УДК 519.6

Оптимізація обчислень у методах типу Розенброка

Богдан Гнатів

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент Національного університету «Львівська політехніка». 290013, м.Львів, вул. С.Бандери 12. email: Bohdan.V.Hnativ@lpnu.ua

В роботі наведено клас L-стійких методів третього та четвертого порядків точності ($m = 3\ та 4$)*,побудованих на основі методів типу Розенброка, в яких не потрібно обов'язково обчислювати* m *правих частини системи диференціальних рівнянь. На кожному кроці інтегрування вони вимагають лише двох звертань до правих частин системи диференціальних рівнянь і задовольняють умови як абсолютної так і жорсткої стійкості. Реалізація наведених методів така ж проста, як і методів Розенброка, однак приведені схеми мають кращі властивості точності і стійкості. Що стосується неявних методів типу Рунге-Кутти, то для них обчислювальні затрати дуже сильно залежать від способу реалізації. У запропонованих методах достатньо одного обчислення матриці Якобі на кроці інтегрування та її LU-факторизації. Наступне обчислення коефіцієнтів* k_i *лінійної комбінації вимагає застосування лише двох процедур зворотного ходу методу Гауса. При інтегруванні системи ЗДР з сталим кроком доцільне «заморожування» матриці Якобі.*

Ключові слова: діагонально неявні методи, жорстка стійкість, оптимізація обчислень.

Вступ. У багатьох задачах керування, фізичної та хімічної кінетики виникає проблема розв'язання задачі Коші для жорстких систем звичайних диференціальних рівнянь. Врахування великого числа факторів при побудові математичних моделей приводить до розширення класу задач, описуваних жорсткими системами. Складність практичних завдань приводить до зростаючих вимог щодо обчислювальних алгоритмів. Основні тенденції при побудові чисельних методів пов'язанні з розв'язанням систем великої розмірності. Для чисельного розв'язання жорстких задач зазвичай застосовуються L-стійкі методи. При реалізації таких чисельних схем на кожному кроці розв'язується лінійна система алгебраїчних рівнянь із застосуванням LU-факторизації деякої матриці, розмірність якої співпадає із розмірністю вектора розв'язку. Суть явища жорсткості полягає в тому, що розв'язок, який потрібно обчислити, змінюється повільно, однак існують швидкі згасаючі компоненти розв'язку. Наявність таких збурень перешкоджає знаходженню чисельного розв'язку, який повільно змінюється.

При розв'язанні задачі Коші для жорстких систем звичайних диференціальних рівнянь використовують методи типу Розенброка завдяки простій реалізації і достатньо хорошим властивостям точності і стійкості. Дані чисельні схеми отримані із діагонально неявних методів типу Рунге-Кутта, у яких для розв'язання нелінійної системи алгебраїчних рівнянь, яка виникає при обчислені кожного етапу, застосовується одна ітерація методу Ньютона. Всі інші проблеми вирішуються вибором кроку інтегрування. Найбільшого поширення отримали методи типу Розенброка, в яких при обчисленні кожного етапу застосовується одна і таж матриця Якобі. Відомо, що в цьому випадку для m-етапного метода Розенброка максимальний порядок точності становить $(m+1)$, причому схема максимального порядку може бути тільки A-стійкою. Якщо відмовитися від максимально порядку, то можна побудувати L-стійку чисельну форму m-го порядку точності. В практичних розрахунках, як правило, відмовляються від максимального порядку на користь L-стійкості.

1. Методи типу Розенброка

Розглядається задача Коші для автономних систем звичайних диференціальних рівнянь:

$$y' = f(y),\ y(t_0) = y_0,\ t_0 \le t \le T, \tag{1.1}$$

де y і f – N вимірні векторні функції; t – незалежна змінна, яка змінюється на заданому інтервалі. Відомо, що неавтономну систему за допомогою введення додаткової змінної можна звести до автономного вигляду. Тому розгляд задачі (1.1) не обмежує загальності.

Класичний метод Розенброка задається формулами [1,6]:

$$\begin{gathered} y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{s} p_i k_i, \\ \left(E - \alpha_i \tau f_n' \left(y_n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} k_j \right) \right) k_i = f\left(y_n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j \right), \end{gathered} \tag{1.2}$$

де τ - крок інтегрування; E – одинична матриця; $f_n' = \dfrac{\partial f(y_n)}{\partial y}$ – матриця Якобі системи (1.1); $\alpha_i, p_i, \gamma_{ij}, \beta_{ij}, 1 \le i \le s, 1 \le j \le i-1$ - числові коефіцієнти, які визначають властивості точності і стійкості схеми . В наш час методи типу Розенброка трактуються більш широко [6].

