

P5-2021-50

Н. Д. Дикусар*

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КОШИ
НА ОСНОВЕ МЕТОДА БАЗИСНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Направлено в журнал «Математическое моделирование»

* E-mail: dnd@jinr.ru

Численное решение задачи Коши на основе метода базисных элементов

В рамках метода базисных элементов (МБЭ) предложен принципиально новый подход к численному решению задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (метод МБЭ–ПК). В МБЭ–ПК используется явная схема типа «предиктор–корректор», условно названная «схемой обнаружения цели». Вычисление прогноза на очередном шаге осуществляется с помощью двух МБЭ-многочленов пятой степени, связанных дополнительными условиями. Первый многочлен вычисляет «точку наводки», а второй определяет «координату цели», т. е. точку, близкую к точному решению. Такая схема устойчива при вычислениях с предельно малым шагом ($h = 10^{-17}$, 10^{-15}). Метод проверен тестом жесткой задачи и сравнениями с погрешностями популярных классических методов. На примерах показано, что точность метода МБЭ–ПК не хуже точности метода Рунге–Кутты четвертого порядка, а также методов Адамса–Башфорта и Фельберга пятого порядка.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова ОИЯИ.

Numerical Solution of the Cauchy Problem Based on the Basic Element Method

Within the framework of the basic element method (BEM), a fundamentally new approach to the numerical solution of the Cauchy problem for ODE (BEM–PC method) is proposed. In BEM–PC, an explicit scheme of the “predictor–corrector” type is used, conventionally called the “target detection scheme”. Calculation of the prediction for the next step is carried out using two BEM-polynomials of the fifth degree, connected by additional conditions. The first polynomial calculates the “aiming point”, and the second determines the “target coordinate”, i.e. a point close to the exact solution. Such a scheme is stable in calculations with an extremely small step ($h = 10^{-17}$, 10^{-15}). The method has been verified by a stiff Cauchy problem test and comparisons with errors of popular classical methods. With the help of examples it is shown that the accuracy of the BEM–PC method is not worse than the accuracy of the Runge–Kutta method of the fourth order and also of Adams–Bashforth and Fehlberg methods of the fifth order.

The investigation has been performed at the Meshcheryakov Laboratory of Information Technology, JINR.

ВВЕДЕНИЕ

Начальная задача Коши наиболее часто используется в различных приложениях. Несмотря на большое число методов численного решения задачи Коши [1–3], поиск новых явных методов для решения жестких задач остается актуальным [4]. Известно, что полиномиальная экстраполяция плохо обусловлена. Ее применение к жестким задачам практически невозможно, так как требует предельно малого шага. Явный многошаговый метод неустойчив даже для многих устойчивых задач [1].

В данной работе, с учетом указанных трудностей, предлагается явный метод для численного решения задачи Коши

$$y'(x) = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (1)$$

на основе *МБЭ-многочленов* [5] и метода полиномиального прогноза на трехточечных сетках [6]. В *методе базисных элементов* (МБЭ) [5] реализована идея П. Л. Чебышева о приближении функции на отрезке ограниченной длины [7]. В рамках МБЭ алгебраический многочлен n -й степени $P_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$ преобразуется в форму МБЭ-многочлена, в которой синтезированы свойства многочлена Тейлора и многочлена Лагранжа второй степени на *локальной трехточечной сетке* (ЛТС) $\Delta_\alpha^\beta: x_\alpha < x_0 < x_\beta$, $\alpha = x_\alpha - x_0$, $\beta = x_\beta - x_0$, $\alpha \neq \beta$, $\alpha, \beta \in R$, где α и β — управляющие параметры. МБЭ-многочлены обеспечивают устойчивость к ошибкам вычислений за счет параметризации базисных функций, понижения порядка производных, понижения числа обусловленности нормальной матрицы и др. [8–10]. Решение задачи (1) с помощью МБЭ-многочленов пятой степени *по точности* не уступает популярным классическим методам четвертого и пятого порядков. Устойчивость МБЭ-многочленов к вычислениям с чрезмерно малым шагом $h = 10^{-17}$, 10^{-15} подтверждается тестом для жесткой задачи [4] (см. разд. 3, 5).

В данной работе решение задачи (1) выполняется по схеме, *подобной* известной схеме «предиктор–корректор» (ПК). Обычно в итерационном процессе ПК в качестве предиктора используют значение, полученное по явной формуле, а в качестве корректора — неявную формулу Адамса. При этом предиктор и корректор должны быть связаны некоторыми условиями.

Явная схема МБЭ–ПК основана на двух, связанных между собой, МБЭ-многочленах *пятой* степени. Чтобы сохранить терминологию, будем называть эти многочлены условно предиктором и корректором, хотя они решают так называемую задачу *обнаружения цели*, в которой предиктор вычисляет *точку наводки*, а корректор — *координату цели*, т. е. вычис-

ляет точку, близко расположенную к точному решению. При этом главный вопрос заключается в *точности установки* «точки наводки».

Метод МБЭ–ПК, как и трехшаговый метод Адамса, состоит из стартовой процедуры для определения приближенных значений точного решения в двух дополнительных узлах и формул для вычисления предсказываемых значений точного решения $y(x)$ в последующих точках.

Статья организована следующим образом: описание метода содержится в первом и втором разделах, где кратко изложена конструкция МБЭ-многочлена, приведены формулы для вычисления коэффициентов и алгоритм метода. В третьем разделе сравниваются погрешности метода МБЭ–ПК с погрешностями методов Рунге–Кутты четвертого порядка, Адамса–Башфорта и метода Фельберга пятого порядка. В четвертом разделе обсуждается проблема выбора числа K , фиксирующего «точку наводки». Проверка метода на примерах решения жесткой задачи приводится в пятом разделе.

1. МБЭ-МНОГОЧЛЕНЫ НА ТРЕХТОЧЕЧНЫХ СЕТКАХ

В методе МБЭ–ПК один цикл интегрирования выполняется на четырех последовательных узлах $\dots < x_{i-2} < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} < \dots$, $i = \overline{2, N-1}$, глобальной *равномерной* сетки Δ_a^b : $a = x_1 < \dots < x_N = b$ с шагом h . На четверке узлов строятся три ЛТС — две равномерные $\Delta_{i-2}^i(h)$, $\Delta_{i-1}^{i+1}(h)$ и одна вспомогательная, *неравномерная*, сетка, $\Delta_{i-1}^K(h, \hat{h})$, где $x_K = x_i + \hat{h}$, $\hat{h} = Kh$, $0 < K < 1$ (рис. 1). Нижний и верхний индексы равномерных сеток указывают на левый и правый узлы ЛТС. Для вычисления y_{i+1} используются h , $\hat{h} = Kh$ и $y_\nu^{(j)}$, $\nu = \overline{i-2, i+1}$, $j = \overline{0, 1}$.

