

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 18 за 2017 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Галанин М.П., Конев С.А.

Об одном численном методе решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Галанин М.П., Конев С.А. Об одном численном методе решения обыкновенных дифференциальных уравнений // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 18. 28 с. doi:<u>10.20948/prepr-2017-18</u> URL: <u>http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-18</u> Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В. Келдыша Российской академии наук

М.П. Галанин, С.А. Конев

Об одном численном методе решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Москва — 2017

Галанин М.П., Конев С.А.

Об одном численном методе решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Рассмотрен метод решения жёстких систем обыкновенных дифференциальных уравнений на основе вычисления матричной экспоненты. Дополнительно предложен метод контроля точности в случае линейных задач. Представлены результаты численных расчётов для линейных и нелинейных задач в зависимости от значений параметров как самих задач, так и численного метода.

Ключевые слова: химическая кинетика, жесткие системы, матричная экспонента, экспоненциальные методы, осциллятор Ван дер Поля.

Mikhail Pavlovich Galanin, Stanislav Andreevich Konev On one numerical method for solving ordinary differential equations

The method for solving stiff systems of ordinary differential equations based on calculation of matrix exponent is introduced. In addition, the method of accuracy control for linear problems is developed. Computational results for linear and nonlinear problems and their dependencies on problem and method parameters are shown.

Key words: chemical kinetics, stiff systems, matrix exponent, exponential integrator, Van der Pol oscillator.

Оглавление

Введение и постановка задачи	3
§ 1. Абстрактный алгоритм решения жёстких систем	3
§ 2. Численная реализация	4
§ 3. Тестовые примеры	9
§ 4. Результаты тестовых вычислений	11
Заключение	26

Введение и постановка задачи

Пусть на временном промежутке (0, *T*] решается задача Коши для автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), представленной в виде

$$\frac{du}{dt} = f(u), \tag{0.1}$$

$$u(0) = u^0, (0.2)$$

где $u = u(t) = (u_1(t), ..., u_d(t))^T$ — точное решение задачи, $u^0 = (u_1^0, ..., u_d^0)^T$ — начальные условия, d — размерность задачи.

Считаем, что задача (0.1)–(0.2) является жёсткой [1], т.е. число S, определяемое как

$$S = \sup_{t \in (0,T]} \left\{ \max_{1 \le i \le d} |\operatorname{Re} \lambda_i(t)| / \min_{1 \le i \le d} |\operatorname{Re} \lambda_i(t)| \right\},$$

велико. Здесь $\{\lambda_i(t)\}_{i=1}^d$ — собственные значения матрицы Якоби A(t) функции f(u) правой части: $A(t) = f_u(u(t))$, а u(t) — решение задачи (0.1)–(0.2).

Целью работы является экспериментальное исследование и обсуждение свойств численного метода решения жёстких задач для систем ОДУ, представленного в [2, 3, 4]. Основой экспериментов является серия линейных и нелинейных жёстких задач — нелинейный осциллятор Ван дер Поля в их числе.

В §1 приведено описание абстрактного алгоритма решения жёстких задач для систем ОДУ. В §2 представлен алгоритм численного метода и обсуждены вопросы его реализации, §3 содержит тестовые примеры, на которых проверялся метод; для некоторых случаев представлены аналитические решения. В §4 представлены результаты вычислительных тестов. В заключении подведены итоги работы.

§ 1. Абстрактный алгоритм решения жёстких систем

Изложим алгоритм решения поставленной задачи, следуя [3, 4]. Пусть требуется определить значения решения задачи (0.1)–(0.2) в некотором фиксированном наборе точек $\{t_n\}_{n=0}^N$. Допустим, что значение $u_n = u(t_n)$ уже известно. Тогда для того, чтобы определить $u_{n+1} = u(t_n + \tau)$, где τ — временной шаг, достаточно решить вспомогательную задачу Коши:

$$\frac{dv}{dt'} = f(x_n + v(t')), \qquad (1.1)$$

$$v(0) = 0,$$
 (1.2)

где $v(t') = u(t_n + t') - u_n$, $t' \in [0, \tau]$, и тогда $u_{n+1} = u_n + v(\tau)$. Выделим в системе (1.1) линейную часть:

$$\frac{dv}{dt'} = Av + F(v), \tag{1.3}$$

$$v(0) = 0,$$
 (1.4)

где $A = f_u(u_n)$ — матрица Якоби, а $F(v) = f(u_n + v) - Av$. Тогда задача (1.3)–(1.4) может быть сведена к интегральному уравнению:

$$v(\tau) = e^{A\tau} \int_0^\tau e^{-At'} F(v(t')) dt'.$$
 (1.5)

Здесь e^{At} — матричная экспонента [5]. После определения $v(\tau)$ из (1.5) осуществляется переход к u_{n+1} и процесс повторяется.

§ 2. Численная реализация

Полученное соотношение (1.5) является точным, однако, чтобы получить алгоритм численного решения, необходимо осуществить некоторые допущения.

Поскольку дальше будет обсуждаться только приближённое решение, то через x(t) будем обозначать приближённое решение задачи (0.1)–(0.2), а через x_n — его значение в точке t_n временной сетки: $x_n = x(t_n)$. Приближённое решение интегрального уравнения (1.5) обозначим через w, а его значение в точке $\tau - w(\tau)$.

2.1. Аппроксимация интеграла

Считаем, что функция v(t') является малой на отрезке $[0, \tau]$ (если это не так, то шаг τ корректируется — алгоритм коррекции изложен ниже). Тогда функция F(v) с точностью до величины порядка $O(||v||^2)$ является постоянной и используется следующая аппроксимация, аналогичная правилу правых прямоугольников (предполагаем, что A^{-1} существует):

$$\int_0^\tau e^{-At'} F(v(t')) dt' \simeq \int_0^\tau e^{-At'} F(v(\tau)) dt' = A^{-1} (E - e^{-A\tau}) F(v(\tau)), \quad (2.1)$$

где *Е* — единичная матрица порядка *d*.

Подставляя полученную аппроксимацию в (1.5), получим алгебраическое уравнение для $w(\tau)$:

$$w(\tau) = e^{A\tau}A^{-1}(E - e^{-A\tau})F(w(\tau)),$$

или, если учесть коммутативность $e^{A\tau}$ и A^{-1} (это можно показать на основе коммутативности $e^{A\tau}$ и A [6]), получим

$$w(\tau) = A^{-1}(e^{A\tau} - E)F(w(\tau)).$$
(2.2)

Полученное уравнение в общем случае является нелинейным относительно $w(\tau)$, поэтому решаться оно будет с помощью итерационного метода Ньютона.

После этого можно определить значение приближённого решения на следующем временном слое по формуле: $x_{n+1} = x_n + w(\tau)$.

Предварительно необходимо вычислить матрицу

$$B = A^{-1}(e^{A\tau} - E), (2.3)$$

но поскольку исходная дифференциальная задача (0.1)–(0.2) является жёсткой, то число обусловленности матрицы А может быть велико, что приводит к значительной трудоёмкости вычисления матрицы A^{-1} стандартными методами.

На самом деле, нельзя исключать и случай вырожденной матрицы A, что характерно для систем уравнений химической кинетики [2, 3, 7, 8]. Поэтому опишем специальный алгоритм вычисления матрицы B, основанный на вычислении $e^{A\tau}$ с помощью рациональной аппроксимации (или так называемой (0,1)-аппроксимации Паде [9]).

2.2. Вычисление матричной экспоненты и матрицы В

Вычисление матричной экспоненты основано на использовании следующего тождества:

$$e^{A\tau} = \left(e^{A\tau/m}\right)^m,\tag{2.4}$$

где $m = 2^{p}$. Введём обозначения

$$C_0 = e^{A\tau/2^p},$$

 $C_k = C_{k-1}^2, \quad 1 \le k \le p-1,$

тогда матрица В может быть записана в следующем виде:

$$B = A^{-1}(e^{A\tau} - E) = A^{-1}(C_0^{2^p} - E) =$$

= $A^{-1}[C_0^{2^{p-1}} - E][C_0^{2^{p-1}} + E] = \dots =$
= $A^{-1}(C_0 - E)(C_0 + E)(C_1 + E) \dots (C_{p-1} + E).$ (2.5)

Теперь аппроксимируем матрицу C_0 с помощью приближённой формулы

$$C_0 \simeq D(\tau, p) = \left(E - \frac{\tau}{2^p}A\right)^{-1}.$$
 (2.6)

Данная формула работает лучше всего при $\| \tau A/2^p \| < 1$ — по этой причине используется специальный алгоритм выбора параметра *p* (представлен в подразделе 2.5).