Найменш затратні і найбільш ефективні реалізації методів (1.2) виникають при $\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_m = \alpha$ і $\gamma_{ij} = 0,\ 1 \le i \le s, 1 \le j \le i-1$ Відповідні числові схеми мають вигляд

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{s} p_i k_i,\ \left(E - \alpha \tau f_n'(y_n)\right) k_i = f\left(y_n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j \right)$$

В цьому випадку на кожному кроці потрібне обертання матриці $E - \alpha \tau f_n'(y_n)$ розмірності N. Замість обертання матриці зазвичай розв'язується лінійна система алгебраїчних рівнянь із застосуванням LU-факторизації матриці $E - \alpha \tau f_n'(y_n)$.

Розглянемо як приклад одно етапний метод типу Розенброка

$$y_{n+1} = y_n + \tau p_1 k_1, \quad \left(E - \alpha \tau f_n'(y_n)\right)k_1 = f(y_n). \tag{1.3}$$

Вимога другого порядку точності призводить до співвідношень $p_1 = 1$ і $\alpha p_1 = 0{,}5$ тоді як умова L-стійкості означає $\alpha = 1$ і воно суперечить другому порядку точності. Тому, зараз найбільш відомий набір коефіцієнтів $p_1 = \alpha = 1$ L-стійкого методу (1.3) першого порядку точності.

2. *L* стійкі методи типу Розенброка вищих порядків

Розглянемо побудову методів типу Розенброка вищих порядків, запропоновану у [2,3], де методи m - того порядку можна представлені у вигляді

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n = E - \alpha \tau f_n', \\
&D_n k_1 = \tau f(y_n), \\
&D_n k_2 = \tau f(y_n + \beta_{21} k_1) + \alpha_{21} k_1, \\
&\dots \\
&D_n k_i = k_{i-1} + \alpha_{i1} k_1, \quad 3 \le i \le m.
\end{aligned} \tag{2.1}$$

Зазначимо також, що в однокрокових методах для опису обчислювальних затрат на кроці інтегрування достатньо одної константи m – кількості етапів, бо в заданих методах кожний етап супроводжується обов'язковим обчисленням правої частини задачі (1.1). У методах (2.1) є два види етапів – для деяких коефіцієнтів k_i $(i = 1{,}2)$ потрібне обчислення правої частини, а для інших непотрібне. Затрати на крок наступні: один раз розраховується матриці Якобі і здійснюється декомпозиція матриці D_n, двічі обчислюється функція f і $2m$ разів здійснюється зворотній хід в методі Гауса. У випадку $\alpha_{ij} = 0$ чисельні схеми (2.1) співпадають з методами типу Розенброка. В інших випадках це інші методи, які володіють кращими властивостями в порівнянні з (1.2).

3. *L*-стійкі методи третього та четвертого порядків точності

Означення 1: метод називається A-стійким, якщо його область абсолютної стійкості включає всю півплощину $Re(z) \le 0$.

Означення 2: чисельний метод називається L-стійким (асимптотично стійким), якщо він є A-стійким і виконується умова $R(z) \to 0$ при $Re(z) \to -\infty$ ($R(z)$ – функція стійкості).

Дослідимо стійкість схеми (2.1) за допомогою лінійного скалярного рівняння:

$$y' = \lambda y, \; y(0) = y_0, \quad \mathrm{Re}(\lambda) \le 0, \; t \ge 0. \tag{3.1}$$

Дослідимо схему (2.1) при $m = 3$. Підставимо розклад в ряд Тейлора для k_1, k_2 і k_3 в першу формулу (2.1). Припускаючи, що $y_n = y(t_n)$ і порівнюючи ряди для точного і наближеного y_{n+1} розв'язків до членів з τ^3 включно, отримаємо умови третього порядку точності схеми (2.1), тобто

$$\begin{aligned}
&1)\ p_1 + (1+\alpha_{21})p_2 + (1+\alpha_{21}+\alpha_{31})p_3 = 1;\\
&2)\ \alpha p_1 + (\alpha + \beta_{21} + 2\alpha\alpha_{21})p_2 + (2\alpha + \beta_{21} + 3\alpha\alpha_{21} + 3\alpha\alpha_{31})p_3 = 0{,}5;\\
&3)\ \alpha^2 p_1 + \left(\alpha^2 + 2\alpha\beta_{21} + 3\alpha^2\alpha_{21}\right)p_2 +\\
&\quad \left(3\alpha^2 + 3\alpha\beta_{21} + 6\alpha^2\alpha_{21} + 3\alpha^2\alpha_{31}\right)p_3 = 1/6;\\
&4)\ 3\beta_{21}^2(p_2 + p_3) = 1.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Застосовуючи (2.1) для розв'язування (3.1), отримаємо умову L-стійкості

$$\alpha(p_2 + p_3) - \alpha^2 - \beta_{21}^2 p_2 = 0. \tag{3.3}$$

Зауважимо, що (3.3) співпадає з відомим рівняннямL-стійкості трьох стадійних схем стійкості методів типу Розенброка.
З рівнянь (3.2) та(3.3) знаходимо:

a=2,405115,	α_{21}=1,	α_{31}=4,678948,	β_{21}=1,
p_1=2,083894,	p_2=-0,099651,	p_3=0,432980.	

