СПЛАЙНЫ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ
(Вычислительные системы)
1995 год Выпуск 154

УДК 519.622

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ОДНОВРЕМЕННЫМ ВЫЧИСЛЕНИЕМ ПРОИЗВОДНЫХ ПО ПАРАМЕТРАМ

С.И.Фадеев, А.Ю.Березин

Во многих приложениях поиск решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений требуется сопровождать вычислением производных решения по параметрам. В статье обращается внимание на то обстоятельство, что использование одношаговых неявных методов позволяет эффективно подойти к этой проблеме. Рассматриваются два варианта: первый из них ориентирован на решение не слишком жестких систем, но с высоким порядком аппроксимации, а второй обладает L-устойчивостью, но имеет второй порядок аппроксимации.

Рассматриваемую задачу Коши запишем в виде

$$\frac{dx}{dt} = f(t,x,Q),\ t \in [t_0,T], \tag{1}$$

$$x(t_0) = x^0(Q). \tag{2}$$

Здесь $x = (x_1,\dots,x_n)$ – искомый вектор, $x^0(Q) = (x_1^0(Q),\dots$ $\dots,x_n^0(Q))$ – заданный вектор начальных значений, $Q = (Q_1,\dots$ $\dots,Q_m)$ – заданный вектор параметров. Компоненты вектора правых частей $f = (f_1,\dots,f_n)$ предполагаются достаточно гладкими функциями всех своих аргументов.

Опишем алгоритм численного решения задачи Коши. Предположим, что $t_0 < t_1 < \ldots < t_N = T$ - сетка на отрезке $[t_0,T]$, и введем обозначение $x^i = x(t_i)$. Из (1) имеем

$$x^i - x^{i-1} - \int_{t_{i-1}}^{t_i} f(t,x(t),Q)dt = 0.$$

Заменим в этом равенстве интеграл формулой Симпсона

$$\int_{t_{i-1}}^{t_i} f(t,x(t),Q)dt \approx \frac{h_{i-1}}{6} (f^{i-1} + 4f(t_{i-1/2},\tilde{x}^{i-1/2},Q) + f^i),$$

где $h_{i-1} = t_i - t_{i-1}$; $t_{i-1/2} = (t_{i-1} + t_i)/2$;

$$\tilde{x}^{i-1/2} = (x^{i-1}+x^i)/2 + \frac{5h_{i-1}}{32}(f^{i-1}-f^i) + \frac{h_{i-1}^2}{64}(f_x^{i-1}f^{i-1} + f_t^{i-1} + f_x^i f^i + f_t^i). \quad (3)$$

Здесь и в дальнейшем через f_x обозначается матрица Якоби, а f_t (t - скаляр) означает частную производную вектор-функции по t. В итоге приходим к соотношению

$$x^i - x^{i-1} - \frac{h_{i-1}}{6} (f^{i-1} + 4f(t_{i-1/2},\tilde{x}^{i-1/2},Q) + f^i) \approx 0.$$

Если предположить, что $f \in C^4$, то в силу общих теорем о гладкости решения задачи Коши $x \in C^5[t_0,T]$ и имеет место оценка

$$|x(t_{i-1/2}) - \tilde{x}^{i-1/2}| \le Ch_{i-1}^5.$$

Используя это неравенство и явное выражение остаточного члена формулы Симпсона, последнее соотношение можно записать в виде:

$$x^i - x^{i-1} - \frac{h_{i-1}}{6} (f^{i-1} + 4f(t_{i-1/2},\tilde{x}^{i-1/2},Q) + f^i) =$$

$$= -\frac{h_{i-1}^5}{2880}\left(\frac{d}{dt}\right)^5 x(\bar{t}) + O(h_{i-1}^6),$$

где $\bar{t} \in [t_o,T]$ (точка $\bar{t}$, вообще говоря, различна для разных компонент вектора x). Окончательная формулировка алгоритма решения задачи Коши такова. Пусть $x^i = (x_1^i,\ldots,x_N^i)$ - приближенное значение вектора $x(t_i)$. Векторы x^i, $i = 0,\ldots,N$, определяются как решение системы конечных уравнений:

$$\left.\begin{aligned} & x^o = x^o(Q), \\ & x^i - x^{i-1} - \frac{h_{i-1}}{6}(f(t_{i-1},x^{i-1},Q)+4f(t_{i-1/2},\tilde{x}^{i-1/2},Q) + \\ & \qquad\qquad + f(t_i,x^i,Q)), \end{aligned}\right\} \quad (4)$$

