 5. – Точное и численное решение функции при шаге $h=0,1$

Кроме того, методы порядков 5 и 6 позволяют получить хорошее решение задачи (25) на интервале $[0, 4]$ при шаге $h=0,5$ (см. рис. 6).

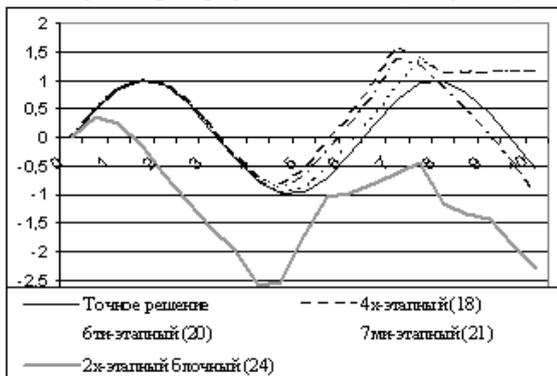


Рисунок 6. – Точное и численное решение функции при шаге $h=0,5$

Использование метода помеченных деревьев позволяет формировать методы типа

Рунге-Кутты высоких порядков. И, хотя, с ростом порядка число уравнений значительно возрастает [2], использование вычислительной техники позволяет автоматизировать вывод условий и снизить затраты времени на генерацию методов.

Литература

1. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999. – 685 с.
2. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: Мир, 1990. – 512 с.
3. Скворцов Л.М. Экономичная схема реализации неявных методов Рунге-Кутты. // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2008, т.48, № 11, С. 2008-2018.
4. Формалев В. Ф., Ревизников Д. Л. Численные методы. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. - 400 с.
5. Фельдман Л.П., Петренко А.И., Дмитриева О.А. Чисельні методи в інформатиці – К. : Вид. група BHV, 2006. – 480 с.
6. Дмитриева О.А. Исследование влияния переменного шага на эффективность численного решения жестких дифференциальных уравнений //Труды конференции «Моделирование и компьютерная графика», Донецк, 7-9 октября 2009.
7. John Butcher. Numerical Method for Ordinary Differential Equations. – John Wiley & Sons Ltd, 2008. – 482 p.
8. Вержбицкий В.М. Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения. – М.: «Высшая школа», 2001. – 385 с.
9. P.J. van der Houwen, B.P.Sommeijer. Block Runge-Kutta methods on parallel computers // CWI Centre for Mathematics and Computer Science, Report NM-R8906, March, 1989.
10. P.J. van der Houwen. Block Runge-Kutta methods// CWI Centre for Mathematics and Computer Science, Report NM-R8913, June, 1989.
11. B.P.Sommeijer. Explicit, High-order Runge-Kutta-Nystrom Methods for Parallel Computers// CWI Centre for Mathematics and Computer Science, Report NM-R8814, November, 1988.