Аппроксимацию (2.6) подставим в (2.5), тогда первые два сомножителя преобразуются следующим образом:

$$A^{-1}(C_0 - E) \simeq A^{-1} \left[\left(E - \frac{\tau}{2^p} A \right)^{-1} - E \right] =$$
(2.7)

$$= A^{-1} \left(E - \frac{\tau}{2^{p}} A \right)^{-1} \left[E - \left(E - \frac{\tau}{2^{p}} A \right) \right] = \frac{\tau}{2^{p}} A^{-1} D(\tau, p) A =$$
$$= \frac{\tau}{2^{p}} D(\tau, p) A$$

где в последнем равенстве мы воспользовались коммутативностью $D(\tau, p)$ и A^{-1} .

Тогда из (2.5) и (2.7) получаем расчётную формулу для матрицы В:

$$B \simeq 2^{-p} \tau D_0 (D_0 + E) \cdots (D_{p-1} + E), \qquad (2.8)$$

где $D_0 = D(\tau, p)$, а $D_k = D_{k-1}^2$ — определены по аналогии с приведенными выше обозначениями для C_k , $1 \le k \le p - 1$. Отметим, что полученную формулу допустимо использовать и в случае вырожденной матрицы A.

2.3. Определение $w(\tau)$ и контроль шага

После вычисления матрицы *В* можно приступить к решению алгебраического уравнения (2.2). Итерационный процесс метода Ньютона записывается так:

$$\left[E - BF_{\nu}(w^{(s)})\right] (w^{(s+1)} - w^{(s)}) = BF(w^{(s)}) - w^{(s)}, \qquad (2.9)$$

где $w^{(s)}$ — *s*-е приближение к $w(\tau)$, а F_v — матрица Якоби функции F(v); в качестве начального приближения используется $w^{(0)} = 0$. В качестве критерия останова используются ограничение по количеству итераций — s_{\max} — и условие точности

$$\delta_{s} = \max_{1 \le i \le d} \frac{|w_{i}^{(s)} - w_{i}^{(s-1)}|}{\varepsilon_{00} + |w_{i}^{(s)}|} < \varepsilon_{1},$$

где δ_s — максимальная величина относительной погрешности после совершения *s* итераций, $w_i^{(s)}$ — *i*-я компонента вектора $w^{(s)}$, ε_{00} — малый параметр, позволяющий избежать деления на нуль, а ε_1 — параметр точности метода интегрирования ОДУ; дополнительно определяется параметр сверхвысокой точности ε_0 ($\varepsilon_0 \ll \varepsilon_1$).

На основании реальной скорости сходимости метода происходит регулирование шага τ . Допустим, что метод (2.9) завершился после $m \leq s_{\max}$ итераций. Тогда $\delta_s = \delta_m$ и возможны три варианта:

- 1. если $\delta_m > \varepsilon_1$, то это свидетельствует о сильной нелинейности задачи, связанной со слишком большим выбранным шагом τ . Шаг уменьшается (например, в r > 1 раз), и задача в точке x_n пересчитывается;
- 2. если $\varepsilon_0 \le \delta_m \le \varepsilon_1$, то шаг τ считается приемлемым переходим к x_{n+1} ;

3. если $\delta_m < \varepsilon_0$, то шаг τ считается слишком малым и увеличивается (например, в те же r раз) — переходим к x_{n+1} .

2.4. Проблема неограниченного роста шага

Однако критерий контроля шага, представленный в п. 2.3, не является полным. Если не налагать дополнительных ограничений на шаг τ , то в случае линейной правой части f(u) имеет место неограниченный рост шага τ

Это вызвано тем, что в случае линейной правой части f(u) алгебраическое уравнение (2.2) является линейным, следовательно, метод Ньютона (2.9) сойдётся за одну итерацию и остановится на второй, т.к. $||w^{(2)} - w^{(1)}|| = 0$, а из этого следует выполнение критерия останова, что приведёт к увеличению τ . И так в каждый момент времени t_n .

Для решения возникшей проблемы можно использовать несколько способов. Первый и самый очевидный — это установление границ шага τ , т.е. задание величин τ_{\min} и τ_{\max} : $\tau_{\min} \leq \tau \leq \tau_{\max}$.

Дополнительно можно контролировать точность вычисления аппроксимации матричной экспоненты (2.6), управляя шагом *τ*. Для этого имеются следующие причины:

- 1. именно точность выражения (2.6) определяет точность решения линейной задачи, а не критерий п. 2.3;
- представляется, что в случае сильно нелинейной задачи регулирование τ при фиксированном p в (2.6) приведёт к более быстрому достижению мелкого шага τ, когда это необходимо;
- 3. в нелинейном случае точность (2.6) определяет качество матрицы *B*, получаемой по формуле (2.8); матрица *B* влияет на решение уравнения (2.2): если она вычисляется неточно, то даже точное решение уравнения с неверной матрицей *B* может быть далеко от решения исходного уравнения.

Для контроля точности вычисления матричной экспоненты $e^{A\tau/2^p}$ будет использоваться модификация правила Рунге [1]. Известно, что формула (2.6) имеет второй порядок точности (это можно показать с помощью непосредственного разложения по формуле Тейлора при фиксированном p):

$$Z(\tau) = \left(E - \frac{\tau}{2^p}A\right)^{-1} = e^{A\tau/2^p} + M\tau^2 + O(\tau^3).$$
(2.10)

Зафиксируем параметр q > 1 увеличения шага τ . Для простоты считаем q натуральным числом. Тогда выполняются соотношения:

$$e^{A\tau/2^{p}} = Z(\tau) + K_{1}\tau^{2} + O(\tau^{3}), \qquad (2.11)$$

$$e^{qA\tau/2^p} = Z(q\tau) + K_2(q\tau)^2 + O(\tau^3).$$
(2.12)

При достаточно малых τ можно допустить, что $K_1 \approx K_2 = K$. С целью упрощения выкладок рассмотрим случай q = 2 и подставим (2.11) в выражение для $e^{qA\tau/2^p}$:

$$e^{qA\tau/2^{p}} = (e^{A\tau/2^{p}})^{q} = (e^{A\tau/2^{p}})^{2} =$$

$$= (Z(\tau) + K\tau^{2} + O(\tau^{3}))(Z(\tau) + K\tau^{2} + O(\tau^{3})) =$$

$$= Z(\tau)^{2} + Z(\tau)K\tau^{2} + Z(\tau)O(\tau^{3}) + K\tau^{2}Z(\tau) + K^{2}\tau^{4} +$$

$$+K\tau^{2}O(\tau^{3}) + O(\tau^{3})Z(\tau) + O(\tau^{3})K\tau^{2} + O(\tau^{6}) =$$

$$= Z(\tau)^{2} + Z(\tau)K\tau^{2} + K\tau^{2}Z(\tau) + Z(\tau)O(\tau^{3}) + O(\tau^{3})Z(\tau) + O(\tau^{3})$$

Отдельно исследуем поведение $Z(\tau)$ при $\tau \to 0$. Поскольку параметр p выбран таким образом, что $|| \tau A/2^p || < 1$, то справедливо следующее представление:

$$Z(\tau) = \left(E - \frac{\tau}{2^p}A\right)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\tau}{2^p}A\right)^k,$$

следовательно:

$$\| Z(\tau) \| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\tau}{2^p} \right)^k \| A \|^k = \| E \| / (1 - \tau \| A \| / 2^p) = O(1), \text{ при } \tau \to 0.$$

Поэтому

$$\left(e^{A\tau/2^{p}}\right)^{2} = Z(\tau)^{2} + 2Z(\tau)K\tau^{2} + O(\tau^{3}).$$
(2.13)

Подставим (2.13) в левую часть (2.12) (q = 2) и получим

$$Z(\tau)^2 - Z(2\tau) = K\tau^2(2^2E - 2Z(\tau)) + O(\tau^3),$$

следовательно, с точностью до $O(\tau^3)$:

$$|| Z(\tau)^2 - Z(2\tau) || (2 || 2E - Z(\tau) ||)^{-1} \simeq || K\tau^2 ||.$$

В случае произвольного натурального *q* ≥ 2 аналогичным образом выводится оценка

$$|| Z(\tau)^q - Z(q\tau) || (q || qE - Z(\tau) ||)^{-1} \simeq || K\tau^2 ||,$$

после этого из (2.11) можно получить оценку точности вычисления матричной экспоненты:

$$\left\| e^{A\tau/2^{p}} - Z(\tau) \right\| \simeq \frac{\|Z(\tau)^{q} - Z(q\tau)\|}{q \|q E - Z(\tau)\|},$$
(2.14)

которая впоследствии и будет использоваться в программе (чтобы предотвратить неограниченный рост шага, выбирается q = r).