где $\tilde{x}^{i-1/2}$ определяется по формуле (3). Используя надлежащим образом выбранные нормы в сеточных пространствах "решений" и "правых частей", можно показать, что дискретная задача (4) аппроксимирует задачу (1)-(2) с четвертым порядком по $h=\max h_i$ и соответствующий метод дискретизации является устойчивым. В силу известных результатов отсюда следует сходимость решений $x = (x^o,\ldots,x^N)$ задачи (4) к решению задачи (1)-(2) при $h \to 0$ (см.[1]).

Рассмотрим вопрос о численной реализации метода (4). Соотношение (4) при заданном $i \geq 1$ можно рассматривать как нелинейное уравнение относительно вектора x^i, $\Phi(x^i) = 0$ и решать его, например, методом Ньютона, т.е. отправляясь от некоторого начального приближения $x^{i,o}$ для x^i, определять последующие приближения по формуле

$$x^{i,k+1} = x^{i,k} - [\Phi_x(x^{i,k})]^{-1}\Phi(x^{i,k}), \qquad k \geq 0.$$

Поскольку в выражении для оператора Φ фигурируют первые производные правых частей уравнений (1) и, следовательно, элементы матрицы Φ_x выражаются через вторые производные функций f_m, то имеет смысл воспользоваться модифицированным методом Ньютона в следующей формулировке. Будем определять последовательные приближения по формуле

$$x^{i,k+1} = x^{i,k} - [\Psi_x(x^{i,k})]^{-1}\Phi(x^{i,k}), \quad k \geq 0, \tag{5}$$

где оператор $\Psi(x)$ при известном x^{i-1} определяется выражениями

$$\Psi(x) = x - x^{i-1} - \frac{h_{i-1}}{6}(f(t_{i-1},x^{i-1},Q) +$$

$$+ 4f(t_{i-1/2},\hat{x}^{i-1/2},Q) + f(t_i,x,Q)),$$

$$\hat{x}^{i-1/2} = (x^{i-1}+x)/2 + \frac{h_{i-1}}{6}(f(t_{i-1},x^{i-1},Q) - f(t_i,x,Q)).$$

Поскольку для реализации метода Ньютона в формулировке (5) необходимо вычислить производные $\partial f_i/\partial x_j$, то начальное приближение $x^{i,o}$ к x^i естественно брать в виде

$$x^{i,o} = x^{i-1} + h_{i-1} f(t_{i-1},x^{i-1}, Q) +$$

$$+ \frac{h_{i-1}^2}{2} f_x(t_{i-1},x^{i-1},Q)f(t_{i-1},x^{i-1},Q).$$

Итерационный процесс (5) считается сошедшимся, если разность между $x^{i,k+1}$ и $x^{i,k}$ становится меньше заданного малого числа $|x^{i,k+1} - x^{i,k}| < \varepsilon$. В качестве искомого решения x^i принимаем приближение $x^{i,k+1}$.

Рассмотрим теперь вопрос о вычислении производных $\partial x/\partial Q_j$ решения задачи (1)-(2) по параметру Q_j. Считаем, что вычисленное решение x^i удовлетворяет соотношению $\Psi(x^i) = 0$. Используя правило дифференцирования неявной функции, получаем равенство

$$A^i x^i_{Q_j} = B^i x^{i-1}_{Q_j} + g^i, \tag{6}$$

где

$$A^i = E - \frac{h_{i-1}}{6}[f_x^i + 4f_x(t_{i-1/2},\hat{x}^{i-1/2},Q)(0.5E - \frac{h_{i-1}}{8} f_x^i)],$$

$$B^i = E + \frac{h_{i-1}}{6}[f_x^{i-1} + 4f_x(t_{i-1/2},\hat{x}^{i-1/2},Q)(0.5E+\frac{h_{i-1}}{8}f_x^{i-1})],$$

$$g^i = \frac{h_{i-1}}{6}[f_{Q_j}^{i-1} + 4f_{Q_j}(t_{i-1/2},\hat{x}^{i-1/2},Q) +$$

$$+ 0.5h_{i-1}f_x(t_{i-1/2},\hat{x}^{i-1/2},Q)\times(f_{Q_j}^{i-1} - f_{Q_j}^i) + f_{Q_j}^i]$$

(буквой E обозначена единичная матрица).

