LMD mokslo darbai, III tomas, 419–423

Standžiųjų diferencialinių lygčių adaptyvusis integravimo algoritmas

Raimondas ČIEGIS (MII,VGTU), Olga SUBOČ (VGTU)
el. paštas: rc@fm.vtu.lt

1. Uždavinio formulavimas

Daug fizikos, technikos, valdymo uždavinių yra aprašomi paprastųjų diferencialinių lygčių sistemomis. Kai nagrinėjamame procese įvairios sprendinio komponentės kinta labai skirtingais greičiais, sakome, jog gautoji lygčių sistema yra standi. Nagrinėkime tiesinį modelį

$$\begin{aligned} &\frac{dU}{dt} + AU = 0, \\ &U(0) = U_0, \end{aligned} \tag{1.1}$$

čia A yra simetrinė teigiamai apibrėžta matrica, t.y. $A = A^* > 0$, o U nežinomųjų vektorius

$$U = (u_1(t), u_2(t), \ldots, u_M(t))^T. \tag{1.2}$$

Netiesinėms diferencialinių lygčių sistemoms (1.1) lygtis yra gaunama, kai naudojame vieną iš linearizacijos metodų, pvz. Niutono metodą. Norėdami suprastinti tolimesnę analizę tarsime, kad jau atliktas kintamųjų pakeitimas ir matrica A yra įstrižainė, o λ_k yra jos tikrinės reikšmės

$$0 < \lambda_1 \leqslant \lambda_2 \leqslant \ldots \leqslant \lambda_M. \tag{1.3}$$

Uždavinys (1.1) vadinamas *standžiu*, jei matricos A *standumo skaičius* $S = \lambda_M/\lambda_1 >> 1$. Yra sudaryta daug standžiųjų diferencialinių lygčių skaitinių sprendimo metodų, (žr. pvz. [1,2]). Šiame darbe nagrinėsime adaptyvius integravimo algoritmus ir patikslinsime standžiųjų diferencialinių lygčių apibrėžimą.

2. Baigtinių skirtumų schemos

Intervale $[0, T]$ apibrėžkime diskretųjį tinklą

$$\omega_\tau = \{ t_n : t_n = n\tau, \quad n = 1, 2, \ldots, N, t_N = T \}.$$

Nagrinėkime tokias lygčių sistemos (1.1) aproksimacijas.

2.1. *Išreikštinis Eulerio metodas*

$$\frac{Y^{n+1}-Y^n}{\tau}+AY^n=0,\qquad (2.1)$$
$$Y^0=U_0,$$

čia $Y^n=Y(t_n)$ yra diferencialinės lygčių sistemos sprendinio artinys, apibrėžtas taške t_n.

2.2. *Neišreikštinis Eulerio metodas*

$$\frac{Y^{n+1}-Y^n}{\tau}+AY^{n+1}=0,\qquad (2.2)$$
$$Y^0=U_0.$$

2.3. *Simetrinis Eulerio metodas*

$$\frac{Y^{n+1}-Y^n}{\tau}+A\left(\frac{Y^{n+1}+Y^n}{2}\right)=0,\qquad (2.3)$$
$$Y^0=U_0.$$

Iš baigtinių skirtumų schemų teorijos žinome, kad pakankamos diskrečiųjų schemų konvergavimo sąlygos yra aproksimacijos ir stabilumo reikalavimai. Tačiau klasikinis aproksimacijos paklaidos apibrėžimas rodo, jog ši paklaida yra $O(U^{(p+1)}\tau^p)$ eilės dydis. Kadangi $U^{(p+1)}=O(\lambda_M^{p+1})$, tai tokie įverčiai leidžia įrodyti diskrečiojo sprendinio konvergavimą tik labai mažiems τ. Modeliuojant realius fizikinius procesus reikia mokėti parinkti maksimalų leistiną žingsnį τ, kuris yra pakankamas norint reikiamu tikslumu apskaičiuoti diferencialinės lygčių sistemos sprendinio artinį.