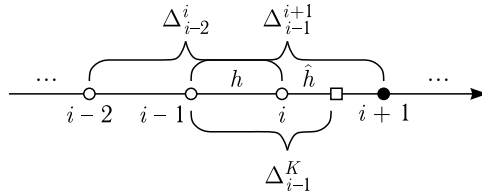


Рис. 1. Локальные трехточечные сетки на глобальной сетке Δ_a^b

На трех узлах $x_\alpha < x_0 < x_\beta$ сетки Δ_α^β строится МБЭ-многочлен n -й степени в форме базисных элементов [5] в виде

$$P_{n \downarrow m}(\tau; \mathbf{r}, \alpha, \beta) = \sum_{j=0}^m Q^j[w_1, w_2, w_3][r_{1j}, r_{2j}, r_{3j}]^T = P_n(\tau), \quad m = \lfloor n/3 \rfloor, \quad (2)$$

где $Q^j w_\nu$ — базисные функции; $r_{\nu j}$ — коэффициенты, $\nu = \overline{1, 3}$, $\tau = x - x_0$. Управляющие параметры α и β функционально связаны с независимой переменной τ специальным правилом *двойного отношения* четырех точек $[\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4] = [13]/[23] : [34]/[14]$, $[ij] = \xi_j - \xi_i$, $\xi_j \neq \xi_i$. Если фиксировать

$\xi_1 = \tau$ и менять порядок в тройке $[\xi_2 \xi_3 \xi_4] = [\alpha \beta 0]$, то это правило порождает три базисных элемента в виде дробно-рациональных функций w_1, w_2, w_3 относительно α, β и τ (квадратичные относительно τ):

$$w_1 = \frac{-\tau(\tau - \beta)}{\alpha\gamma}, \quad w_2 = \frac{\tau(\tau - \alpha)}{\beta\gamma}, \quad w_3 = \frac{(\tau - \alpha)(\tau - \beta)}{\alpha\beta}, \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^3 w_i = 1, \quad \gamma = \beta - \alpha, \quad \alpha\beta\gamma \neq 0.$$

Четвертый базисный элемент — кубическая парабола: $Q = \alpha\beta\tau w_3 = \tau(\tau - \alpha)(\tau - \beta)$.

Базисные элементы образуют структуру с частичной симметрией относительно перестановки $\alpha \leftrightarrow \beta$: $w_1 \leftrightarrow w_2, w_3 \leftrightarrow w_3, Q \leftrightarrow Q$. Обнуляющая функция Q является однородной: $Q(\mu\tau; \mu\alpha, \mu\beta) = \mu^3 Q(\tau; \alpha, \beta)$, а $w_\nu, \nu = \overline{1, 3}$, обладают масштабной инвариантностью: $w_\nu(\mu\tau; \mu\alpha, \mu\beta) \equiv w_\nu(\tau; \alpha, \beta), \mu \neq 0, \mu \in R$. Эти свойства полезны при выборе шага.

Коэффициенты $r_{\nu j}$ вычисляются рекурсивно через параметры α, β и значения $P_n^{(j)}(\cdot), j = \overline{0, m}$, в узлах сетки Δ_α^β . Явные формулы для вычисления $r_{\nu j}$ приведены в работах [8–10]. За счет аналитической зависимости $r_{\nu j}$ от α и β МБЭ-многочлены степени n , как и многочлены Эрмита, в задачах аппроксимации используют производные j -го порядка.

Базисные функции $Q^j w_\nu, \nu = \overline{1, 3}$, и коэффициенты МБЭ-многочлена пятой степени на сетках $\Delta_{i-2}^i(h, 1h)$ и $\Delta_{i-1}^K(h, Kh)$ зависят от h, Kh , значений аппроксимируемой функции и от ее первых производных в узлах ЛТС.

Создадим базисный вектор $\mathbf{b} = [\mathbf{w}, Q\mathbf{w}]$ и векторы $\mathbf{y}_{i-2}^i = [y_{i-2}, y_{i-1}, y_i, p_1, p_2, p_3]^T$ и $\mathbf{f}_{i-1}^K = [y_{i-1}, y_i, A_K, c_1, c_2, c_3]^T$, компоненты которых являются коэффициентами $r_{\nu j}$ многочлена (2) при $j = 0, 1$ соответственно на сетках Δ_{i-2}^i и Δ_{i-1}^K . Компоненты w_3 и Qw_3 в (2) связаны с внутренними узлами ЛТС, а w_2 и Qw_2 — с правыми. В векторе \mathbf{b} поменяем местами эти компоненты в соответствии с порядком компонент в \mathbf{y}_{i-2}^i и \mathbf{f}_{i-1}^K , т. е. $\mathbf{b} = [w_1, w_3, w_2, Qw_1, Qw_3, Qw_2] = [b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6]$. При $\alpha = -h, \beta = kh, k = 1, K$ в (1) вектор \mathbf{b} принимает следующий вид:

$$\mathbf{b} = \left[\frac{\tau(\tau - kh)}{(k+1)h^2}, \frac{-(\tau+h)(\tau - kh)}{kh^2}, \frac{\tau(\tau+h)}{(k+k^2)h^2}, \frac{\tau^2(\tau+h)(\tau - kh)^2}{(k+1)h^2}, \right. \\ \left. \frac{-\tau(\tau+h)^2(\tau - kh)^2}{kh^2}, \frac{\tau^2(\tau+h)^2(\tau - kh)}{(k+k^2)h^2} \right]. \quad (3a)$$