Таким образом, для вычисления $x_{Q_j}^i$ требуется решить систему линейных уравнений (6) с матрицей A^i, которая использовалась в методе Ньютона (5).

Остановимся на контроле точности численного решения задачи (1)-(2), считая для простоты шаг сетки постоянным. Для этого, следуя [2], используем теорему Штеттера [1], которая применительно к нашей ситуации утверждает, что,если локальная ошибка имеет вид $\delta^i = \varphi(t_{i-1})h^5 + O(h^6)$, то глобальную ошибку можно представить в виде $\varepsilon^i = z(t_i)h^4 + O(h^5)$, где функция z является решением задачи Коши

$$\left.\begin{aligned} &z' = f_x z - \varphi \equiv g,\ t \in [t_o,T], \\ &z(t_o) = 0. \end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

Применим к этой задаче алгоритм (4) аппроксимируя значения $z(t_{i-1/2})$ выражением $\hat{z}^{i-1/2} = (z^{i-1} + z^i)/2 + \frac{h}{8}(g(t_{i-1},z^{i-1}) - g(t_i,z^i))$. После несложных преобразований получим,что $A^i z^i = B^i z^{i-1} + h\varphi(t_{i-1}) + O(h^2)$, откуда следует, что

$$\left.\begin{aligned} &\varepsilon^o = 0, \\ &\varepsilon^i = (A^i)^{-1}[B^i\varepsilon^{i-1} + \delta^i] + O(h^6),\ i \geq 1. \end{aligned}\right\} \qquad (8)$$

Для того, чтобы воспользоваться рекуррентными соотношениями (8), требуется оценка величины δ^i, которую можно представить в виде

$$\delta^i = \frac{1}{2880} \left(\frac{d}{dt}\right)^5 x(t_{i-1})h^5 + 0(h^6),$$

где $x(t)$ - точное решение задачи (1)-(2). Пусть $\tilde{x}(t)$ - решение системы (1) такое, что $\tilde{x}(t_{i-1}) = x_{i-1}$. Тогда

$$x^i - \tilde{x}(t_i) = \frac{1}{2880} \left(\frac{d}{dt}\right)^5 \tilde{x}(t_{i-1})h^5 + 0(h^6) = \delta^i + 0(h^6).$$

Положим

$$\hat{x}^i = x^{i-1} + \frac{h}{2}[f^{i-1} + f^i + \frac{h}{6}(f_x^{i-1}f^{i-1} + f_t^{i-1} - f_x^i f^i - f_t^i)],$$

где f^i, f_x^i, f_t^i вычислены при $x = x^i$. Легко убедиться, что

$$\hat{x}^i = \tilde{x}(t_i) - \frac{4}{2880} \left(\frac{d}{dt}\right)^5 \tilde{x}(t_{i-1})h^5 + 0(h^6).$$

Следовательно

$$x_i - \hat{x}_i = \frac{5}{2880} \left(\frac{d}{dt}\right)^5 \tilde{x}(t_{i-1})h^5 + 0(h^6).$$

Поскольку $x_{i-1} - x(t_{i-1}) = 0(h^4)$, то для достаточно гладких функций f имеет место равенство $\delta^i = (x_i - \hat{x}_i)/5 + 0(h^6)$.