Aproksimacijos paklaidą įvertinsime kiekviename žingsnyje palygindami tikslaus diferencialinės lygčių sistemos sprendinio mažėjimo daugiklį ir baigtinių skirtumų schemos sprendinio mažėjimo daugiklį:

$$\Psi_k^n=\left(\rho(\tau\lambda_k)-e^{-\tau\lambda_k}\right)u_k(t_n),$$

čia mažėjimo daugikliai yra apibrėžiami lygybėmis

$$u_k(t_{n+1})=e^{-\tau\lambda_k}u_k(t_n),$$
$$y_k^{n+1}=\rho(\tau\lambda_k)y_k^n.$$

Panašus aproksimacijos paklaidos apibrėžimas buvo naudojamas ir [3] darbe. Atlikę nesudėtingus skaičiavimus gauname tokius baigtinių skirtumų schemų sprendinio mažėjimo daugiklius:

išreikštinio Eulerio metodo

$$\rho_1(\tau\lambda) = 1 - \tau\lambda,$$

neišreikštinio Eulerio metodo

$$\rho_2(\tau\lambda) = \frac{1}{1 + \tau\lambda},$$

simetrinio Eulerio metodo

$$\rho_3(\tau\lambda) = \frac{1 - 0.5\tau\lambda}{1 + 0.5\tau\lambda}.$$

3. Adaptyvusis integravimo algoritmas

Integravimo žingsnį τ_n parinksime taip, kad būtų išpildyta stabilumo sąlyga

$$|\rho_j(\tau_{n1}\lambda_k)| \leqslant 1, \qquad k = 1, 2, \ldots, M, \tag{3.1}$$

ir aproksimacijos tikslumo reikalavimas

$$|\left(\rho_j(\tau_{n2}\lambda_k) - \mathrm{e}^{-\tau_{n2}\lambda_k}\right) y_k^n| \leqslant \varepsilon. \tag{3.2}$$

Tada n-tajame algoritmo žingsnyje parametrą τ_n parenkame tokiu būdu

$$\tau_n = \min(\tau_{n1}, \tau_{n2}, \tau_0), \tag{3.3}$$

čia τ_0 yra vartotojo apibrėžtas maksimalus integravimo žingsnis.

Šiame adaptyviajame algoritme stabilumo sąlyga (3.1) garantuoja sprendinio stabilumą L_2 normoje. Nesunku patikrinti, kad neišreikštiniai Eulerio metodai (2.2) ir (2.3) yra nesąlygiškai stabilūs (t.y. $\tau_{n1} = \infty$), o išreikštinis Eulerio metodas yra stabilus tik tada, kai

$$\tau_{n1} \leqslant 2/\lambda_M. \tag{3.4}$$

Pastaba. Adaptyviajame integravimo algoritme stabilumo sąlygą galime pakeisti ir griežtesniais reikalavimais, pvz. asimptotinio stabilumo reikalavimu [4]. Išreikštinis Eulerio metodas yra asimptotiškai stabilus, jei

$$\tau_{n1} \leqslant \frac{1}{\lambda_M},$$

simetrinis Eulerio metodas yra asimptotiškai stabilus, jei išpildyta sąlyga

$$\tau_{n1} \leqslant \frac{2}{\sqrt{\lambda_1\lambda_M}}$$

neišreikštinis Eulerio metodas (2.2) yra nesąlygiškai asimptotiškai stabilus ($\tau_{n1} = \infty$).