2.5. Алгоритм выбора параметра р

Очевидно, что при решении поставленной задачи приближение (2.6) для матрицы C_0 необходимо вычислять в каждой точке t_n временной сетки хотя бы один раз.

Допустим, что определено значение x_n приближённого решения задачи (0.1)–(0.2) в точке t_n , и значение шага τ , использовавшегося для этого, равно τ_n , т.е. $x_n = x_{n-1} + w(\tau_n)$. Опишем, как будет выбираться параметр p в приближении (2.6) и как от этого зависят последующие шаги решения задачи:

- 1. выбираем начальное значение шага $\tau_{n+1} := \tau_n$;
- 2. вычисляем *p* по формуле

$$p = \max\{[\log_2 \| \tau_{n+1}A \|], 0\} + 1, \tag{2.15}$$

где [·] — функция «антье» («целая часть»);

- 3. аппроксимируем C_0 по формуле (2.6) с вычисленным параметром p и шагом τ_{n+1} ;
- 4. аппроксимируем C_0 по формуле (2.6) с тем же *p* и шагом $q\tau_{n+1}$;
- 5. с помощью оценки (2.14) проверяем выполнения условия точности $||e^{A\tau/2^p} Z(\tau)|| < \varepsilon_2$, где ε_2 параметр точности вычисления матричной экспоненты; если условие не выполняется, переходим к пункту 6, если выполняется к пункту 7;
- 6. уменьшаем шаг $\tau_{n+1} \coloneqq \tau_{n+1} / q$ и переходим к пункту 3;
- 7. аппроксимация C₀ выполнена, переходим к следующим шагам алгоритма.

Как видно, основная идея при определении параметра *p* — это его однократное вычисление на каждом временном шаге.

Представленный метод фактически является неявным экспоненциальным методом Эйлера–Розенброка [10], поэтому если бы матрица B в (2.3) вычислялась точно, то численный метод решал бы линейные задачи точно. Но для вычисления матрицы B используется приближение (2.8), следовательно, качество численных решений линейных задач зависит от качества указанного приближения и точности решения уравнения (2.2).

Поскольку в работе [2] исследуемый метод использовался для решения уравнений химической кинетики, иногда будем называть его просто «химической схемой».

§ 3. Тестовые примеры

Для тестирования представленного численного метода использовались тестовые задачи из работ [11–14]. Перечислим те, которые будут использоваться.

Пример 1. Система линейных обыкновенных дифференциальных уравнений размерности 3

$$\begin{cases} \dot{x_1} &= \mu_0 x_1, \\ \dot{x_2} &= (\mu_0 - \mu_1) x_1 + (\mu_1 + \nu_1) x_2 - \nu_1 x_3, \\ \dot{x_3} &= (\mu_0 - \mu_1 - \nu_1) x_1 + 2\nu_1 x_2 + (\mu_1 - \nu_1) x_3. \end{cases}$$

При $x_2(0) = x_3(0)$ точное решение системы имеет вид:

$$\begin{cases} x_1(t) = x_1(0)e^{\mu_0 t}, \\ x_2(t) = x_1(t) + (x_2(0) - x_1(0))e^{\mu_1 t}\cos\nu_1 t, \\ x_3(t) = x_1(t) + \sqrt{2}(x_2(0) - x_1(0))e^{\mu_1 t}\sin(\nu_1 t + \pi/4). \end{cases}$$

Устойчивость задачи и её жесткость регулируются выбором параметров μ_0 , μ_1 , ν_1 . Поэтому решаться будут варианты с разными наборами параметров и начальных условий.

Пример 2. Система линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с матрицей правой части из двух жордановых клеток. Представим систему:

$$\begin{pmatrix}
\dot{x}_1 &= \mu_1 x_1, \\
\dot{x}_2 &= x_1 + \mu_1 x_2, \\
\dot{x}_3 &= \mu_2 x_3, \\
\dot{x}_4 &= x_3 + \mu_2 x_4, \\
\dot{x}_5 &= 2x_4 + \mu_2 x_5, \\
\dot{x}_6 &= 3x_5 + \mu_2 x_6.
\end{cases}$$

и её решение:

$$\begin{cases} x_1(t) = x_1(0)e^{\mu_1 t}, \\ x_2(t) = (x_2(0) + x_1(0)t)e^{\mu_1 t}, \\ x_3(t) = x_3(0)e^{\mu_2 t}, \\ x_4(t) = (x_4(0) + x_3(0)t)e^{\mu_2 t}, \\ x_5(t) = (x_5(0) + 2x_4(0)t + x_3(0)t^2)e^{\mu_2 t}, \\ x_6(t) = (x_6(0) + 3x_5(0)t + 3x_4(0)t^2 + x_3(0)t^3)e^{\mu_2 t}. \end{cases}$$

Задача будет тестироваться при начальных условиях $x_1(0) = x_2(0) = 1, x_3(0) = x_4(0) = x_5(0) = x_6(0) = 1000$ и параметрах $\mu_1 = -1, \mu_2 = -10000$ — тогда она является жёсткой.

Пример 3. Задача с нелинейной правой частью и известным решением. Решение представлено для случая $u_1(0) = u_2(0) = 1$.

$$\begin{cases} \dot{x_1} = \alpha x_1^2 x_2, & \{x_1(t) = e^{\alpha t}, \\ \dot{x_2} = -\alpha x_1 x_2^2. & \{x_2(t) = e^{-\alpha t}, \\ x_2(t) = e^{-\alpha t} \end{cases}$$

Пример 4. Система дифференциальных уравнений Ван дер Поля.

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} &= x_2, \\ \frac{dx_2}{dt} &= \mu^2((1-x_1^2)x_2 - x_1). \end{cases}$$

Поскольку для системы уравнений Ван дер Поля аналитическое решение в замкнутом виде неизвестно, получаемое численное решение будет сравниваться

с «эталонным», полученным с помощью системы MATLAB с высокой точностью.

§ 4. Результаты тестовых вычислений

В данном параграфе представлены результаты вычислений для тестовых примеров, описанных выше.

Пример 1. Рассмотрим несколько случаев — характеристики, соответствующие каждому в отдельности, представлены в таблице 1. Задача решается на отрезке [0,1].

Таблица 1

N⁰	Тип задачи	$u_1(0)$	$u_2(0)$	μ_0	μ_1	ν_1
1	плохо обусловленная	0.1	1.0	10.0	4.0	20π
2	хорошо обусловленная	1.0	1.5	-2.0	1.0	1.0
3	быстро осциллирующая	0.5	0.8	-2.0	1.0	200.0
4	жёсткая	10.0	11.0	-100.0	-1.0	1.0
5	жёстко осциллирующая	100.0	101.0	-1000.0	1.0	500.0

Параметры системы и начальные условия

Поскольку рассматриваемая задача является линейной, для неё контроль точности с помощью параметров $\varepsilon_0, \varepsilon_1$ не имеет смысла. Поэтому в качестве параметра контроля точности будет использоваться параметр ε_2 , такой, что (см. п. 2.5)

$$\left\| e^{A\tau/2^{p}} - Z(\tau) \right\| \simeq \frac{\|Z(\tau)^{q} - Z(q\tau)\|}{q \|qE - Z(\tau)\|} < \varepsilon_{2}.$$
(4.1)

Для каждого из случаев далее приведены сводные таблицы характеристик и погрешностей. При расчётах используется кубическая норма $\|\cdot\|_{\infty}$ [1] и $s_{\text{max}} == 3$. В таблицах отображена зависимость следующих величин от выбора ε_2 :

1. абсолютной погрешности Δ_{abs} , определяемой формулой

$$\Delta_{\text{abs}} = \max_{1 \le k \le N} \|u(t_k) - x(t_k)\|,$$
(4.2)

где u(t) — точное решение задачи, x(t) — численное решение задачи, N — количество точек временной сетки $\{t_k\}_{k=1}^N$ на отрезке [0,1];

2. относительной погрешности Δ_{rel} , определяемой формулой

$$\Delta_{\text{rel}} = \max_{1 \le k \le N} \frac{\|u(t_k) - x(t_k)\|}{\|u(t_k)\|},\tag{4.2}$$

3. максимального τ_{max} и минимального τ_{min} шагов, выбранных вычислительным алгоритмом;

- оценки ошибки δ_{estim} вычисления матричной экспоненты, определяемой по формуле (2.14) при q = 2; поскольку задача линейная, ошибка постоянна на каждом шаге;
- 5. реальной ошибки δ_{error} вычисления матричной экспоненты, определяемой формулой

$$\delta_{\text{error}} = \|e^{A\tau/2^p} - Z(\tau)\|, \qquad (4.3)$$

где матричная экспонента $e^{A\tau/2^p}$ вычисляется средствами системы MATLAB с помощью аппроксимаций Паде высокой степени [9], так что в контексте данной задачи её можно считать точной.

