

В. П. БУБНОВ, А. С. ЕРЕМИН, Н. А. КОВРИЖНЫХ, И. В. ОЛЕМСКОЙ СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРЕИМУЩЕСТВ СТРУКТУРНЫХ МЕТОДОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Бубнов В. П., Еремин А. С., Коврижных Н. А., Олемской И. В. Сравнительное исследование преимуществ структурных методов численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

Аннотация. Рассматриваются вопросы, связанные с тестированием эффективности практической реализации методов решения начальной задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений. Анализируется алгоритм, заложенный в программную реализацию метода Дорманда — Принса (процедуры `ode45` — наиболее популярной из входящих в стандартный набор методов MATLAB). Представлены разработанные авторами так называемые структурные методы решения систем уравнений специального вида, которые на одном шаге требуют меньше вычислений, чем метод Дорманда — Принса, используемый в `ode45`. Структурные методы реализованы на базе того же алгоритмического и программного ядра, что лежит в основе `ode45` с целью обеспечения максимально объективного сравнения эффективности работы каждого из рассматриваемых методов. На ряде примеров демонстрируется превосходство полученных процедур над `ode45` по соотношению глобальной погрешности и вычислительных затрат.

Ключевые слова: численные методы, обыкновенные дифференциальные уравнения, вложенные методы, MATLAB, структурные методы, `ode45`.

1. Введение. Разработка новых численных методов в таких достаточно изученных областях, как обыкновенные дифференциальные уравнения, требует сравнения с известными и давно применяемыми методами. Во многих системах научных вычислений, таких как MATLAB, MapleSoft Maple и др., реализованы хорошо зарекомендовавшие себя процедуры. Однако в большинстве случаев они рассчитаны на наиболее общий вид решаемых систем уравнений. В то же время хорошо известно, что использование различных конструктивных подходов позволяет получать методы, обладающие лучшими свойствами по сравнению с ранее построенными «классическими» вариантами. И даже в такой глубоко изученной области, как явные методы типа Рунге — Кутты, ежегодно появляются новые работы. Разрабатываются методы, обладающие специальными геометрическими свойствами [1], имеющие расширенные области устойчивости [2], сохраняющие сильную устойчивость при решении уравнений в частных производных [3] и специально рассчитанные на решение конкретных задач [4]. Наряду с этим совершенствуются и методы общего назначения [5], изучаются способы оценки погрешности и управления длиной шага интегрирования [6, 7].

Для построения этого многообразия методов используются различные подходы. Одним из таких подходов к разработке методов ре-

шения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) является разделение системы на две или более частей и применение к ним разных расчетных схем. Изначально эта техника была применена к жестким задачам, которые можно было разделить на «жесткую» и «нежесткую» компоненты [8]. В настоящее время развивается использование многосхемных методов для разделяемых систем с целью обеспечения симплектичности [9, 10], решения систем уравнений в частных производных [11], лучшей обработки быстрых и медленных процессов в больших системах [12, 13].

Авторы применяют технику разделения систем ОДУ для построения явных схем типа Рунге — Кутты, требующих меньше вычислений, чем «классические» [14, 15]. Этот выигрыш обеспечивается за счет использования структуры системы (см. раздел 3). При этом речь не идет о каких-то особенных правых частях, характерных для специальных задач, а лишь о структуре зависимостей правых частей системы ОДУ вида $y' = f(x, y(x))$, где y и f — векторы одинаковой размерности от искомым функций. Заметим, что в очень многих задачах можно выделить такие структурные особенности. В монографии [16] приводится изложение теории их построения, тонкостей применения и варианты сконструированных методов.

Для демонстрации практической выгоды от использования таких расчетных схем было решено провести их реализацию в среде MATLAB. Успешная практическая реализация численных методов типа Рунге — Кутты решения ОДУ требует построения надежной процедуры управления длиной шага интегрирования, от которой зависит эффективность решения на интервале, покрывающем множество шагов. Поэтому сравнение двух численных методов, представляющих собой расчетные схемы для совершения одного шага по независимой переменной, следует проводить на базе одной и той же управляющей программы. Процедуры MATLAB реализованы с достаточно надежными управляющими алгоритмами, что и обеспечивает их успешность. Поскольку коды математических процедур MATLAB являются открытыми, мы реализуем другие методы, обладающие преимуществом над «классическими» методами Рунге — Кутты при совершении одного шага на основе тех же управляющих программ.