Используя векторы $\mathbf{b}, \mathbf{y}_{i-2}^i, \mathbf{f}_{i-1}^K$, создадим два многочлена пятой степени $\mathcal{P}_p(x; \mathbf{y}_{i-2}^i, h, 1) = \mathbf{b}\mathbf{y}_{i-2}^i$ на сетке Δ_{i-2}^i и $\mathcal{P}_c(x; \mathbf{f}_{i-1}^K, h, K) = \mathbf{b}\mathbf{f}_{i-1}^K$ на сетке Δ_{i-1}^K :

$$\mathcal{P}_p = y_{i-2}b_1(\tau; h, 1) + y_{i-1}b_2(\tau; h, 1) + y_i b_3(\tau; h, 1) + p_1 b_4(\tau; h, 1) + \\ + p_2 b_5(\tau; h, 1) + p_3 b_6(\tau; h, 1), \quad \tau = x - x_{i-1},$$

и

$$\mathcal{P}_c = y_{i-1}b_1(\tau; h, K) + y_i b_2(\tau; h, K) + A_K b_3(\tau; h, K) + c_1 b_4(\tau; h, K) + \\ + c_2 b_5(\tau; h, K) + c_3 b_6(\tau; h, K), \quad \tau = x - x_i. \quad (4)$$

Определение. МБЭ-многочлены пятой степени $\mathcal{P}_p(x; \mathbf{y}_{i-2}^i, h, 1)$, $x \in [x_{i-2}, x_{i+1}]$, и $\mathcal{P}_c(x; \mathbf{f}_{i-1}^K, h, K)$, $x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$, при $\mathcal{P}_p^{(j)}(x_{i-1}) \equiv \mathcal{P}_c^{(j)}(x_{i-1})$ и $\mathcal{P}_p^{(j)}(x_i) \equiv \mathcal{P}_c^{(j)}(x_i)$, $j = 0, 1$, называются соответственно предиктором и корректором.

Принципиально новый метод прогноза y_{i+1} основан на экспериментально обнаруженном свойстве многочленов \mathcal{P}_p и \mathcal{P}_c , которое заключается в следующей гипотезе.

Гипотеза. Пусть на равномерной трехточечной сетке Δ_{i-2}^i с шагом h МБЭ-многочлен пятой степени $\mathcal{P}_p(x; \mathbf{y}_{i-2}^i, h, 1)$ аппроксимирует функцию $y(x) \in C^1$. Тогда на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ найдется точка $x_K = x_i + Kh$, $0 < K < 1$, такая, что при $A_K = \mathcal{P}_p(x_K; \mathbf{y}_{i-2}^i, h, 1)$ выполняется неравенство $|y(x_{i+1}) - \mathcal{P}_c(x_{i+1}; \mathbf{f}_{i-1}^K, h, K)| < T_K$, где T_K — заданный порог. ■

Многочлены \mathcal{P}_p и \mathcal{P}_c составляют основу метода МБЭ–ПК. Многочлен \mathcal{P}_p аппроксимирует $y(x) \in C^1$, $x \in [x_{i-2}, x_{i+1}]$, а многочлен \mathcal{P}_c использует A_K и $y'_K = f(x_K, A_K)$ для вычисления $y_{i+1} = \mathcal{P}_c(x_{i+1}; \mathbf{f}_{i-1}^K, h, K)$. Точность и устойчивость метода существенно зависят от длины h и числа K .

На каждом шаге интегрирования семь коэффициентов в (4) A_K , p_ν и c_ν , $\nu = \overline{1, 3}$, неизвестны. Компонента $A_K = \mathcal{P}_p(x_K; \mathbf{y}_{i-2}^i, h, 1)$, а p_ν и c_ν вычисляются на основе формул из работы [8], представленных ниже в следующем виде:

$$p_\nu = \mathbf{k}_\nu(h, 1) \mathbf{u}_\nu, \quad c_\nu = \mathbf{k}_\nu(h, K) \mathbf{v}_\nu, \quad \nu = \overline{1, 3}, \quad (5)$$

где

$$\mathbf{u}_1 = [y'_{i-2}, y_{i-2}, y_{i-1}, y_i]^T, \quad \mathbf{u}_2 = [y'_{i-1}, y_{i-2}, y_{i-1}, y_i]^T, \quad \mathbf{u}_3 = [y'_i, y_{i-2}, y_{i-1}, y_i]^T, \\ \mathbf{v}_1 = [y'_{i-1}, y_{i-1}, y_i, A_K]^T, \quad \mathbf{v}_2 = [y'_i, y_{i-1}, y_i, A_K]^T, \quad \mathbf{v}_3 = [y'_K, y_{i-1}, y_i, A_K]^T, \\ \mathbf{k}_1(h, k) = [1/((k+1)h^2), (k+2)/((k+1)^2h^2), -1/(kh^3), 1/(k(k+1)^2h^3)], \\ \mathbf{k}_2(h, k) = [-1/(kh^2), -1/((k+1)h^3), (k-1)/(k^2h^3), 1/(k^2(k+1)h^3)], \\ \mathbf{k}_3(h, k) = [1/(k(k+1)h^2), -1/((k+1)^2h^3), 1/(k^2h^3), \\ - (2k+1)/(k^2(k+1)^2h^2)]. \quad (6)$$

2. АЛГОРИТМ МБЭ–ПК

Алгоритм основан на формулах (3а)–(6). После установки h и K табулируются \mathbf{k}_ν , $\nu = \overline{1, 3}$, и компоненты базисных векторов $\mathbf{b}(x_K; h, 1)$, $\mathbf{b}(x_{i+1}; h, K)$, $i = \overline{1, N-1}$, задаются начальные значения

$y_\nu^{(j)} \approx y^{(j)}(x_\nu)$, $\nu = \overline{1, 3}$, $j = 0, 1$. Затем в цикле вычисляются y_{i+1} и y'_{i+1} , $i = \overline{3, N-1}$:

$$\begin{aligned} p_\nu &= \mathbf{k}_\nu(h, 1) \mathbf{u}_\nu, & \nu &= \overline{1, 3}, & A_K &= \mathcal{P}_p(x_K; \mathbf{y}_{i-2}^i, h, 1), & y'_K &= f(x_K, A_K); \\ c_\nu &= \mathbf{k}_\nu(h, K) \mathbf{v}_\nu, & \nu &= \overline{1, 3}, & y_{i+1} &= \mathcal{P}_c(x_{i+1}; \mathbf{f}_{i-1}^K, h, K), & (7) \\ & & & & y'_{i+1} &= f(x_{i+1}, y_{i+1}). \blacksquare \end{aligned}$$

В одном цикле алгоритм (7) выполняет 64 короткие операции при вычислении восьми скалярных произведений (28 сложений и 36 умножений), не считая операции на вычисление $f(x_K, A_K)$ и $f(x_{i+1}, y_{i+1})$.