Таблица 2

Результаты численных расчётов для случая 1

	ϵ_2						
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10^{-5}	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷		
Δ_{abs}	$5.11 \cdot 10^{1}$	$1.44 \cdot 10^{1}$	$7.33 \cdot 10^{0}$	$1.86 \cdot 10^{0}$	$4.68 \cdot 10^{-1}$		
$\Delta_{\rm rel}$	$3.36 \cdot 10^{-1}$	$9.02 \cdot 10^{-2}$	$4.58 \cdot 10^{-2}$	$1.15 \cdot 10^{-2}$	$2.89 \cdot 10^{-3}$		
$ au_{ m min}$	$6.25 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$		
$ au_{max}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$3.91 \cdot 10^{-5}$	$9.76 \cdot 10^{-6}$		
δ_{estim}	$3.83 \cdot 10^{-4}$	$2.65 \cdot 10^{-5}$	$6.73 \cdot 10^{-6}$	$4.26 \cdot 10^{-7}$	$2.67 \cdot 10^{-8}$		
δ_{error}	$4.28 \cdot 10^{-4}$	$2.72 \cdot 10^{-5}$	$6.82 \cdot 10^{-6}$	$4.27 \cdot 10^{-7}$	$2.67 \cdot 10^{-8}$		

Таблица 3

Результаты численных расчётов для случая 2

	ε2					
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷	
Δ_{abs}	$9.19 \cdot 10^{-3}$	$4.41 \cdot 10^{-3}$	$1.10 \cdot 10^{-3}$	$2.74 \cdot 10^{-4}$	$1.36 \cdot 10^{-4}$	
$\Delta_{\rm rel}$	$4.54 \cdot 10^{-3}$	$2.19 \cdot 10^{-3}$	$5.48 \cdot 10^{-4}$	$1.36 \cdot 10^{-4}$	$6.68 \cdot 10^{-5}$	
$ au_{ m min}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$2.50 \cdot 10^{-3}$	$6.25 \cdot 10^{-4}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$	
$ au_{max}$	$2.00 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$2.50 \cdot 10^{-3}$	$6.25 \cdot 10^{-4}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$	
δ_{estim}	$9.72 \cdot 10^{-5}$	$9.72 \cdot 10^{-5}$	$6.20 \cdot 10^{-6}$	$3.90 \cdot 10^{-7}$	$9.76 \cdot 10^{-8}$	
δ_{error}	$1.00 \cdot 10^{-4}$	$1.00 \cdot 10^{-4}$	$6.25 \cdot 10^{-6}$	$3.91 \cdot 10^{-7}$	$9.77 \cdot 10^{-8}$	

Таблица 4

Результаты численных расчётов для случая 3

		ε ₂					
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}		
$\Delta_{ m abs}$	$1.09 \cdot 10^{0}$	$6.19 \cdot 10^{-1}$	$2.02 \cdot 10^{-1}$	$1.06 \cdot 10^{-1}$	$2.75 \cdot 10^{-2}$		
$\Delta_{\rm rel}$	$1.54 \cdot 10^{0}$	$6.57 \cdot 10^{-1}$	$2.13 \cdot 10^{-1}$	$1.12 \cdot 10^{-1}$	$2.91 \cdot 10^{-2}$		
$ au_{\min}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	$2.44 \cdot 10^{-6}$		
$ au_{max}$	$2.50 \cdot 10^{-3}$	$6.25 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$7.82 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$		

δ_{estim}	$2.41 \cdot 10^{-4}$	$6.04 \cdot 10^{-5}$	$3.79 \cdot 10^{-6}$	$9.56 \cdot 10^{-7}$	$6.01 \cdot 10^{-8}$
δ_{error}	$2.48 \cdot 10^{-4}$	$6.12 \cdot 10^{-5}$	$3.84 \cdot 10^{-6}$	$9.62 \cdot 10^{-7}$	$6.02 \cdot 10^{-8}$

Результаты численных расчётов для случая 4

	ε ₂					
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10^{-5}	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷	
$\Delta_{\rm abs}$	$5.67 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$7.17 \cdot 10^{-3}$	$1.80 \cdot 10^{-3}$	$4.49 \cdot 10^{-4}$	
$\Delta_{\rm rel}$	$1.80 \cdot 10^{-2}$	$4.52 \cdot 10^{-3}$	$2.26 \cdot 10^{-3}$	$5.64 \cdot 10^{-4}$	$1.41 \cdot 10^{-4}$	
$ au_{\min}$	$6.25 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$	
$ au_{max}$	$6.25 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$	
δ_{estim}	$4.19 \cdot 10^{-4}$	$2.94 \cdot 10^{-5}$	$7.49 \cdot 10^{-6}$	$4.75 \cdot 10^{-7}$	$2.98 \cdot 10^{-8}$	
δ _{error}	$4.64 \cdot 10^{-4}$	$3.01 \cdot 10^{-5}$	$7.59 \cdot 10^{-6}$	$4.76 \cdot 10^{-7}$	$2.98 \cdot 10^{-8}$	

Таблица б

Результаты численных расчётов для случая 5

	ε2						
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10^{-5}	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷		
$\Delta_{ m abs}$	$3.79 \cdot 10^{0}$	$2.69 \cdot 10^{0}$	$1.00 \cdot 10^{0}$	$2.79 \cdot 10^{-1}$	$1.42 \cdot 10^{-1}$		
$\Delta_{\rm rel}$	$9.91 \cdot 10^{-1}$	$7.05 \cdot 10^{-1}$	$2.64 \cdot 10^{-1}$	$7.40 \cdot 10^{-2}$	$3.77 \cdot 10^{-2}$		
$ au_{ m min}$	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$	$1.22 \cdot 10^{-6}$	$6.10 \cdot 10^{-7}$		
$ au_{max}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$		
δ_{estim}	$2.60 \cdot 10^{-4}$	$6.81 \cdot 10^{-5}$	$4.41 \cdot 10^{-6}$	$2.79 \cdot 10^{-7}$	$6.98 \cdot 10^{-8}$		
δ_{error}	$2.81 \cdot 10^{-4}$	$7.09 \cdot 10^{-5}$	$4.46 \cdot 10^{-6}$	$2.79 \cdot 10^{-7}$	$6.99 \cdot 10^{-8}$		

По результатам расчётов, представленных в таблицах 2–6, видно, что, несмотря на некоторое занижение оценки (2.14), условие $\delta_{error} < \varepsilon_2$ всё равно выполняется (занижение возникает из-за того, что матрица Якоби *А* вычисляется не точно, а с помощью центральных разностей с шагом $h = 10^{-5}$).

Однако, вычисляя матрицу $e^{A\tau/2^{\hat{p}}}$ с достаточно высокой точностью, получаем численное решение, точность которого низка. Это говорит о необходимости дополнительного исследования аппроксимационных качеств формулы (2.8).

Пример 2. По аналогии с предыдущим примером представлена таблица зависимостей выбранных параметров от установленного ε_2 . В силу большой жёсткости задачи расчёты велись на отрезке [0, 10^{-3}].

		ε ₂						
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷			
Δ_{abs}	$3.08 \cdot 10^{0}$	$1.99 \cdot 10^{0}$	$5.61 \cdot 10^{-1}$	$1.40 \cdot 10^{-1}$	$7.02 \cdot 10^{-2}$			
$\Delta_{\rm rel}$	$1.60 \cdot 10^{-1}$	$4.27 \cdot 10^{-2}$	$1.06 \cdot 10^{-2}$	$2.64 \cdot 10^{-3}$	$1.32 \cdot 10^{-3}$			
$ au_{\min}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	$2.44 \cdot 10^{-6}$	$6.10 \cdot 10^{-7}$	$1.53 \cdot 10^{-7}$	$7.63 \cdot 10^{-8}$			
τ_{max}	$6.25 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$3.91 \cdot 10^{-5}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$			
δ_{estim}	$7.02 \cdot 10^{-5}$	$7.02 \cdot 10^{-5}$	$4.60 \cdot 10^{-6}$	$2.90 \cdot 10^{-7}$	$7.27 \cdot 10^{-8}$			
δ _{error}	$7.31 \cdot 10^{-5}$	$7.31 \cdot 10^{-5}$	$4.64 \cdot 10^{-6}$	$2.91 \cdot 10^{-7}$	$7.28 \cdot 10^{-8}$			

Результаты численных расчётов для примера 2

Как и в предыдущем примере, видно, что при высокой точности вычисления матричной экспоненты абсолютная точность итогового численного решения невысока. При этом относительная точность вполне удовлетворительна для задачи с такой большой жёсткостью.