2. Алгоритм решения ОДУ в MATLAB. Наиболее часто используемой процедурой решения ОДУ в MATLAB является `ode45`. Как говорится в официальной документации к MATLAB: «*В большинстве случаев следует сначала попытаться решить ОДУ с помощью `ode45`*» [17]. Процедура `ode45` является реализацией широко известного метода, предложенного Дормандом и Принсом [18]. Это одношаго-

вый метод Рунге — Кутты, имеющий пятый порядок и использующий для управления длиной шага интегрирования оценку контрольного члена разложения решения в ряд через метод четвертого порядка, «вложенный» в основной. Для начальной задачи:

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

находится два приближения:

$$\begin{aligned} y(x_0 + h) &\approx y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i k_i, \\ \bar{y}(x_0 + h) &\approx y_0 + h \sum_{i=1}^{\bar{s}} \bar{b}_i k_i, \end{aligned} \quad (2)$$

где значения k_i одинаковы для обоих приближений (поэтому и говорят, что один метод «вложен» в другой):

$$k_i = f \left(x_0 + c_i h, y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j \right), \quad i = 1, \dots, \max(s, \bar{s}).$$

Вместе два приближения требуют семь вычислений правой части дифференциального уравнения, однако последний этап текущего шага используется в качестве первого этапа на следующем шаге, так как свобода в выборе коэффициентов дает возможность выполнить равенство $a_{\max(s, \bar{s}), i} = b_i$, $i = 1, \dots, s$. Таким образом, метод на каждом шаге, кроме самого первого, использует лишь шесть новых этапов. Такая технология получила название «Первый как последний» (First Same as Last, FSAL). Конкретные коэффициенты a_{ij} , b_i , \bar{b}_i и c_i метода, используемого в ode45, можно найти в [18]. Мы будем обозначать его в сравнении с другими методами как DP5(4)7F, имя в виду фамилии Дорманда и Принса (DP), порядок метода (5), порядок оценщика в скобках (4), число этапов (7) и использование FSAL (F).

Алгоритм управления длиной шага на основе оценки контрольного члена погрешности (в дальнейшем будем называть его «погрешностью») заключается в ode45 в следующем. Производится сравнение нормы относительной «погрешности» err с заданным допуском tol . В случае превышения допуска полученное приближение к решению не принимается и задача еще раз решается из той же точки с меньшим

шагом; иначе — приближение к решению принимается и процедура переходит к новому шагу. В обоих случаях длина нового шага выбирается по формуле:

$$h_{new} = h \min \left(5, \max \left(0.1, 0.8 \left(\frac{err}{tol} \right)^{\frac{1}{5}} \right) \right), \quad (3)$$

то есть уменьшается, если $err > tol$, и наоборот. При этом не допускается слишком сильное увеличение (не больше чем в пять раз) и уменьшение (не больше чем в десять). Обоснование этого есть, например, в [19]. Степень $1/5$ связана с тем, что оценка «погрешности» производится методом четвертого порядка и результирующая величина err пропорциональная пятой степени длины шага. Соответственно, при другом порядке оценщика она будет другой.

Стоит отметить, что алгоритм управления шагом дополнен специальной обработкой ситуации, когда часть из компонентов решения должна быть неотрицательной. Однако мы не станем рассматривать эту особенность в рамках настоящей статьи.

3. Структурные методы. В [20] представлены специальные методы типа Рунге — Кутты решения разделяющихся систем ОДУ вида:

$$\begin{cases} y_1'(x) = f_1(x, y_2(x)), \\ y_2'(x) = f_2(x, y_1(x)), \end{cases} \quad (4)$$

причем $y_1, f_1 \in \mathbb{R}^n$ и $y_2, f_2 \in \mathbb{R}^m$, то есть они могут быть векторами произвольной размерности. Такие системы возникают, например, в задачах небесной механики, физики высоких энергий [20], поиска оптимального стабилизирующего управления [21]. Построенные методы являются естественным обобщением методов Нюстрёма [19] для уравнений второго порядка без зависимости правой части от первой производной решения:

$$y''(x) = f(x, y(x)), \quad (5)$$

которое в виде системы первого порядка представляется как:

$$\begin{cases} y_1'(x) = y_2(x), \\ y_2'(x) = f_2(x, y_1(x)). \end{cases} \quad (6)$$

С использованием того же подхода, что позволил Э. Нюстрёму построить для системы (6) методы, требующие меньше вычислений функции f , чем классические методы Рунге — Кутты, в [16] конструируются методы, обладающие тем же преимуществом, но пригодные для решения систем вида (4). Мы называем их *структурными*, так как они алгоритмически используют особую структуру системы (4) для получения преимущества над классическими методами.