Геометрическое представление МБЭ–ПК показано на рис. 2, а. Погрешности $\varepsilon_i = \log(|y(x_i) - y_i|)$ численного решения уравнения $y' = 5x^4$, $y(0) = 0$ на 100 шагах сетки при $h = 1000$, $K = 0,75$ и Digits = 64 в MAPLE приведены на рис. 2, б.

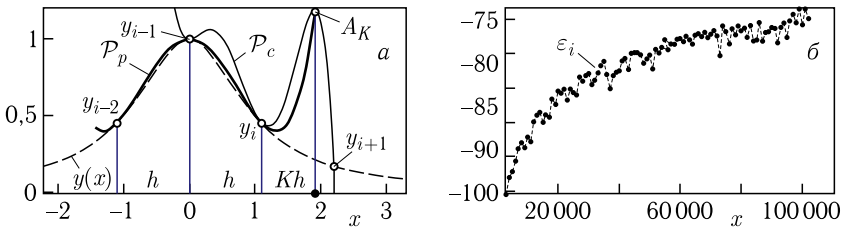


Рис. 2. Многочлены \mathcal{P}_p , \mathcal{P}_c (а). Погрешности ε_i в решении задачи $y' = 5x^4$, $y(0) = 0$ (б)

Погрешности ε_i , $i = \overline{1, 100}$ (рис. 2, б), находятся в пределах машинного нуля, что указывает на пятый порядок точности, поскольку, как известно, многошаговый метод имеет p -й порядок, если он точен для задачи, решением которой является многочлен степени p [1].

Замечание. Чем точнее установлен шаг h и число K , тем точнее y_{i+1} . При *большом* шаге h точка A_K находится далеко от кривой $y(x)$, что мало напоминает точку предсказания (рис. 2, а). В этом случае она является «точкой наводки» (*Aiming point*). При *слишком малом* шаге точка A_K находится вблизи точного решения и поэтому ее можно считать точкой предсказания.

3. СРАВНЕНИЕ МБЭ–ПК С ДРУГИМИ МЕТОДАМИ

Для сравнения погрешности метода МБЭ–ПК с погрешностями популярных классических методов Рунге–Кутты, Адамса–Башфорта и Фельберга используются данные таблиц из книги К. Аткинсона и др. [3].

Пример 1. В табл. 1 и 2 приведены результаты расчетов методом Рунге–Кутты *четвертого порядка* и методом МБЭ–ПК решения задачи Коши

$$y'(x) = 1/(1+x^2) - 2y^2, \quad y(0) = 0 \quad (8)$$

с известным точным решением $y(x) = x/(1 + x^2)$ при $h = 0,25$ и $2h = 0,5$. Табл. 1 содержит первые четыре столбца данных из таблицы 5.3 [3, с. 79] с результатами вычислений методом Рунге–Кутты в пяти узлах.

Таблица 1. Результаты расчетов методом Рунге–Кутты [3]

x	$y_h(x)$	$Y(x) - y_h(x)$	$Y(x) - y_{2h}(x)$
2,0	0,39995699	4,3e-5	1,0e-3
4,0	0,23529159	2,5e-6	7,0e-5
6,0	0,16210179	3,7e-7	1,2e-5
8,0	0,12307683	9,2e-8	3,4e-6
10,0	0,09900987	3,1e-8	1,3e-6

Таблица 2. Результаты расчетов методом МБЭ–ПК, $K = 0,76341$

x	$y_h(x)$	$ Y(x) - y_h(x) $	$ Y(x) - y_{2h}(x) $
2,0	0,40000000	2,3e-9	3,4e-4
4,0	0,23529411	3,5e-7	1,8e-5
6,0	0,16216216	7,4e-8	4,1e-6
8,0	0,12307692	2,4e-8	1,1e-6
10,0	0,09900901	9,6e- 9	7,6e-7

Соответствующие результаты решения задачи (8) методом МБЭ–ПК для $h = 0,25$, $2h = 0,5$ и $K = 0,76341$ приведены в табл. 2. На рис. 3, а и б показаны y_i и погрешности ε_i , полученные при $h = 0,5$, $h = 0,25$ и $K = 0,7619$. Погрешности ε_i строго зависят от заданного числа K (рис. 3, а). При $h = 0,5$ и $K = 0,76341$ погрешности ε_i увеличиваются, и решение теряет устойчивость при $x > 20$ (рис. 3, в). На этом же рисунке приведены графики ε_i для $h = 0,1, 0,2, 0,25, 0,5$ и $K = 0,756$, при которых решение устойчиво.

Пример 2. Табл. 3 и 4 содержат результаты расчетов методом БМЭ–ПК и данные из табл. 6.3 [3, с. 100], полученные методом Адамса–Башфорта четвертого порядка при решении следующей задачи Коши:

$$y'(t) = -y(t) + 2 \cos(t), \quad y(0) = 1 \quad (9)$$

для $h = 0,05$ и $2h = 0,1$ с известным точным решением $y(t) = \sin(t) + \cos(t)$.

Пример 3. Результаты численного решения задачи (9) методом Фельберга пятого порядка для $h = 0,25$ и $h = 0,125$ [3, с. 82] (табл. 5) сравниваются с результатами метода МБЭ–ПК при $K = 0,75$ и $K = 0,746$ (табл. 6).

На рис. 4 показаны графики ε_i , полученные при решении задачи (9) методом МБЭ–ПК для $h = 1, 0,05, 0,005$ и $K = 0,785, 0,770, 0,740$.