Как и в предыдущем примере, критерий проверки точности (4.1) не оправдывает себя в составе рассматриваемого метода на линейных задачах.

Пример 3. Пример является первой нелинейной задачей, и при этом с известным аналитическим решением. Теперь на качество получаемого численного решения может влиять и выбор параметров ε_0 , ε_1 , s_{max} .

Параметры точности заданы следующим образом: $\varepsilon_0 = 10^{-12}$, $\varepsilon_1 = 10^{-9}$. Результаты расчётов при $s_{\text{max}} = 2$ и $s_{\text{max}} = 3$ представлены в отдельных таблицах (значения для δ_{estim} и δ_{error} не выведены, т.к. задача нелинейная).

Поскольку первая компонента решения растёт очень быстро, для каждого α расчёт проводился только на отрезке $[0, \alpha^{-1}]$.

Таблица 8

	ε ₂							
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵	10^{-6}	10 ⁻⁷			
$\Delta_{ m abs}$	$1.36 \cdot 10^{-2}$	$1.36 \cdot 10^{-2}$	$6.45 \cdot 10^{-3}$	$1.71 \cdot 10^{-3}$	$4.25 \cdot 10^{-4}$			
$\Delta_{\rm rel}$	$5.02 \cdot 10^{-3}$	$5.02 \cdot 10^{-3}$	$2.37 \cdot 10^{-3}$	$6.27 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$			
$ au_{ m min}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$5.00 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$			
τ_{max}	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$2.50 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$3.12 \cdot 10^{-4}$			

Случай $\alpha = 1$, $s_{\text{max}} = 3$

Таблица 9

Случай $\alpha = 1$, $s_{\text{max}} = 2$

	ϵ_2						
	10 ⁻³	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10 ⁻⁷		
$\Delta_{ m abs}$	$1.36 \cdot 10^{-2}$	$1.36 \cdot 10^{-2}$	$2.65 \cdot 10^{-5}$	$2.65 \cdot 10^{-5}$	$2.65 \cdot 10^{-5}$		
$\Delta_{ m rel}$	$5.02 \cdot 10^{-3}$	$5.02 \cdot 10^{-3}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$		

$ au_{\min}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$
$ au_{max}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$

Случай $\alpha = 10$, $s_{\text{max}} = 3$

	ε ₂					
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10^{-5}	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷	
$\Delta_{ m abs}$	$3.43 \cdot 10^{-2}$	$1.71 \cdot 10^{-2}$	$4.29 \cdot 10^{-3}$	$2.13 \cdot 10^{-3}$	$5.31 \cdot 10^{-4}$	
$\Delta_{ m rel}$	$1.26 \cdot 10^{-2}$	$6.28 \cdot 10^{-3}$	$1.57 \cdot 10^{-3}$	$7.84 \cdot 10^{-4}$	$1.95 \cdot 10^{-4}$	
$ au_{ m min}$	$2.50 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$3.13 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$3.91 \cdot 10^{-5}$	
$ au_{max}$	$2.50 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$3.13 \cdot 10^{-4}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$3.91 \cdot 10^{-5}$	

Таблица 11

C_{My} and $-10, S_{max} - 2$

	ε ₂					
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10^{-5}	10^{-6}	10 ⁻⁷	
$\Delta_{ m abs}$	$3.32 \cdot 10^{-5}$					
$\Delta_{ m rel}$	$1.22 \cdot 10^{-5}$					
$ au_{ m min}$	$2.44 \cdot 10^{-6}$					
$ au_{max}$	$2.44 \cdot 10^{-6}$					

Таблица 12

Случай α	$= 100, s_{max}$	=	3
•/	, may		

	ε ₂					
	10 ⁻³	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	
$\Delta_{ m abs}$	$2.14 \cdot 10^{-2}$	$1.37 \cdot 10^{-2}$	$5.37 \cdot 10^{-3}$	$1.33 \cdot 10^{-3}$	$6.64 \cdot 10^{-4}$	
$\Delta_{\rm rel}$	$7.87 \cdot 10^{-3}$	$5.02 \cdot 10^{-3}$	$1.97 \cdot 10^{-3}$	$4.89 \cdot 10^{-4}$	$2.44 \cdot 10^{-4}$	
$ au_{ m min}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$3.13 \cdot 10^{-4}$	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$	
$ au_{max}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$3.91 \cdot 10^{-5}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	

Таблица 13

Случай $\alpha = 100$, $s_{\text{max}} = 2$

	ε2					
	10 ⁻³	10^4	10 ⁻⁵	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷	
$\Delta_{ m abs}$	$4.15 \cdot 10^{-5}$					
$\Delta_{\rm rel}$	$1.53 \cdot 10^{-3}$					
$ au_{\min}$	$3.05 \cdot 10^{-7}$					
τ_{max}	$3.05 \cdot 10^{-7}$					

	ε2				
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10^{-5}	10^{-6}	10 ⁻⁷
Δ_{abs}	$2.78 \cdot 10^{-2}$	$1.35 \cdot 10^{-2}$	$6.67 \cdot 10^{-3}$	$1.65 \cdot 10^{-3}$	$4.15 \cdot 10^{-4}$
$\Delta_{\rm rel}$	$1.00 \cdot 10^{-2}$	$4.95 \cdot 10^{-3}$	$2.45 \cdot 10^{-3}$	$6.07 \cdot 10^{-4}$	$1.53 \cdot 10^{-4}$
$ au_{\min}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$	$1.22 \cdot 10^{-6}$	$3.05 \cdot 10^{-7}$
τ_{max}	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$9.77 \cdot 10^{-6}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$4.88 \cdot 10^{-6}$

Случай $\alpha = 1000, s_{max} = 3$

	ϵ_2					
	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷	
$\Delta_{\rm abs}$	$2.59 \cdot 10^{-5}$					
$\Delta_{\rm rel}$	$9.54 \cdot 10^{-6}$					
$ au_{\min}$	$1.91 \cdot 10^{-8}$					
τ_{max}	$1.91 \cdot 10^{-8}$					

Случай *α* = 1000, *s*_{max} = 2

Интересно отметить, что в случае $s_{\text{max}} = 2$ матричная экспонента $e^{A\tau/2^p}$ автоматически вычисляется с достаточно высокой степенью точности – это прямо следует из совпадения столбцов, соответствующих $\varepsilon_2 = 10^{-7} \dots 10^{-3}$. И при этом переход от $s_{\text{max}} = 3$ к $s_{\text{max}} = 2$ увеличивает точность примерно на порядок.

Пример 4. Исследуем качество численного решения системы уравнений Ван дер Поля.

Произведены расчёты для серии значений μ^2 (см. таблицу 16), для всех расчётов задавались параметры $\varepsilon_0 = 10^{-9}$, $\varepsilon_1 = 10^{-6}$, $s_{\text{max}} = 3$. Специально для того, чтобы нивелировать воздействие критерия (4.1), установлено значение $\varepsilon_2 = 10^2$ (в данном случае это эквивалентно отключению критерия). Расчёт вёлся на временном отрезке [0, 20] для начальных условий $x_1(0) = 2$, $x_2(0) = 0$ с установленными ограничениями на шаг: $\tau_{\text{min}} = 10^{-12}$, $\tau_{\text{max}} = 10^{-3}$.

Поскольку замкнутый аналитический вид точного решения неизвестен, в качестве «эталонного» использовалось решение, полученное с помощью функции ode15s системы MATLAB R2015b с выставленными параметрами абсолютной точности (AbsTol) и относительной точности (RelTol), равными 10^{-15} каждый. Так что в рамках данной работы такое решение можно считать точным.