Следует отметить, что в MATLAB нет встроенной реализации методов Рунге — Кутты — Нюстрёма, являющихся прямыми методами решения систем уравнений второго порядка (5). Однако представленные здесь структурные методы более общие, и любая из известных схем Рунге — Кутты — Нюстрёма может быть получена из некоторого структурного метода для системы (4) путем применения его к (6) и записи прямой схемы решения (5). Поэтому отдельно методы Нюстрёма мы не рассматриваем, несмотря на то, что часть выбранных нами тестовых задач допускает их использование.

Применение структурного метода на одном шаге с начальными условиями $y_1(x_0) = y_{10}$, $y_2(x_0) = y_{20}$ и шагом h совершается по формулам:

$$\begin{aligned} y_1(x_0 + h) &\approx y_{10} + h \sum_{i=1}^{s_1} b_{1i} k_{1i}, \\ y_2(x_0 + h) &\approx y_{20} + h \sum_{i=1}^{s_2} b_{2i} k_{2i}, \\ \bar{y}_1(x_0 + h) &\approx y_{10} + h \sum_{i=1}^{s_1} \bar{b}_{1i} k_{1i}, \\ \bar{y}_2(x_0 + h) &\approx y_{20} + h \sum_{i=1}^{s_2} \bar{b}_{2i} k_{2i}, \end{aligned} \quad (7)$$

где пары функций k_{1i} , k_{2i} вычисляются в строгом порядке возрастания i как:

$$\begin{aligned}
 k_{1i} &= f \left(x_0 + c_{1i}h, y_{20} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{1ij}k_{2j} \right), \quad i = 1, \dots, s_1, \\
 k_{2i} &= f \left(x_0 + c_{2i}h, y_{10} + \sum_{j=1}^i a_{2ij}k_{1j} \right), \quad i = 1, \dots, s_2,
 \end{aligned}
 \tag{8}$$

и s_1 равно либо s_2 , либо $s_2 + 1$. В последнем случае k_{1s_1} находится последним. Идея заключается в том, что для двух частей системы уравнения применяются разные (но взаимосвязанные) вычислительные схемы. Вложенные оценщики погрешности применяются аналогично (2), но в формулах мы для простоты считаем s_1 и s_2 общим числом этапов в применяемой паре методов.

Коэффициенты a , b , \bar{b} и c представленной схемы находятся так же, как и для классических методов Рунге — Кутты [19], исходя из системы алгебраических уравнений, обеспечивающей требуемый порядок метода, то есть совпадение рядов Тейлора для точного решения и численного приближения в точке x_0 до определенного порядка h^p . Входящие в эту систему уравнения называются условиями порядка. Количество условий порядка в случае структурного метода для системы (4) вдвое больше, чем для классического метода (1), (2) [16]. Нахождение точного решения (или одного из решений) такой системы, как правило, включает в себя применение упрощающих условий, выявление общих закономерностей во входящих в нее уравнениях, и для порядков от пятого является достаточно трудоемкой задачей.

Еще раз подчеркнем, что в рассматриваемой нами системе (4) не накладывается никаких ограничений на вид правой части, кроме зависимости от искомым функций. Поэтому методы вида (7), (8) не являются разработанными для узких классов моделей со специальными правыми частями, а могут применяться достаточно широко.