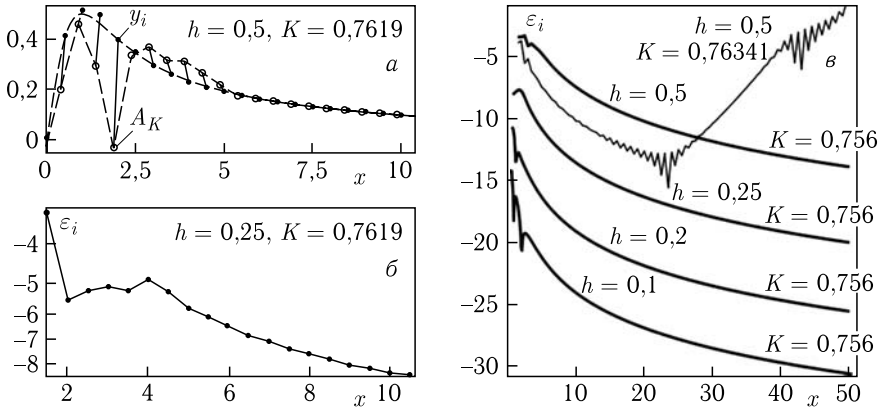


Рис. 3. Результаты решения задачи (8) при различных значениях h и K

Таблица 3. Результаты расчетов методом МБЭ–ПК, $K = 0,754$

t	$y_h(t)$	$y(t) - y_{2h}(t)$	$y(t) - y_h(t)$
2,0	0,49315060	-8,66e-9	-2,85e-10
4,0	1,41044612	6,74e-9	2,30e-10
6,0	0,68075479	2,90e-9	9,10e-11
8,0	0,84385882	-9,17e-9	-3,06e-10
10,0	-1,38309265	4,73e-9	1,64e-10

Таблица 4. Результаты расчетов методом Адамса–Башфорта 4-го порядка [3]

t	$y_h(t)$	$Y(t) - y_{2h}(t)$	$Y(t) - y_h(t)$
2	0,49318680	-3,96e-4	-3,62e-5
4	-1,41037698	-1,25e-3	-6,91e-5
6	0,68067962	1,05e-3	7,52e-5
8	0,84385416	3,26e-4	4,06e-6
10	-1,38301376	-1,33e-3	-7,89e-5

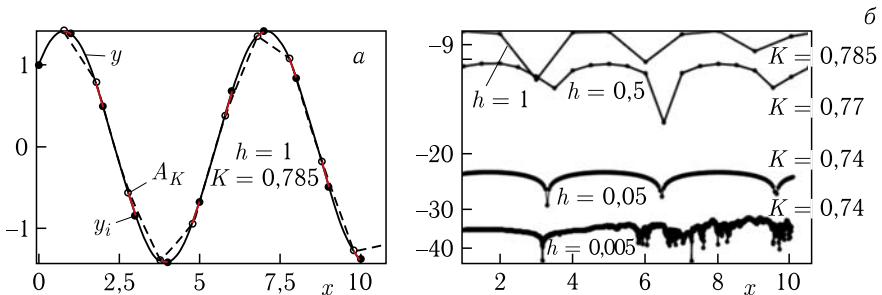


Рис. 4. Решение задачи (9) (а) и погрешности ε_i при различных h и K (б)

Таблица 5. Результаты численного решения задачи (9) методом Фельберга [3]

h	t	$\hat{y}_n(t)$	$Y(t) - \hat{y}_n(t)$
0,25	2,0	0,493151148	-5,58e-7
	4,0	-1,410446359	2,43e-7
	6,0	0,680754463	3,26e-7
	8,0	0,843858731	-5,18e-7
	10,0	-1,383092745	1,05e-7
0,125	2,0	0,493150606	-1,61e-8
	4,0	-1,410446124	8,03e-9
	6,0	0,680754780	8,65e-9
	8,0	0,843858228	1,53e-8
	10,0	-1,383092644	4,09e-9

Таблица 6. Результаты численного решения задачи (9) методом МБЭ-ПК

h, K	t	y_i	$y(t) - y_i$
$h = 0,25$ $K = 0,75$	2,0	0,493150124	4,67e-7
	4,0	-1,410446059	-5,69e-8
	6,0	0,680755160	-3,72e-7
	8,0	0,843857840	3,73e-7
	10,0	-1,383092702	6,23e-8
$h = 0,125$ $K = 0,746$	2,0	0,493150596	-5,67e-9
	4,0	-1,410446121	4,89e-9
	6,0	0,680754787	1,62e-9
	8,0	0,843858219	-6,24e-9
	10,0	-1,383092644	3,57e-9

Результаты сравнений в табл. 1–6 и графики (рис. 3, 4) показывают, что при хорошо подобранных h и K метод МБЭ-ПК обеспечивает погрешность не хуже погрешности популярных классических методов.

4. АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ЧИСЛА K НА ТОЧНОСТЬ РЕШЕНИЯ

Как было отмечено выше, точность решения существенно зависит от выбора шага h и числа K , фиксирующего узел x_K сетки $\Delta_{i-1}^K(h, Kh)$. Обычно для обеспечения необходимой точности и устойчивости решения измельчают шаг. В методе МБЭ-ПК надо еще подобрать число K .

Для анализа зависимости погрешности от h и K будем использовать выборку значений $\{y(x_i) - y_i\}$, $i = \overline{1, M}$, $M < N$, точное решение $y(x)$ и среднеквадратичную ошибку δ :

$$\delta = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M [y(x_i) - y_i]^2}.$$

Задача состоит в том, чтобы при заданном шаге h определить интервал для K , в пределах которого ошибка δ будет наименьшей.

Пример расположения точек A_K и y_{i+1} , полученных численным решением уравнения $y' = -\sin(x)$, $y_0 = 1$ для двух значений шага $h = 2$ ($M = 10$), $h = 0,2$ ($M = 40$) и $K = 0,741$, показан на рис. 5. Ошибка δ равна соответственно $0,01102$ (рис. 5, а) и $1,0861 \cdot 10^{-7}$ (рис. 5, б).

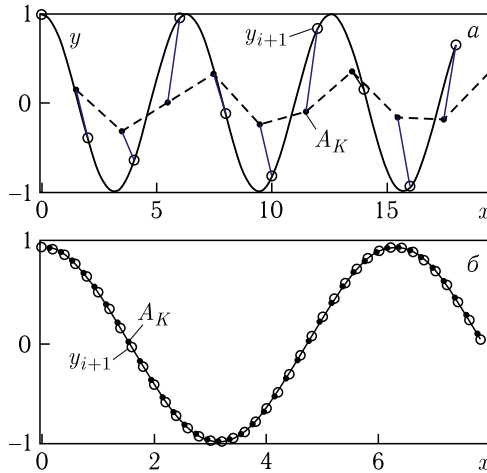


Рис. 5. Положение точек A_K и y_{i+1} при $h = 2$ (а) и $h = 0,2$ ($K = 0,741$) (б)

На рис. 6 показаны точки A_K и y_{i+1} для $h = 0,03$ ($M = 20$) и двух чисел $K = 0,758$ и $0,740$. Точные значения $y(x_i)$ находятся на гауссоподобной кривой $y(x) = 5 \exp[-(x - 3,5)^2 / 2 / (0,05 + 0,25(x - 3,5))^2] + 1$. При $K = 0,758$, $\delta = 0,04157$ точки A_K более удалены от точного решения $y(x)$ (рис. 6, а), а при $K = 0,740$ точки A_K и y_{i+1} находятся вблизи с ошибкой $\delta = 0,00268$ (рис. 6, б).