Отметим, что численное решение x(t), полученное с помощью рассматриваемого метода (назовём временную сетку, на которой данное решение известно, Ω_1), и численное решение y(t), полученное с помощью системы MATLAB (соответствующая ему сетка — Ω_2), определены на разных временных сетках. Для вычисления отклонения x(t) - y(t) произведена

кусочно-линейная переинтерполяция решения y(t) на сетку Ω_1 (по результатам проведённых расчётов получалось, что в сетке Ω_2 примерно в 5-10 раз больше узлов, чем в сетке Ω_1).

В таблице 16 представлена зависимость следующих параметров от величины μ^2 :

- 1. Значения достигнутых максимального τ^*_{max} и минимального τ^*_{min} временных шагов;
- 2. Ошибка периодичности δ_{period} , определяемая по формуле

$$\delta_{\text{period}} = ||x - y]|_2 / ||y]|_2, \tag{4.4}$$

где $|| \cdot]|_2$ — сеточный аналог L_2 -нормы [1] на сетке Ω_1 , определяемый выражением

$$||v]|_{2} = \left(\sum_{k=1}^{N} (t_{k} - t_{k-1}) < v(t_{k}), v(t_{k}) >^{2}\right)^{1/2}.$$
(4.5)

Здесь $\langle v, v \rangle$ — евклидово скалярное произведение вектора v на самого себя, а суммирование относится к узлам соответствующей сетки, укладывающимся в период решения $[0, T_p]$;

3. Относительная ошибка δ_{rel} вычисляется аналогично δ_{period} , однако при этом суммирование распространяется на все узлы соответствующих временных сеток на отрезке [0, 20].

Результаты представлены в таблице 16, а на рис. 1–5 — совмещённые фазовые портреты решений, полученных с помощью MATLAB (пунктирная линия, обозначена именем "MATLAB") и с помощью рассматриваемого метода (непрерывная линия, обозначена аббревиатурой "CS" от англ. "Chemical Scheme") для разных значений параметра μ^2 .

Таблица 16

μ^2	$ au^*_{ m min}$	$ au^*_{ m max}$	$\delta_{ m period}$	$\delta_{ m rel}$
100	$5.00 \cdot 10^{-4}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$3.71 \cdot 10^{-1}$	$1.24 \cdot 10^{0}$
1000	$3.13 \cdot 10^{-5}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$6.86 \cdot 10^{-1}$	$1.34 \cdot 10^{0}$
5000	$7.81 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$8.09 \cdot 10^{-1}$	$1.30 \cdot 10^{0}$
10000	$3.91 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$1.06 \cdot 10^{0}$	$1.31 \cdot 10^{0}$
20000	$1.95 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$1.14 \cdot 10^{0}$	$1.38 \cdot 10^{0}$







Рис. 2. Фазовый портрет для $\mu^2 = 1000$.

18



Рис. 3. Фазовый портрет для $\mu^2 = 5000$.



Рис. 4. Фазовый портрет для $\mu^2 = 10000$.

19



Рис. 5. Фазовый портрет для $\mu^2 = 20000$.

По представленным рисункам видно, что качественное поведение решения передаётся с хорошей точностью, однако ошибки решения, как это видно из таблицы 16, всё равно являются неудовлетворительными по своей величине.

Чтобы объяснить это, обратим внимание на следующий факт: $x(t) = (x_1(t), x_2(t))^T$ и $y(t) = (y_1(t), y_2(t))^T$ — это векторные функции; величина δ_* вычисляется по формуле (в зависимости от выбора подмножества временной сетки вместо * используется обозначение либо "period", либо "rel")

$$\delta_* = \sqrt{\frac{||x_1 - y_1]|_2^2 + ||x_2 - y_2]|_2^2}{||y_1]|_2^2 + ||y_2]|_2^2}}.$$

Дополнительно потребуются следующие величины (знак * заменяется по аналогичному правилу):

$$\delta_*^1 = \frac{||x_1 - y_1]|_2}{||y_1]|_2}, \quad \delta_*^2 = \frac{||x_2 - y_2]|_2}{||y_2]|_2}$$

В таблицах 17–20 представлена зависимость значений указанных величин от значения μ^2 . В таблицах 17–18 описан случай сетки одного периода, а в таблицах 19–20 — временной сетки на всём отрезке [0, 20].

T	аблииа	17
-		

μ^2	$ x_1 - y_1] _2^2$	$ y_1] _2^2$	$\delta^{1}_{ m period}$	$\delta_{ m period}$
100	$8.21 \cdot 10^{-5}$	$5.37 \cdot 10^{0}$	$3.91 \cdot 10^{-2}$	$3.71 \cdot 10^{-1}$
1000	$3.41 \cdot 10^{-3}$	$5.75 \cdot 10^{0}$	$2.44 \cdot 10^{-2}$	$6.86 \cdot 10^{-1}$
5000	$1.12 \cdot 10^{-3}$	$5.81 \cdot 10^{0}$	$1.38 \cdot 10^{-2}$	$8.09 \cdot 10^{-1}$
10000	$3.08 \cdot 10^{-3}$	$5.82 \cdot 10^{0}$	$2.30 \cdot 10^{-2}$	$1.06 \cdot 10^{0}$
20000	$4.07 \cdot 10^{-3}$	$5.83 \cdot 10^{0}$	$2.84 \cdot 10^{-2}$	$1.14 \cdot 10^{0}$

μ^2	$ x_2 - y_2] _2^2$	$ y_2] _2^2$	$\delta^2_{ m period}$	$\delta_{ m period}$
100	$6.99 \cdot 10^{1}$	$5.03 \cdot 10^{2}$	$3.73 \cdot 10^{-1}$	$3.71 \cdot 10^{-1}$
1000	$2.18 \cdot 10^{3}$	$4.63 \cdot 10^{3}$	$6.86 \cdot 10^{-1}$	$6.86 \cdot 10^{-1}$
5000	$1.49\cdot 10^4$	$2.27 \cdot 10^4$	$8.09 \cdot 10^{-1}$	$8.09 \cdot 10^{-1}$
10000	$5.10 \cdot 10^4$	$4.53 \cdot 10^{4}$	$1.06 \cdot 10^{0}$	$1.06 \cdot 10^{0}$
20000	$1.17 \cdot 10^{5}$	$9.04 \cdot 10^4$	$1.14 \cdot 10^{0}$	$1.14 \cdot 10^{0}$

Таблица 19

μ^2	$ x_1 - y_1] _2^2$	$ y_1] _2^2$	$\delta_{ m rel}^1$	$\delta_{ m rel}$
100	$6.16 \cdot 10^{0}$	$5.26 \cdot 10^{1}$	$3.42 \cdot 10^{-1}$	$1.24 \cdot 10^{0}$
1000	$2.02 \cdot 10^{0}$	$5.52 \cdot 10^{1}$	$1.91 \cdot 10^{-1}$	$1.34 \cdot 10^{0}$
5000	$5.77 \cdot 10^{-1}$	$5.58 \cdot 10^{1}$	$1.02 \cdot 10^{-1}$	$1.30 \cdot 10^{0}$
10000	$1.30 \cdot 10^{0}$	$5.59 \cdot 10^{1}$	$1.53 \cdot 10^{-1}$	$1.31 \cdot 10^{0}$
20000	$1.05 \cdot 10^{0}$	$5.59 \cdot 10^{1}$	$1.37 \cdot 10^{-1}$	$1.38 \cdot 10^{0}$

Таблица 20

μ^2	$ x_2 - y_2] _2^2$	$ y_2] _2^2$	$\delta^2_{ m rel}$	$\delta_{ m rel}$
100	$8.17 \cdot 10^{3}$	$5.28 \cdot 10^{3}$	$1.24 \cdot 10^{0}$	$1.24 \cdot 10^{0}$
1000	$9.52 \cdot 10^{4}$	$5.32 \cdot 10^{4}$	$1.34 \cdot 10^{0}$	$1.34 \cdot 10^{0}$
5000	$4.61 \cdot 10^{5}$	$2.73 \cdot 10^{5}$	$1.30 \cdot 10^{0}$	$1.30 \cdot 10^{0}$
10000	9.27 · 10 ⁵	$5.44 \cdot 10^{5}$	$1.31 \cdot 10^{0}$	$1.31 \cdot 10^{0}$
20000	$2.07 \cdot 10^{6}$	$1.08 \cdot 10^{6}$	$1.38 \cdot 10^{0}$	$1.38 \cdot 10^{0}$

Видно, что δ_{period} и δ_{rel} неудовлетворительно велики, когда выполняется

 $\delta_*^2 > 1$,

Причём $\delta_*^2 \approx \delta_*$, т.е. величина общей погрешности в большей степени определяется погрешностью приближения компоненты $y_2(t)$. У этого факта имеется геометрическое объяснение: рассмотрим графики решений $x_2(t)$ и $y_2(t)$ при $\mu^2 = 1000$. На рис. 7 и 8 изображены профили численного и эталонного решений в окрестностях точек t = 0.83 и t = 1.67. Решение, полученное с помощью «химической схемы», отстаёт от эталонного, но пересечение профилей имеет ненулевую площадь, поэтому значения δ_{period} ещё не слишком велики.