Дослідимо схему (2.1) при $m = 4$, тобто розглянемо числову схему виду

$$\begin{aligned}
&y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} p_i k_i, \quad D_n = E - \alpha\tau f'_n,\\
&D_n k_1 = \tau f(y_n),\ D_n k_2 = k_2,\\
&D_n k_3 = \tau f(y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2) + \alpha_{32}k_2,\\
&D_n k_4 = k_3 + \alpha_{42}k_2.
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Застосовуючи (3.4) для розв'язання (3.1), отримаємо умову L-стійкості, яка має вигляд $\alpha(\alpha - p_1) + (\beta_{31} - \alpha)p_3 = 0$,

$$24\alpha^4 - 96\alpha^3 + 72\alpha^2 - 16\alpha + 1 = 0, \tag{3.5}$$

Враховуючи умови, накладені на порядок методу та умови L-стійкості (3.5). (Коефіцієнт a визначається із умови L-стійкості (3.5)) отримуємо:

a=0.572817	p_1=1,278371,	p_2=9,807423,	p_3=0,926554,
p_4=-0,333961,	α_{32}=-2,18548,	α_{42}=-295,808,	β_{31}=1,009005,
β_{32}=-0,25901.			

Висновки. В роботі наведений клас Lстійких методів третього та четвертого порядків точності $m = 3$ та 4, побудованих на основі методів типу Розенброка, в в яких не потрібно обов'язково обчислювати m правих частини системи диференціальних рівнянь. На кожному кроці інтегрування вони вимагають лише двох звертань до правих частин системи диференціальних рівнянь і задовільняють умови як абсолютної так і жорскої стійкості. Реалізація приведених методів така ж проста, як і методів Розенброка, однак приведені схеми мають кращі властивості точності і стійкості. Що стосується неявних методів типу Рунге-Кутти, то для них обчислювальні затрати дуже сильно залежать від способу реалізації.У запропонованих методах достатньо одного обчислення матриці Якобі на кроці інтегрування та її LU-факторизації. Наступне обчислення коефіцієнтів k_{i} лінійної комбінації вимагає застосування лише двох процедур зворотнього ходу методу Гауса. При інтегруванні системи ЗДР з сталим кроком доцільне «заморожування» матриці Якобі.

Література

[1] Новиков Е. А., Новиков В.А., Юматова Л.А. Замораживание матрицы Якоби в методах типа Розенброка второго порядка точности // ЖВМ и МФ. 1987.Т. 27, №3. С.385-390.
[2] Новиков Е.А. Об одном классе одношаговых безитерационных методов решения жестких систем// Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики, Новосибирск, 1987. С. 138-139.
[3] Новиков Е.А. Исследование $(m,2)$-методов решения жестких систем, Красноярск, 2007. Т.12, №5.
[4] Калиткин Н.Н. Полуявные схемы для задач большой жесткости// ЭНТП. Серия Б, Т. VII-1, ч.1, под ред. Ю.П. Попова, - М.: Янус-К, 2008, с.153-171.
[5] Кутнів М.В. Чисельні методи: Навчальний посібник.–Львів: Видавництво «Растр-7», 2010.–288 с.
[6] Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. Мир, 1999. 685 с.

Optimization of calculations in methods of the Rosenbrock type

Bohdan Hnativ

The paper presents a class of L-stable methods of the third and fourth orders of accuracy m=3 and 4, built on the basis of methods of the Rosenbrock type, in which it is not necessary to calculate the m right-hand parts of the system of differential equations. At each step of integration, they require only two calls to the right-hand sides of the system of differential equations and satisfy the conditions of both absolute and Johr stability. The implementation of the given methods is as simple as Rosenbrock's methods, but the given schemes have better properties of accuracy and stability. As for implicit methods of the Runge-Kutta type, for them, the computational costs are highly dependent on the implementation method. In the proposed methods, one calculation of the Jacobi matrix at the integration step and its LU-factorization is sufficient. The following calculation of the coefficients k_i of the linear combination requires the application of only two procedures of the Gaussian inversion. When integrating the ZDR system with a constant step, it is advisable to "freeze" the Jacobi matrix.

Отримано 31.03.23