Табл. 7 содержит ошибки δ , полученные для пяти значений K и трех значений шага $h = 0,03$ ($M = 20$), $h = 0,003$ ($M = 200$), $h = 0,0003$ ($M = 2000$). Ошибки δ принимают минимальные значения в интервале $0,738 \leq K \leq 0,750$, вне которого они возрастают.

В табл. 8 представлены ошибки $\delta(h_i)$, полученные по результатам численного решения уравнений (8) и (9) на тысяче узлах для шести значений

Таблица 7. Оценка значений δ при различных h и K

M	h	K				
		0,730	0,738	0,740	0,750	0,760
20	0,03	0,140497	0,008466	0,007045	0,008243	0,455123
200	0,003	27962,35	$1,47 \cdot 10^{-8}$	$2,33 \cdot 10^{-8}$	$7,95 \cdot 10^{-8}$	$7,39 \cdot 10^{-3}$
2000	0,0003	$1,32 \cdot 10^{-2}$	$9,74 \cdot 10^{-14}$	$2,29 \cdot 10^{-13}$	$7,73 \cdot 10^{-13}$	$2,4910^{16}$

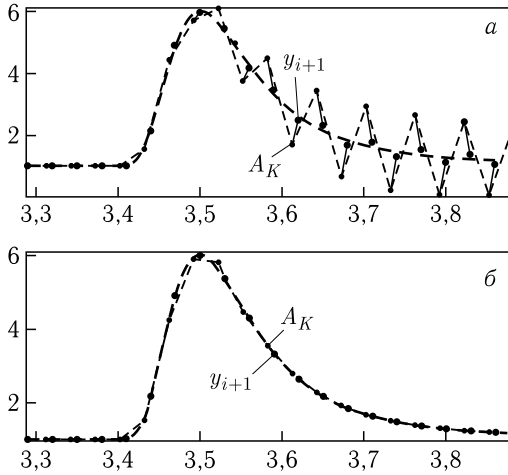


Рис. 6. Положение точек A_K и y_{i+1} относительно $y(x)$ при $K = 0,758$ (а) и $0,740$ (б)

Таблица 8. $\delta(h_l)$, $M = 1000$, $K = 0,750$ для уравнений (8) и (9)

$y(x)$	h	$0,125 \cdot 10^{-1}$	$0,125 \cdot 10^{-2}$	$0,125 \cdot 10^{-3}$	$0,125 \cdot 10^{-4}$	$0,125 \cdot 10^{-5}$	$0,125 \cdot 10^{-6}$
(8)	δ	$6,56 \cdot 10^{-9}$	$2,16 \cdot 10^{-13}$	$6,99 \cdot 10^{-18}$	$1,48 \cdot 10^{-23}$	$1,59 \cdot 10^{-30}$	$1,59 \cdot 10^{-37}$
(9)	δ	$4,56 \cdot 10^{-10}$	$6,32 \cdot 10^{-15}$	$5,59 \cdot 10^{-20}$	$6,55 \cdot 10^{-26}$	$6,56 \cdot 10^{-32}$	$6,54 \cdot 10^{-37}$

шага $h_l = 0,125 \cdot 10^{-l}$, $l = \overline{1,6}$, при $K = 0,750$. Ошибки $\delta(h_l)$ для обеих функций убывают с уменьшением шага, хотя для уравнения (9) они на два-три порядка меньше ошибок в решениях уравнения (8).

На рис. 7 показаны графики $\log(\delta(K))$, $K_l = 0,730 + 0,005(l - 1)$, $l = \overline{1,9}$, полученные для отдельных решений $y(x)$ при малых и *слишком малых* шагах сетки. Значения $\log(\delta)$ рассчитаны по точкам y_i и $y(x_i)$ ($M = 20$) при разных значениях h . Для уравнения $y'(x) = -2xy$, $y(0) = 1$ с точным решением $y(x) = \exp(-x^2)$ ошибка δ принимает наименьшее значение при $K = 0,735$ и $h_l = 0,01 + 0,001(l - 1)$ (рис. 7, а). В задаче (8) число K возрастает при увеличении шага от 0,1 до 0,3, а δ достигает минимального значения в интервале $0,750 \leq K \leq 0,770$ (рис. 7, б). Для слишком малых шагов $h_l = 10^{-15} + (l - 1) \cdot 10^{-15}$ число K попадает в интервал $0,735 \leq K \leq 0,760$, где все значения δ немного отличаются от минимального (рис. 7, в). Для функций $y(x) = \exp(x)$ и $y(x) = \sin(x) + \cos(x)$ значения δ минимальны при $K = 0,740$. Вне интервала $0,740 \leq K \leq 0,760$ значения δ резко возрастают. При увеличении шага алгоритм теряет устойчивость (рис. 7, з).

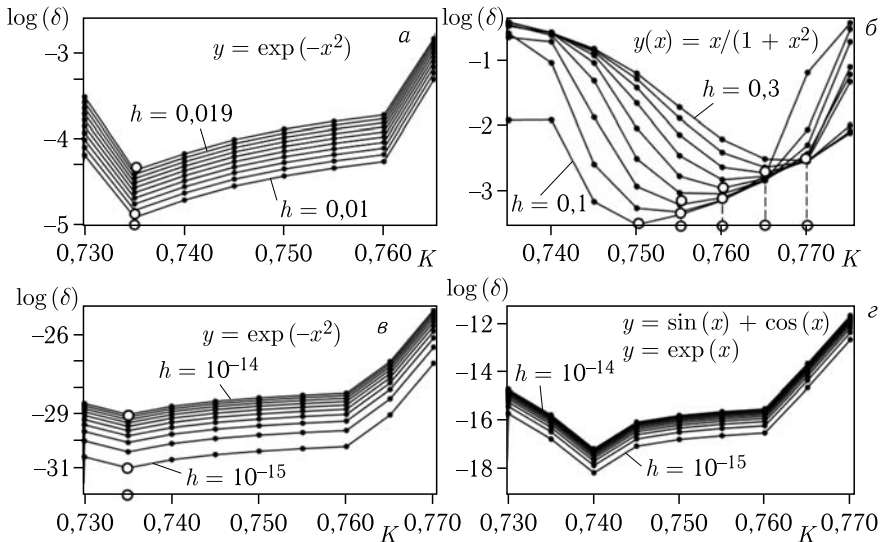


Рис. 7. Графики $\log(\delta(K))$ для различных значений h и точных решений $y(x)$

На практике точное решение $y(x)$ неизвестно. В зависимости от шага число K можно подбирать с учетом табл. 7, 8 или графиков на рис. 7.