Если задача (1)-(2) является жесткой, то описанный алгоритм становится неэффективным. Существуют специальные методы интегрирования таких задач, в частности, полунеявные методы типа Розенброка. Рассмотрим один из таких методов 2-го порядка точности [3]:

$$\left.\begin{aligned}
&x^{i+1} = x^i + p_1 l_1 + p_2 l_2,\\
&D_{i+1} l_1 = h_i f(t_i, x^i, Q),\\
&D_{i+1} l_2 = h_i (f(t_i + \beta h_i, x^i + \beta l_1, Q) + \gamma f_x(t_i, x^i, Q) l_1,\\
&D_{i+1} = E - a h_i f_x(t_i, x^i, Q).
\end{aligned}\right\} \quad (9)$$

С точки зрения численной реализации удобно записать формулы (9) в следующем виде [4]:

$$x^{i+1} = x^i + q_1k_1 + q_2k_2,$$

$$D_{i+1}k_1 = h_i f(t_i, x^i, Q),$$

$$D_{i+1}k_2 = h_i f(t_i+\beta h_i, x^i+\beta k_1) + \alpha k_1,$$

где

$$k_1 = l_1, \; k_2 = l_2 + \gamma l_1/a,$$

$$q_1 = p_1 - p_2\gamma/a, \quad q_2 = p_2, \; \alpha = \gamma/a.$$

Раскладывая l_1, l_2 в ряды по степеням h_{i+1}, нетрудно получить условия, обеспечивающие 2-й порядок схемы (9):

$$p_1 + p_2 = 1, \quad a + p_2(\beta+\gamma) = 1/2, \quad p_2\beta = 1/2.$$

Далее, применяя (9) к модельной задаче

$$x' = \lambda x, \quad x(0) = x^0, \quad \lambda < 0, \tag{10}$$

получаем условие L-устойчивости $a^2 - a + p_2(\beta+\gamma) = 0$. Дополнительное соотношение $p_2\beta^2 = 1/3$, упрощающее вид локальной ошибки, замыкает систему уравнений для определения параметров схемы (9). Решая эту систему, получаем $p_1 = 1/4$, $p_2 = 3/4$, $\beta = 2/3$, $a = 1-\sqrt{2}/2$, $\gamma = -4a/3$. При этом локальная ошибка определяется выражением

$$\delta^{i+1} = f_x^i \psi(t_i) h_i^3 + O(h_i^4),$$

где

$$\psi(t) = \frac{1-3a}{3} f_x f + \frac{3a-1}{6} f_t.$$

Способ контроля точности численного решения предложен в [4]. Следуя [2], опишем другой подход, считая для простоты шаг постоянным. Приближенное значение главного члена в разложении глобальной ошибки можно получить по формулам

$$\varepsilon^{o} = 0,$$

$$\varepsilon^{i+1} = \psi_i h^2 + \frac{2a-1}{a} D_{i+1}^{-1}(\varepsilon^{i}-\psi_i h^2) + \frac{1-a}{a} D_{i+1}^{-2}(\varepsilon^{i}-\psi_i h^2).$$

Полагая $D_{i+1} m_2 = l_1$ и используя разложение в ряд по степеням h, получаем

$$\psi_i h^2 = \varphi_i + O(h^3),$$

$$\varphi_i = \frac{1-9a}{12} l_1 + \frac{3a-1}{4} l_2 + \frac{1}{6} m_2.$$

Таким образом

$$\varepsilon^{i+1} = \varphi_i + \frac{2a-1}{a} D_{i+1}^{-1}(\varepsilon^{i}-\varphi_i) + \frac{1-a}{a} D_{i+1}^{-2}(\varepsilon^{i}-\varphi_i) + O(h^3).$$

Дополним изложенный алгоритм решения задачи Коши процедурой вычисления производной $y = \partial x/\partial Q_j$ по параметру Q_j. Полагаем $y^{o} = \partial x^{o}/\partial Q_j$ и при $i \geq 0$

$$\left.\begin{aligned} y^{i+1} &= y^{i} + p_1\bar{l}_1 + p_2\bar{l}_2, \\ D_{i+1}\bar{l}_1 &= h_i(f_{Q_j}(t_i,x^{i},Q) + f_x(t_i,x^{i},Q)y^{i}), \\ D_{i+1}\bar{l}_2 &= h_i(f_{Q_j}(t_i + \beta h_i,x^{i} + \beta l_1,Q) + \\ &\quad + f_x(t_i+\beta h_i,\, x^{i}+\beta l_1,Q)\cdot(y^{i}+\beta\bar{l}_1) + \\ &\qquad + \gamma f_x(t_i,x^{i},Q)\bar{l}_1. \end{aligned}\right\} \qquad (11)$$