4. Методы для сравнения. Для сравнения с методом DP5(4)7F мы выбрали два структурных метода. Первый из них, преобразованный метод из [22], — метод пятого порядка с оценщиком третьего порядка, дающий приближение к решению после одного шага за пять вычислений каждой из компонент вектора правых частей (4), причём пять этапов (используемые только для оценки погрешности) используются в качестве первых на следующем шаге. Таким образом, на один шаг получаем эффективно только четыре

этапа. В силу особенностей именно этого метода k_{21} на новом шаге совпадает с k_{25} на предыдущем только тогда, когда длина шага не меняется. Поскольку подстройка такого поведения изменила бы управляющий алгоритм решения, мы отказались от использования предыдущего k_{25} на новом шаге. Таким образом, метод требует четыре вычисления правой части по первой компоненте и пять по второй на шаг. Обозначим его RKS5(3)5F, где RKS означает *структурный метод Рунге — Кутты*.

Система условий порядка для RKS5(3)5F состоит из 51 уравнения с 44 неизвестными. Ее решение получается с помощью применения техники упрощающих предположений [19], которая специально модифицирована на случай структурных методов.

Построенный в [22] метод является более общим, чем RKS5(3)5F, а последний получается его редуцированием на системы вида (4). Поэтому для удобства приведем параметры RKS5(3)5F в таблице 1 в традиционной форме (так называемой таблице Бутчера) с поправкой на наличие двух связанных схем и их оценщиков:

$$\begin{array}{c|c} c_1 & A_1 \\ \hline & b_1 \\ \hline & \bar{b}_1 \end{array}, \quad \begin{array}{c|c} c_2 & A_2 \\ \hline & b_2 \\ \hline & \bar{b}_2 \end{array}.$$

Здесь $c_1 = (c_{11}, \dots, c_{1s_1})^T$, $A_1 = \{a_{1ij}\}_{i=1, s_1}^{j=1, s_1}$, $b_1 = (b_{11}, \dots, b_{1s_1})$, $\bar{b}_1 = (\bar{b}_{11}, \dots, \bar{b}_{1s_1})$, $c_2 = (c_{21}, \dots, c_{2s_2})^T$, $A_2 = \{a_{2ij}\}_{i=1, s_2}^{j=1, s_2}$, $b_2 = (b_{21}, \dots, b_{2s_2})$, $\bar{b}_2 = (\bar{b}_{21}, \dots, \bar{b}_{2s_2})$. При этом элементы матриц A_1 и A_2 , которые по построению равны нулю, исходя из явности конструируемых методов (a_{1ij} при $j \geq i$ и a_{2ij} при $j > i$) опущены.

Следует отметить, что в [16] кроме RKS5(3)5F также представлен метод пятого порядка с оценщиком четвертого и тем же числом этапов. Однако в силу своих конструктивных особенностей при его применении к системам, имеющим вид (6), оценка погрешности становится невозможна, а некоторые из выбранных нами для тестирования задач имеют именно такой вид (см. раздел 4).

Второй метод — вложенная пара расчетных схем шестого и четвертого порядка RKS6(4)7F. Метод опубликован в [23]. Его пара-

метры для полноты изложения приводятся в таблице 2. Этот метод обладает теми же характеристиками трудозатрат, что и DP5(4)7F: семь этапов по всем компонентам решения и использование FSAL по каждой из них. Однако его важное отличие от DP5(4)7F в том, что основной метод обеспечивает приближение шестого порядка, что, как ожидается, позволит при схожем поведении алгоритма управления шагом и близких длинах шагов при одинаковых требованиях на локальную погрешность получать большую глобальную точность. Конструирование RKS6(4)7F потребовало решения системы из 101 уравнения с 76 неизвестными. После применения упрощающих предположений решение такой системы может быть получено аналитически с шестью свободными параметрами.

Кроме того, для дополнительного исследования эффективности метода RKS6(4)7F мы взяли еще одну вложенную пару методов шестого порядка с оценщиком пятого [24] и реализовали их с тем же управляющим алгоритмом. Они требуют 9 этапов, но также реализуют технологию FSAL, что делает их в наших тестах восьмиэтапными. Мы обозначаем их в тестах как CMR6(5)9F.

5. Тестовые примеры. Для теста были выбраны четыре задачи. Три из них входят в известный набор Detest set [25], четвертая — с известным аналитическим решением — сконструирована специально для демонстрации работы структурных методов.

Пример 1. C5 из [25] — это задача пяти тел, моделирующая движение пяти внешних планет Солнечной системы, находящихся в постоянном гравитационном поле Солнца под действием сил взаимного притяжения.