В других случаях подбор числа K можно осуществить на основе информации в четырех узлах $x_1 < x_2 < x_3 < x_4$ с начальными значениями y_1, y_2, y_3, y_4 , полученными, кроме y_1 , например, методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Для этого с помощью алгоритма (7) в узле x_4 вычисляется несколько значений y_l и $e_l = |y_4 - y_l|$, $l = \overline{1, L}$, для K_l из набора чисел $\{K_l = K_1 + \Delta K(l - 1)\}$ в промежутке $[K_1, K_L]$, где $\Delta K = (K_L - K_1)/L$. Например, для $0,730 \leq K_l \leq 0,760$ и $L = 6$ $\Delta K = 0,005$. Число K^* , соответствующее минимальной погрешности $e^* = \min\{e_1, e_2, \dots, e_L\}$, принимается в качестве параметра $K = K^*$.

5. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКОЙ ЗАДАЧИ МЕТОДОМ МБЭ–ПК

Известно, что из-за плохой обусловленности полиномиальную экстраполяцию *практически невозможно применять* для решения жестких задач, поскольку требуется слишком малый шаг.

Устойчивость МБЭ-многочленов к ошибкам вычислений обеспечивает устойчивость метода МБЭ–ПК при работе с чрезмерно малым шагом.

Это подтверждается на примере решения уравнения $y' = 1000y$, $y_0 = 1$ с $h = 10^{-17}$ и $K = 0,742$ для четырех значений Digits = 16, 32, 64 и 128. При Digits = 16 вычисления неустойчивы, начиная с $N = 500$. На рис. 8, а–в приведены погрешности, вычисленные на 10000 шагах с Digits = 32, 64 и 128.

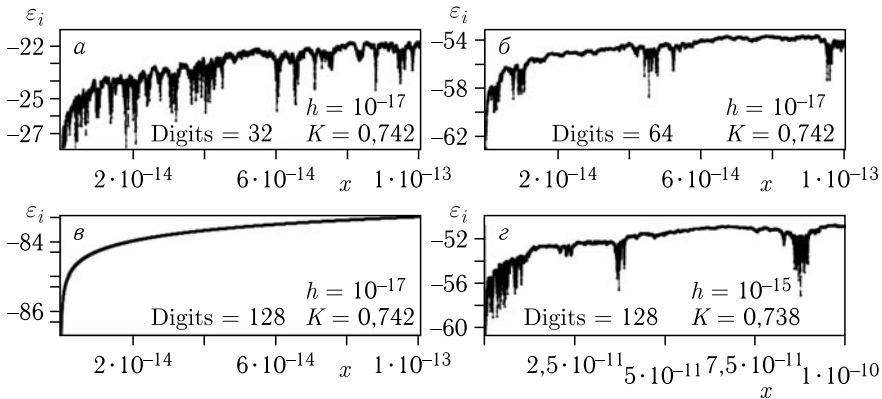


Рис. 8. Погрешности для $y' = 1000y$ при $h = 10^{-17}$, $K = 0,742$ (а-в) и $h = 10^{-15}$, $K = 0,738$ (з)

На рис. 8, з ошибка $\delta = 6,138 \cdot 10^{-52}$ получена на 100 000 шагах при решении жесткой для $0 \leq x \leq 1$ задачи $y' = -\lambda(y - \sin x) + \cos x$, $y_0 = y(0)$ [11, с. 334], $\lambda = 1000$ с шагом $h = 10^{-15}$ и $K = 0,738$. При $h = 10^{-10}$ и $\lambda = 10^4$ $\delta = 6,611 \cdot 10^{-36}$.

Для проверки метода МБЭ–ПК использовался тест для жесткой задачи [4]

$$y'(x) = f(x, y), \quad y_0 = 0, \quad (10)$$

где $f(x, y) = -\lambda \cos x \frac{(y^2 - a^2)^2}{(y^2 + a^2)}$, $\lambda, a = \text{const}$, с известным точным решением

$$y(x) = - \frac{2a^2 \left[\frac{y_0}{y_0^2 - a^2} + \lambda \sin x \right]}{1 + \sqrt{1 + 4a^2 \left[\frac{y_0}{y_0^2 - a^2} + \lambda \sin x \right]^2}}.$$

Точное решение представляет собой функцию с пограничными слоями $1/\lambda$, на которых значения производной очень большие. Чем больше λ , тем больше жесткость задачи [4].

На рис. 9 представлено решение задачи (10) методом МБЭ–ПК (Digits = 128).

На рис. 10 приведены графики 100 000 значений y_i , погрешностей ε_i и производных y'_i , рассчитанных с Digits = 128 для $\lambda = 10^{15}$. Результаты интегрирования тестовой задачи [4] с $h = 5 \cdot 10^{-17}$ при $K = 0,7385$ показаны на рис. 10, а. Погрешности и производная представлены в двойном логарифмическом масштабе (рис. 10, б, в).