4. Skaičiavimo eksperimentas

Nagrinėkime dviejų tipų matricas A. *Pirmoje eksperimentų* serijoje matricos A tikrinės reikšmės λ_k yra klasterizuotos dviejuose taškuose – pusė tikrinių reikšmių sutampa su λ_1, likusios tikrinės reikšmės sutampa su λ_M:

$$\begin{aligned} &\lambda_1 = \lambda_2 = \ldots = \lambda_{M/2}, \qquad \lambda_{M/2+1} = \ldots = \lambda_M, \\ &0 \leqslant t \leqslant 10, \qquad \lambda_1 = 1, \qquad \lambda_M = 10^m, \quad m = 3, 4, 5, 6. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Lentelėje 1 pateikti adaptyvaus integravimo algoritmo žingsnių skaičiai N, kuriuos atlikome spręsdami pirmąją testų seriją visais trimis Eulerio metodo varijantais, kai lokali paklaida buvo lygi $\varepsilon = 0.0001$.

Iš pateiktų rezultatų matome, kad išreikštinio Eulerio metodo žingsnių skaičius esminiai priklauso nuo matricos A sąlygotumo skaičiaus, nes šio metodo didžiausią žingsnį τ_n riboja stabilumo sąlyga (3.4). Neišreikštinių metodų atveju žingsnį τ_n riboja tik aproksimacijos tikslumo reikalavimas, todėl po to kai sprendinio spektriniame skleidinyje nebelieka harmonikos, atitinkančios didžiausią tikrinę reikšmę, žingsnis τ_n adaptyviajame algoritme prisitaiko prie lėtai kintančios komponentės aproksimacijos reikalavimų.

1 lentelė.
Adaptyvaus integravimo algoritmo žingsnių skaičius, kai sprendžiamas (4.1) uždavinys

m	Metodas (2.1)	Metodas (2.2)	Metodas (2.3)
3	5133	276	59
4	50133	277	59
5	500128	277	59
6	5000083	277	59

Jau iš šio pavyzdžio matome, kad neišreikštinių algoritmų atveju uždavinio standumas nėra svarbiausia uždavinio sudėtingumo charakteristika. Svarbesnė uždavinio savybė yra matricos A tikrinių reikšmių klasterizavimo taškų skaičius. Šį teiginį iliustruoja Lentelėje 2 pateikti *antrosios eksperimentų serijos* rezultatai. Matricos A tikrinės reikšmės buvo parinktos tokiu būdu

$$\begin{aligned} m = 1: &\ \lambda_1 = 1, \ \lambda_2 = 10^6, \\ m = 2: &\ \lambda_1 = 1, \ \lambda_2 = 10^3, \ \lambda_3 = 10^6, \\ m = 3: &\ \lambda_1 = 1, \ \lambda_2 = 10^3, \ \lambda_3 = 10^4, \ \lambda_4 = 10^6 \\ m = 4: &\ \lambda_i = 10^{i-1}, \ i = 1, 2, \ldots, 7. \end{aligned} \tag{4.2}$$

2 lentelė.
Adaptyvaus integravimo algoritmo žingsnių skaičius, kai sprendžiamas (4.2) uždavinys

m	Metodas (2.1)	Metodas (2.2)	Metodas (2.3)
1	5000083	277	59
2	5000085	413	88
3	5000088	533	116
4	5000152	723	163

Literatūra

[1] J.C. Butcher, *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*, Wiley, New York (1987).

[2] H.J. Stetter, *Analysis of Discretization Methods for Ordinary Differential Equations*, Springer-Verlag, New-York (1973).

[3] P.D. Shirkov, An accuracy of monotonic schemes for systems of stiff differential equations, *Zh. Vychisl. Matem. i Matemat. Fiziki*, **24**(10), 1577–1580 (1984) (in Russian).

[4] A.A. Samarskij, *Theory of Difference Schemes*, Nauka, Moscow (1988).

Adaptive integration algorithm for stiff ordinary differential equations

R. Čiegis, O. Subač

The accuracy of one adaptive integration algorithm is investigated. The accuracy of the discretization is estimated by comparing the discrete and exact stability factors. It is proved that the classical stiffness definition is sufficient for explicit schemes. The complexity of implicit schemes depends on the distribution of eigenvalues of the systems matrix and the information about minimal and maximal values of eigenvalues is not sufficient. Results of numerical experiments are presented.