Каждая из трех координат y_{1j} , y_{2j} и y_{3j} каждого из пяти тел удовлетворяет уравнению ($j = 1, \dots, 5$) (рисунок 1):

$$y_{ij}'' = k_2 \left(- (m_0 + m_j) \frac{y_{ij}}{r_j^3} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^5 m_k \left[\frac{y_{ik} - y_{ij}}{d_{jk}^3} - \frac{y_{ik}}{r_k^3} \right] \right), \quad (9)$$

где

$$r_j^2 = \sum_{i=1}^3 y_{ij}^2 \quad \text{и} \quad d_{kj}^2 = \sum_{i=1}^3 (y_{ik} - y_{ij})^2, \quad k, j = 1, \dots, 5.$$

Таблица 1. Параметры метода RKS5(3)5F

c_{1i}	a_{1ij}								
0									
$\frac{4}{15} - \frac{\sqrt{6}}{15}$	$\frac{4}{15} - \frac{\sqrt{6}}{15}$								
$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{6}}{8}$	$\frac{9}{32} - \frac{9\sqrt{6}}{128}$	$\frac{7}{32} - \frac{7\sqrt{6}}{128}$							
$\frac{7}{10} + \frac{\sqrt{6}}{20}$	$\frac{4977}{9400} - \frac{4419\sqrt{6}}{18800}$	$\frac{2213}{9400} + \frac{9809\sqrt{6}}{112800}$	$-\frac{61}{940} + \frac{4469\sqrt{6}}{22560}$						
1	0	$\frac{4}{9} - \frac{\sqrt{6}}{36}$	$\frac{4}{9} + \frac{\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$					
b_{1i}	$\frac{82}{285} + \frac{77\sqrt{6}}{1140}$	$-\frac{297}{1377} - \frac{351\sqrt{6}}{764}$	$\frac{2432}{2415} + \frac{64\sqrt{6}}{250401}$	$\frac{51676\sqrt{6}}{250401} - \frac{18184}{250401}$			0		
\bar{b}_{1i}	$\frac{1}{3}$	$-\frac{2103}{1337} - \frac{117\sqrt{6}}{1337}$	$\frac{296}{483} + \frac{316\sqrt{6}}{483}$	$\frac{5682}{4393} - \frac{7469\sqrt{6}}{13179}$			$\frac{1}{3}$		
c_{2i}	a_{2ij}								
$\frac{2}{15} - \frac{\sqrt{6}}{30}$	$\frac{2}{15} - \frac{\sqrt{6}}{30}$								
$\frac{2}{5} - \frac{\sqrt{6}}{10}$	$\frac{1}{10} - \frac{\sqrt{6}}{40}$	$\frac{3}{10} - \frac{3\sqrt{6}}{10}$							
$\frac{2}{5} + \frac{\sqrt{6}}{10}$	$\frac{1337}{1250} - \frac{1947\sqrt{6}}{5000}$	$-\frac{4551}{1750} - \frac{1083\sqrt{6}}{1000}$	$\frac{8448}{4375} + \frac{496\sqrt{6}}{625}$						
1	$-\frac{103}{38} - \frac{83\sqrt{6}}{76}$	$\frac{2901}{382} + \frac{11721\sqrt{6}}{5348}$	$-\frac{72}{23} - \frac{272\sqrt{6}}{161}$	$-\frac{62874}{83467} + \frac{49236\sqrt{6}}{83467}$					
$\frac{17}{15} - \frac{\sqrt{6}}{30}$	$\frac{82}{285} + \frac{77\sqrt{6}}{1140}$	$-\frac{297}{1377} - \frac{351\sqrt{6}}{764}$	$\frac{2432}{2415} + \frac{64\sqrt{6}}{250401}$	$\frac{51676\sqrt{6}}{250401} - \frac{18184}{250401}$	$\frac{2}{15} - \frac{\sqrt{6}}{30}$				
b_{2i}	0	$\frac{4}{9} - \frac{\sqrt{6}}{36}$	$\frac{4}{9} + \frac{\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$			0		
\bar{b}_{2i}	$\frac{1}{46} - \frac{\sqrt{6}}{23}$	$\frac{55}{138} + \frac{5\sqrt{6}}{138}$	$\frac{55}{138} + \frac{5\sqrt{6}}{138}$	$\frac{14}{69} - \frac{5\sqrt{6}}{69}$	$\frac{\sqrt{6}}{23} - \frac{1}{46}$				