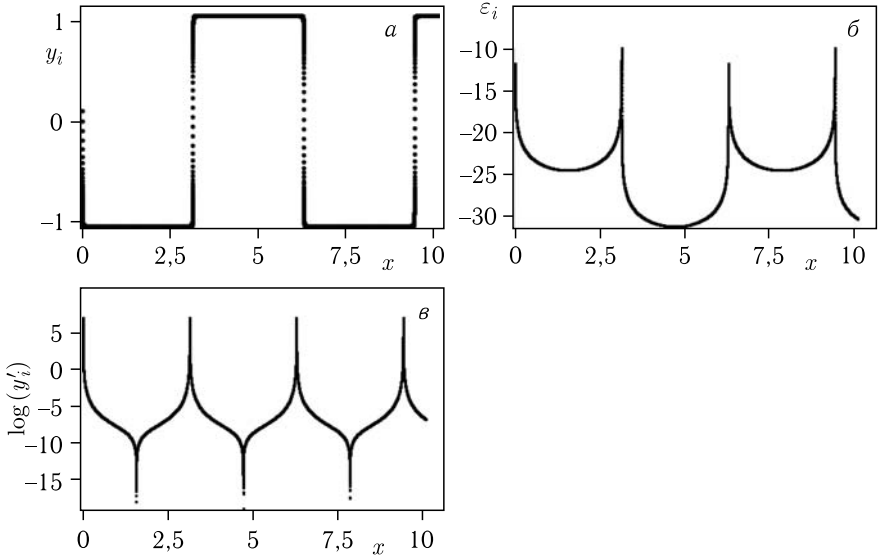


Рис. 9. Результаты тестирования МБЭ-ПК при $\lambda = 10^3$, $h = 9 \cdot 10^{-5}$, $K = 0,740$

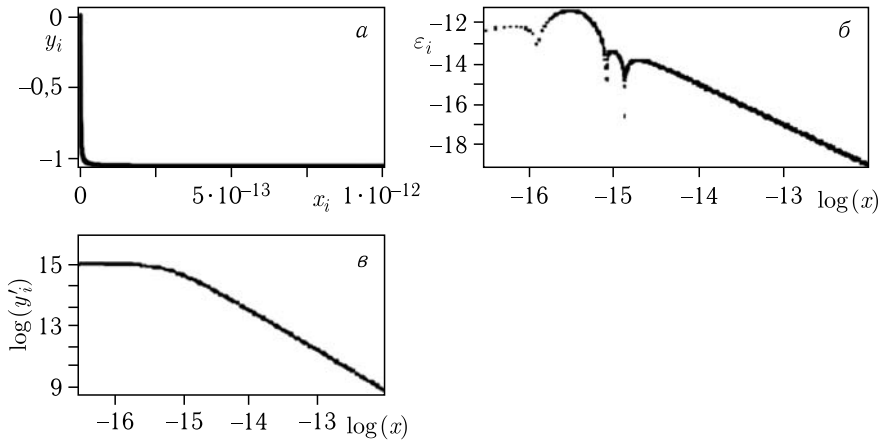


Рис. 10. Результаты тестирования МБЭ-ПК при $\lambda = 10^{15}$, $h = 5 \cdot 10^{-17}$, $K = 0,7385$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен принципиально новый подход к численному решению начальной задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений с использованием метода базисных элементов. На основе двух связанных между собой МБЭ-многочленов пятой степени разработан метод, устойчивый при вычислениях с предельно малым шагом. Значение

y_{i+1} вычисляется по явной схеме типа «предиктор–корректор», условно названной «схемой обнаружения цели». В одном цикле интегрирования алгоритм МБЭ–ПК использует информацию в четырех последовательных узлах глобальной равномерной сетки и в одном вспомогательном узле для прогноза значения функции на шаг вперед. Погрешность метода зависит от длины шага h глобальной сетки и длины меньшего шага $\hat{h} = Kh$, $0 < K < 1$, локальной неравномерной трехточечной сетки. Коэффициенты МБЭ-многочлена пятой степени вычисляются явно по значениям аппроксимируемой функции, по ее первым производным в узлах трехточечных сеток и по длине шагов h и \hat{h} . Сравнение метода МБЭ–ПК с популярными классическими методами показывает, что по точности он не уступает методам Рунге–Кутты четвертого порядка, Адамса–Башфорта и Фельберга пятого порядка. Устойчивость МБЭ-многочленов к вычислениям с чрезмерно малым шагом $h = 10^{-17}$, 10^{-15} подтверждается испытанием метода — тестом для жесткой задачи и решениями других нетривиальных задач.

Дальнейшее развитие метода включает разработку алгоритма автоматического выбора шага и поиск надежного критерия для определения числа K .

К недостаткам метода можно отнести вычисление стартовых точек, необходимость подбора числа K и количество операций на одном шаге интегрирования, хотя оно может быть намного меньшим, чем число операций, используемых при вычислении правой части уравнения.

Автор выражает глубокую благодарность Яну Буша за внимательное прочтение работы, ее плодотворное обсуждение и полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990. 512 с.
Hyrer E., Norsett S., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 1987.
2. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.
3. Atkinson K., Han W., Stewart D. Numerical Solution of Ordinary Differential Equations. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2009.
4. Жолковский Е. К., Белов А. А., Калиткин Н. Н. Решение жестких задач Коши явными схемами с геометрически адаптивным выбором шага. Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша. 2018. № 227. 20 с.
5. Дикусар Н. Д. Метод базисных элементов // Мат. моделирование. 2010. Т. 22, № 12. С. 115–136;
Dikusar N. D. The Basic Element Method // Math. Models Comp. Simulations. 2011. V. 3, No. 4. P. 492–507.
6. Дикусар Н. Д. Полиномиальный прогноз на трехточечных сетках. Препринт ОИЯИ Р5-2020-1. Дубна, 2020.
7. Чебышев П. Л. Избранные труды. М.: АН СССР, 1955.

8. *Дикусар Н. Д.* Кусочно-полиномиальная аппроксимация шестого порядка с автоматическим обнаружением узлов // *Мат. моделирование*. 2014. Т. 26, № 3. С. 31–48;
Dikusar N. D. Piecewise Polynomial Approximation of the Sixth Order with Automatic Knots Detection // *Math. Models Comp. Simulations*. 2014. V. 6, No. 5. P. 509–522.
9. *Дикусар Н. Д.* Полиномиальная аппроксимация высоких порядков // *Мат. моделирование*. 2015. Т. 27, № 9. С. 89–109;
Dikusar N. D. Higher Order Polynomial Approximation // *Math. Models Comp. Simulations*. 2016. V. 8, No. 2. P. 183–200.
10. *Дикусар Н. Д.* Оптимизация решения в задачах кусочно-полиномиальной аппроксимации // *Супервычисления и математическое моделирование*. Тр. XVI Международной конф. / Ред. Р. М. Шагалиев. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИ-ЭФ», 2017. С. 113–122.
11. *Каханер Д., Моулер К., Нэш С.* Численные методы и программное обеспечение. М.: Мир, 1998. 575 с.

Получено 11 ноября 2021 г.

Редактор *А. И. Кудрявцева*

Подписано в печать 22.02.2022.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 1,0. Уч.-изд. л. 1,15. Тираж 220 экз. Заказ № 60368.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/