Рис. 7. Функции $x_2(t)$ и $y_2(t)$ в окрестности точки t = 0.83.



Рис. 8. Функции $x_2(t)$ и $y_2(t)$ в окрестности точки t = 1.67.

На рис. 9 и 10 изображены те же решения, но в окрестностях точек t = 8.38 и t = 11.74: заметно, что профили подобны, но они настолько удалены друг от друга, что наложения профилей нет.

Численное решение с увеличением времени t отстаёт от эталонного — это приводит к тому, что величина $||x_2 - y_2||_2^2$ становится сравнима с $||y_2||_2^2$. Но при этом сохраняется подобие профилей, что и объясняет хорошее совпадение фазовых портретов на рис. 1–5.



Рис. 9. Функции $x_2(t)$ и $y_2(t)$ в окрестности точки t = 8.38.



Рис. 10. Функции $x_2(t)$ и $y_2(t)$ в окрестности точки t = 11.74.

Дополнительные расчёты. Для иллюстрации сходимости в зависимости от выбора параметров $\varepsilon_0, \varepsilon_1, s_{max}$ дополнительно проведена серия расчётов для задачи с $\mu^2 = 1000$ на отрезке [0, 5]. Следующие параметры зафиксированы: $\varepsilon_2 = 100, \tau_{min} = 10^{-12}, \tau_{max} = 10^{-3}$, в таблице 21 представлена сводная таблица характеристик для каждого из случаев, в таблице 22 — реально достигнутые значения шагов и вычисленные значения δ_{period} и δ_{rel} , таблицы 23 и 24 построены аналогично таблицам 17–20.

Таблица 21

N⁰	ε_0	ε_1	<i>s</i> _{max}
1	$1.00 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	3
2	$1.00 \cdot 10^{-9}$	$1.00 \cdot 10^{-6}$	3
3	$1.00 \cdot 10^{-12}$	$1.00 \cdot 10^{-9}$	3
4	$1.00 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	2
5	$1.00 \cdot 10^{-9}$	$1.00 \cdot 10^{-6}$	2
6	$1.00 \cdot 10^{-12}$	$1.00 \cdot 10^{-9}$	2

N⁰	$ au^*_{ m min}$	$ au^*_{ m max}$	$\delta_{ m period}$	$\delta_{ m rel}$
1	$1.00 \cdot 10^{-4}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$9.89 \cdot 10^{-1}$	$1.27 \cdot 10^{0}$
2	$3.13 \cdot 10^{-5}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$6.86 \cdot 10^{-1}$	$1.05 \cdot 10^{0}$
3	$1.56 \cdot 10^{-5}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$4.65 \cdot 10^{-1}$	$8.81 \cdot 10^{-1}$
4	$2.44 \cdot 10^{-7}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$3.84 \cdot 10^{-1}$	$7.62 \cdot 10^{-1}$
5	$6.10 \cdot 10^{-7}$	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$2.73 \cdot 10^{-1}$	$6.65 \cdot 10^{-1}$
6	$3.81 \cdot 10^{-8}$	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$2.58 \cdot 10^{-2}$	$7.03 \cdot 10^{-2}$

Таблица 23

N⁰	$ x_1 - y_1] _2^2$	$ y_1] _2^2$	$ x_2 - y_2] _2^2$	$ y_2] _2^2$	$\delta^{ extsf{1}}_{ extsf{period}}$	$\delta^2_{ m period}$
1	$2.55 \cdot 10^{-2}$	$5.76 \cdot 10^{0}$	$4.53 \cdot 10^{3}$	$4.63 \cdot 10^{3}$	$6.67 \cdot 10^{-2}$	$9.89 \cdot 10^{-1}$
2	$3.40 \cdot 10^{-3}$	$5.76 \cdot 10^{0}$	$2.18 \cdot 10^{3}$	$4.63 \cdot 10^{3}$	$2.43 \cdot 10^{-2}$	$6.86 \cdot 10^{-1}$
3	$1.20 \cdot 10^{-3}$	$5.76 \cdot 10^{0}$	$1.00 \cdot 10^{3}$	$4.63 \cdot 10^{3}$	$1.47 \cdot 10^{-2}$	$4.66 \cdot 10^{-1}$
4	$8.09 \cdot 10^{-4}$	$5.76 \cdot 10^{0}$	$6.83 \cdot 10^2$	$4.63 \cdot 10^{3}$	$1.19 \cdot 10^{-2}$	$3.84 \cdot 10^{-1}$
5	$3.99 \cdot 10^{-4}$	$5.76 \cdot 10^{0}$	$3.46 \cdot 10^2$	$4.63 \cdot 10^{3}$	$8.32 \cdot 10^{-3}$	$2.73 \cdot 10^{-1}$
6	$3.39 \cdot 10^{-6}$	$5.76 \cdot 10^{0}$	$3.09 \cdot 10^{0}$	$4.63 \cdot 10^{3}$	$7.69 \cdot 10^{-4}$	$2.58 \cdot 10^{-2}$

Таблица 24

№	$ x_1 - y_1] _2^2$	$ y_1] _2^2$	$ x_2 - y_2] _2^2$	$ y_2] _2^2$	$\delta_{ m rel}^1$	$\delta_{ m rel}^2$
1	$5.49 \cdot 10^{-1}$	$1.38 \cdot 10^{1}$	$1.86 \cdot 10^{4}$	$1.16 \cdot 10^{4}$	$1.99 \cdot 10^{-1}$	$1.27 \cdot 10^{0}$
2	$4.98 \cdot 10^{-2}$	$1.38 \cdot 10^{1}$	$1.27 \cdot 10^{4}$	$1.16\cdot 10^4$	$6.01 \cdot 10^{-2}$	$1.05 \cdot 10^{0}$
3	$1.83 \cdot 10^{-2}$	$1.38 \cdot 10^{1}$	8.99 · 10 ³	$1.16 \cdot 10^{4}$	$3.64 \cdot 10^{-2}$	$8.81 \cdot 10^{-1}$
4	$1.08 \cdot 10^{-2}$	$1.38 \cdot 10^{1}$	$6.72 \cdot 10^{3}$	$1.16 \cdot 10^{4}$	$2.80 \cdot 10^{-2}$	$7.62 \cdot 10^{-1}$
5	$7.60 \cdot 10^{-3}$	$1.38 \cdot 10^{1}$	$5.12 \cdot 10^{3}$	$1.16 \cdot 10^{4}$	$2.35 \cdot 10^{-2}$	$6.65 \cdot 10^{-1}$
6	$6.31 \cdot 10^{-5}$	$1.38 \cdot 10^{1}$	$5.72 \cdot 10^{1}$	$1.16 \cdot 10^{4}$	$2.14 \cdot 10^{-3}$	$7.03 \cdot 10^{-2}$

Контроль шага. Отметим, что контроль шага осуществляется достаточно эффективно: уменьшается в окрестностях «спадов» и «подъёмов» компонент x_1 и x_2 численного решения — это можно наблюдать с помощью рис. 11 и 12, на которых изображена компонента x_1 (для наглядности) и диаграмма изменения шага τ на отрезке [0, 5] для случая №4.



Рис. 11. Значения компоненты $x_1(t)$ на отрезке $t \in [0, 5]$.



Рис. 12. Диаграмма зависимости $-\lg(\tau_n)$ от t_n .

Экстремальный случай. Рассмотрим систему уравнений Ван дер Поля для случая $\mu^2 = 20000$. Далее приведены таблицы, аналогичные представленным в случае $\mu^2 = 1000$: расчёты велись при фиксированных параметрах $\varepsilon_2 = 100$, $\tau_{\min} = 10^{-12}$, $\tau_{\max} = 10^{-3}$.