Таблица 2. Параметры метода РКS6(4)7F

c_{li}	a_{lij}									
0										
1	1									
10	10									
1	1	3								
5	20	20								
7	3787	18375	25137							
16	16384	32768	32768							
677	75661258001	1876243893	159015217581	132486575859						
1130	815236805000	13043788880	326094722000	815236805000						
51	7359721413	5303126523	290275578153	242563241439	365681475					
56	289103449600	26647773320	842170918400	1518421596160	2011154432					
1	941	0	13851	8019	4302592	491				
	13800		42280	26800	17451825	8400				
b_{li}	85565	0	3135875	1982464	4606087948250	3519520256	0			
	1450134		10231386	30895767	13193789408019	15909379569				
\bar{b}_{li}	5291627	0	19442425	32215040	387922858450	0	784			
	52915674		95681454	361616493	830159992167	0	5583			

Таблица 2 (продолжение). Параметры метода RK56(4)7F

c_{2i}	a_{2ij}											
0	0											
$\frac{2}{15}$	$\frac{2}{45}$	$\frac{4}{45}$										
$\frac{2}{9}$	$\frac{209}{1296}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{241}{1296}$									
$\frac{5}{9}$	$\frac{49625}{199584}$	$\frac{95}{176}$	$\frac{11665}{180576}$	$\frac{23680}{118503}$								
$\frac{23}{28}$	$\frac{10435142297}{23302838272}$	$\frac{318573}{351232}$	$\frac{46277003099}{42135898112}$	$\frac{572527523}{933091026}$	$\frac{109118472393775}{137093718470016}$							
1	$\frac{276853621}{542488224}$	$\frac{13851}{7856}$	$\frac{4409622831}{2435689952}$	$\frac{1576614784}{722372457}$	$\frac{189008540982800}{196307593919313}$	$\frac{879880064000}{2603835122793}$						
1	$\frac{85565}{1450134}$	0	$\frac{3135875}{10231386}$	$\frac{1982464}{30895767}$	$\frac{4606087948250}{13193789408019}$	$\frac{3519520256}{15909379569}$						
b_{2i}	$\frac{941}{13800}$	0	$\frac{13851}{42280}$	$\frac{8019}{26800}$	$\frac{4302592}{17451825}$	$\frac{491}{8400}$	0					
\bar{b}_{2i}	$\frac{1}{12}$	0	$\frac{171}{604}$	$\frac{99}{268}$	$\frac{5488}{30351}$	0	$\frac{1}{12}$					

Получаем систему с тридцатью неизвестными функциями. Начальные данные для положений и скоростей всех планет и нормированные физические величины (массы планет и солнца и гравитационная постоянная k_2) приведены в [25].

Решение проводится на интервале $[0, 20]$. В качестве «эталонного» решения для определения глобальной погрешности берется расчет процедурой ode45 при максимальных настройках относительной локальной точности.

Пример 2. D1 из [25] — это задача плоского движения тела по эллиптической орбите в центральном поле тяготения:

$$\begin{aligned} x'' &= -\frac{x}{(x^2 + y^2)^3}, x(0) = 1 - \varepsilon, x'(0) = 0, \\ y'' &= -\frac{y}{(x^2 + y^2)^3}, y(0) = 0, y'(0) = \sqrt{\frac{1 + \varepsilon}{1 - \varepsilon}}, \end{aligned} \quad (10)$$

с решением:

$$\begin{aligned} x &= \cos u - \varepsilon, x' = -\frac{\sin u}{1 - \varepsilon \cos u}, u - \varepsilon \sin u - t = 0, \\ y &= \sqrt{1 - \varepsilon^2} \sin u, y' = \frac{\sqrt{1 - \varepsilon^2} \cos u}{1 - \varepsilon \cos u}. \end{aligned}$$

Эксцентриситет орбиты ε влияет на «жесткость» задачи. Все рассматриваемые нами методы явные и потому цели применения их к действительно жестким задачам не стоит, но для проверки того, как ведут себя алгоритмы при приближении задачи к жесткой, мы взяли два значения $\varepsilon = 0.3$ и $\varepsilon = 0.7$. Интегрирование так же проводим на отрезке $[0, 20]$.