Разложения величин $\bar{l}_1,\bar{l}_2$ в ряд по степеням h_i имеют вид:

$$\bar{l}_1 = (f^{i}_{Q_j} + f^{i}_x y^{i})h_i + af^{i}_x(f^{i}_{Q_j} + f^{i}_x y^{i})h_i^2 + O(h_i^3),$$

$$\bar{l}_2 = (f^{i}_{Q_j} + f_x y^{i})h_i + [(a+\beta+\gamma)f^{i}_x(f^{i}_{Q_j} + f^{i}_x y^{i}) +$$

$$+ \beta(f^{i}_{xt} + f^{i}_{xx}f^{i})y^{i} + \beta(f^{i}_{Q_j t} + f^{i}_{Q_j x}f^{i})\, h_i^2 + O(h_i^3).$$

Используя разложение точного решения уравнения в вариациях

$$y(t_{i+1}) = y^i + (f^i_{Q_j} + f^i_x f)h_i + \frac{1}{2}[f^i_x(f^i_{Q_y} + f^i_x y^i) +$$
$$+ (f^i_{tx} + f^i_{xx} f^i)y^i + (f^i_{Q_j t} + f^i_{Q_j x} f^i)]h^2 + O(h^3_i)$$

и учитывая соотношения, связывающие параметры схемы (9), при - ходим к выводу, что схема (11) имеет 2-ой порядок точности.

Применим схему (11) к задаче

$$y' = \lambda y + x, \quad y(0) = 0, \ \lambda < 0, \tag{12}$$

решение которой есть производная $\partial x/\partial\lambda$ решения модельной за - дачи (10). Непосредственным вычислением получаем, что в случае постоянного шага сетки

$$y^{i+1} = P(h)(y^i + hx^i),$$
$$P(h) = (1 + (1-2a)\lambda h)/(1-a\lambda h)^2,$$

откуда находим $y^i = ih(P(h))^i x^o$, что соответствует поведению точного решения $y(t)$ рассматриваемой задачи при больших t.

Для вычисления производной по параметру можно использовать также следующую схему:

$$\left.\begin{aligned}
&y^{i+1} = y^i + P_1\bar{\bar{l}}_1 + P_2\bar{\bar{l}}_2,\\
&D_{i+1}\bar{\bar{l}}_1 = h_i(f_{Q_j}(t_i, x^i + al_1, Q) + f_x(t_i, x^i, Q)y^i),\\
&D_{i+1}\bar{\bar{l}}_2 = h_i(f_{Q_j}(t_i + \beta h_i, x^i + (\beta+\gamma)l_1 + al_2, Q) +\\
&\quad + f_x(t_i + \beta h_i, x^i + \beta l_1)(y^i + (\beta+\gamma)\bar{\bar{l}}_1)).
\end{aligned}\right\} \tag{13}$$

Так же, как и выше, проверяется, что эта схема имеет 2-й поря - док точности. Кроме того, если схему (13) применить к задаче (12), то выражение для y^{i+1} имеет тот же вид, который получа - ется при интегрировании методом (9) задачи Коши: $x' = \lambda x$, $y' =$ $= \lambda y + x$, $x(0) = x^o$, $y(0) = 0$.

Литература

1. ШТЕТТЕР Х. Анализ методов дискретизации для обыкновенных дифференциальных уравнений. -М.: Мир, 1978. - 461 с.

2. НОВИКОВ Е.А. Оценка глобальной ошибки А-устойчивых методов решения жестких систем //ДАН. - 1995. - Т. 343, № 4. - С. 452-455.

3. ДЕККЕР К., ВЕРВЕР Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. - М.: Мир, 1988. - 332 с.

4. НОВИКОВ Е.А., ШИТОВ Ю.А. Методы второго порядка для решения неавтономных систем ОДУ //Вычислительные технологии. - 1995.-Т. 4, № 10. -.С. 262-271.

Поступила в редакцию

18 октября 1995 года