Таблица 25

N⁰	ε_0	ε_1	s _{max}
1	$1.00 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	3
2	$1.00 \cdot 10^{-9}$	$1.00 \cdot 10^{-6}$	3
3	$1.00 \cdot 10^{-12}$	$1.00 \cdot 10^{-9}$	3
4	$1.00 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	2
5	$1.00 \cdot 10^{-9}$	$1.00 \cdot 10^{-6}$	2

N⁰	$ au^*_{ m min}$	$ au^*_{ m max}$	$\delta_{ m period}$	$\delta_{ m rel}$
1	$7.71 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$1.39 \cdot 10^{0}$	$1.42 \cdot 10^{0}$
2	$1.95 \cdot 10^{-6}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$1.14 \cdot 10^{0}$	$1.37 \cdot 10^{0}$
3	$4.88 \cdot 10^{-7}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$1.01 \cdot 10^{0}$	$1.02 \cdot 10^{0}$
4	$7.63 \cdot 10^{-9}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$3.42 \cdot 10^{-1}$	$5.28 \cdot 10^{-1}$
5	$1.20 \cdot 10^{-10}$	$7.82 \cdot 10^{-6}$	$1.63 \cdot 10^{-1}$	$5.31 \cdot 10^{-1}$

Таблица 27

№	$ x_1 - y_1] _2^2$	$ y_1] _2^2$	$ x_2 - y_2] _2^2$	$ y_2] _2^2$	$\delta_{ ext{period}}^{1}$	$\delta^2_{ m period}$
1	$3.68 \cdot 10^{-3}$	$5.82 \cdot 10^{0}$	$1.74 \cdot 10^{5}$	$9.04 \cdot 10^{4}$	$2.15 \cdot 10^{-2}$	$1.39 \cdot 10^{0}$
2	$4.70 \cdot 10^{-3}$	$5.82 \cdot 10^{0}$	$1.17 \cdot 10^{5}$	$9.04 \cdot 10^{4}$	$2.84 \cdot 10^{-2}$	$1.37 \cdot 10^{0}$
3	$1.48 \cdot 10^{-3}$	$5.82 \cdot 10^{0}$	$9.29 \cdot 10^{4}$	$9.04 \cdot 10^4$	$1.60 \cdot 10^{-2}$	$1.01 \cdot 10^{0}$
4	$3.10 \cdot 10^{-5}$	$5.82 \cdot 10^{0}$	$1.06 \cdot 10^{4}$	$9.04 \cdot 10^{4}$	$2.31 \cdot 10^{-3}$	$3.43 \cdot 10^{-1}$
5	$6.81 \cdot 10^{-6}$	$5.82 \cdot 10^{0}$	$2.41 \cdot 10^{3}$	$9.04 \cdot 10^4$	$1.08 \cdot 10^{-3}$	$1.63 \cdot 10^{-1}$

Таблица 28

№	$ x_1 - y_1] _2^2$	$ y_1] _2^2$	$ x_2 - y_2] _2^2$	$ y_2] _2^2$	$\delta_{ m rel}^1$	$\delta_{ m rel}^2$
1	$7.26 \cdot 10^{-1}$	$1.40 \cdot 10^{0}$	$5.48 \cdot 10^{5}$	$2.71 \cdot 10^{5}$	$2.27 \cdot 10^{-1}$	$1.42 \cdot 10^{0}$
2	$3.83 \cdot 10^{-2}$	$1.40 \cdot 10^{0}$	$5.06 \cdot 10^{5}$	$2.71 \cdot 10^{5}$	$5.22 \cdot 10^{-2}$	$1.37 \cdot 10^{0}$
3	$2.90 \cdot 10^{-2}$	$1.40 \cdot 10^{0}$	$2.81 \cdot 10^{5}$	$2.71 \cdot 10^{5}$	$4.54 \cdot 10^{-2}$	$1.02 \cdot 10^{0}$
4	$2.38 \cdot 10^{-4}$	$1.40 \cdot 10^{0}$	$7.55 \cdot 10^{4}$	$2.71 \cdot 10^{5}$	$4.11 \cdot 10^{-3}$	$5.28 \cdot 10^{-1}$
5	$2.55 \cdot 10^{-4}$	$1.40 \cdot 10^{0}$	$7.67 \cdot 10^4$	$2.71 \cdot 10^{5}$	$4.26 \cdot 10^{-3}$	$5.31 \cdot 10^{-1}$

По последним двум строкам таблицы видно, что погрешности на всём отрезке стали нарастать: это связано с необычайно мелким шагом τ и, следовательно, ощутимым влиянием погрешностей округления (а также с необходимостью более точного вычисления матрицы линеаризованной задачи).

Заключение

После численного решения описанным методом серии линейных и нелинейных жёстких задач можно выделить следующие достоинства метода.

- 1. Выбор критерия контроля шага на основе скорости сходимости метода Ньютона позволяет эффективно увеличивать и уменьшать шаг по мере необходимости.
- Как это следует из рис. 1–5, алгоритм достаточно хорошо передаёт качественную картину поведения решения задачи даже в случае сильной жёсткости (см. варианты с µ² = 10000, 20000).

Однако наравне с этими достоинствами нельзя не заметить следующие недостатки метода:

- 1. Контроль шага на основе сходимости метода Ньютона приводит к неограниченному росту шага в случае линейных задач, для исправления этого эффекта требуется использовать дополнительные инструменты типа критерия (4.1), который оказался избыточным в нелинейных задачах.
- 2. Низкая точность метода в случае линейных задач объясняется невысоким качеством аппроксимации (2.8), а в случае нелинейных аппроксимацией всего лишь с порядком $O(||u||^2)$ в формуле (2.1).

Всё это говорит о том, что требуется провести дополнительное исследование метода, в особенности — аппроксимационных качеств формул (2.1) и (2.8), — и избавиться от избыточности критерия (4.1) в нелинейных задачах.

В работах [12, 13] рассмотрен набор подобных тестовых задач при исследовании метода конечных суперэлементов применительно к жёстким системам ОДУ, и её результаты в некотором роде обратны полученным в данной: линейные задачи решаются с высокой точностью, а при решении нелинейных задач с большим числом жёсткости возникают трудности: получаемые решения имеют невысокую точность, и их качественное поведение мало похоже на поведение точных решений. Заметим, что метод конечных суперэлементов в [10, 12] по существу является также методом расчёта матричной экспоненты. Но выполняется расчёт иным способом.

Поэтому возникает задача о разработке метода, который бы учитывал достоинства обоих методов (высокая точность при решении линейных задач, передача качественного поведения в случае сильной нелинейности) и при этом был бы эффективным с точки зрения требовательности к вычислительным ресурсам.

Литература

- 1. *Галанин М.П., Савенков Е.Б.* Методы численного анализа математических моделей. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2010. 591 с.
- 2. Роль саморазогрева при горении водорода вблизи предела воспламенения. / Азатян В.В. [и др.] // Кинетика и катализ. 1973. Т. 14, № 3. С. 577.
- 3. Федоренко Р.П. Динамическое программирование, инвариантное квазилинеаризация и вычислительные погружение, алгоритмы // Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики. М.: Наука. Главная физикоредакция

математической литературы. 1979. С. 119–155.

- 4. *Федоренко Р.П.* Введение в вычислительную физику. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект». 2008. 504 с.
- 5. *Филиппов А.Ф.* Введение в теорию дифференциальных уравнений. М.: КомКнига. 2007. 240 с.
- 6. *Кострикин А.И.* Введение в алгебру. Часть II. Линейная алгебра. М.: Физико-математическая литература. 2000. 368 с.
- 7. Калиткин Н.Н. Численные методы. СПб.: БХВ-Петербург. 2011. 592 с.
- 8. *Калиткин Н.Н.* Полуявные схемы большой жесткости // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. VII-1, часть 1. М.: Янус-К. 2008. С. 152–171.
- 9. *Moler C., van Loan C.* Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, 25 years later // SIAM Review. 2003. T. 45, №1. P. 3–49.
- 10. *Hochbruck M*. A short course on exponential integrators // Matrix Functions and Matrix Equations. Singapore: World Scientific Publishing Company. 2015. pp. 28–49.
- 11. *Арушанян О.Б., Залеткин С.Ф., Калиткин Н.Н.* Тесты для вычислительного практикума по обыкновенным дифференциальным уравнениям // Вычислительные методы и программирование. 2002. Т. 3. С.11–19.
- 12. Галанин М.П., Ходжаева С.Р. Методы решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений. Результаты тестовых расчетов // М.В. Келдыша. 98. 29 Препринты ИПМ ИM. 2013. N⁰ C. URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-98
- 13. Галанин М.П., Ходжаева С.Р. Разработка и тестирование методов решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений // Математическое моделирование и численные методы. 2014. № 4. С. 110–121.
- 14. *Хайрер* Э., *Ваннер* Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир. 1999. 685 с.