Пример 3. E3 из [25] — уравнение, описывающее осциллятор Дуффинга:

$$y'' + y - \frac{y^3}{6} = 2 \sin(2.78535x), y(0) = y'(0) = 0. \quad (11)$$

Здесь, как и в примере 1, в качестве «эталонного» решения для определения глобальной погрешности берем решение с помощью ode45 при максимальных настройках относительной локальной точности. Отрезок интегрирования — $[0, 20]$.

Пример 4. Задача, в которой первая и вторая группы представления (4) содержат по два уравнения:

$$\begin{cases} y_1' = -x \ln y_3 \exp(y_4 - 1), \\ y_2' = -2x \left(y_4 + \sqrt{\ln(y_3)} \right), \\ y_3' = 4xy_1^2 \ln(y_1 + 1) \exp(2 - 2y_2), \\ y_4' = 2x(y_2 - \ln(y_1) - 1). \end{cases} \quad (12)$$

Ее точное решение для начальных условий:

$$y_1(0) = y_2(0) = y_3(0) = y_4(0) = 1$$

есть:

$$y_1 = e^{\cos x^2 - 1}, \quad y_2 = \cos x^2 - \sin x^2, \quad y_3 = e^{2\sin x^2}, \quad y_4 = \cos x^2.$$

Мы решаем эту задачу на отрезке $[0, 5]$.

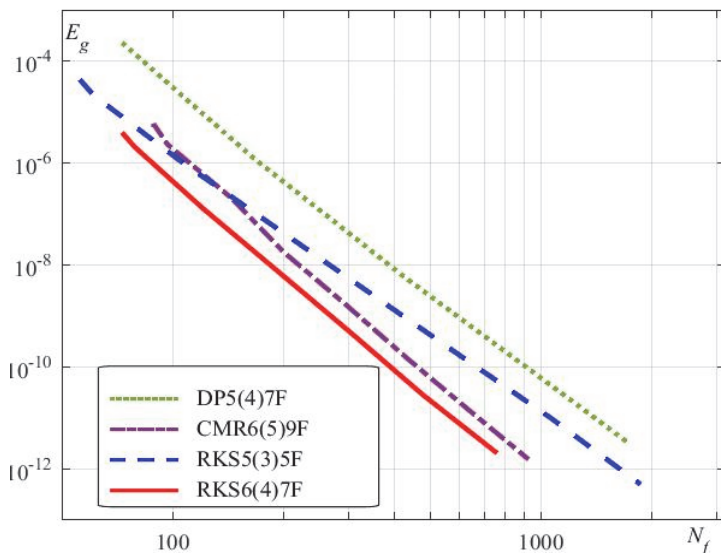


Рис. 1. Результаты теста для задачи (9)

6. Результаты сравнения. Критерием эффективности применения методов служило соотношение между количеством вычислений правой части системы ОДУ N_f и достигаемой абсолютной глобальной погрешностью решения E_g . В силу того, что применялись методы разных порядков при одних и тех же требованиях на локальную погрешность, они решали с порой сильно различающимися длинами шагов. Однако в силу разной стоимости одного шага общие затраты могли быть ниже даже при большем числе шагов. При этом в N_f учитываются и вычисления на отброшенных шагах, на которых погрешность была выше допустимого значения.

Мы приводим графики в двойной логарифмической шкале. Чем ниже и левее на графике изображена кривая, тем эффективнее метод, то есть тем ниже глобальная погрешность при том же количестве вычислений.

На рисунке 1 приводятся графики поведения методов при решении примера 1. Как видно, в данном случае структурные методы существенно выигрывают у «классических» методов тех же порядков, несмотря на то, что оценка погрешности ведется с помощью методов других порядков. Метод же RKS6(4)7F при тех же затратах на шаг, что и DP5(4)7F, требует примерно вдвое меньше вычислений для обеспечения той же глобальной точности.

Задача из примера 2 показывает худшее поведение метода RKS5(3)5F, чем у DP5(4)7F. Причиной может быть то, что в силу своих конструктивных особенностей структурные методы более чувствительны к неточности в оценке погрешности и к жесткости задачи. Не стоит забывать, что в обоих структурных методах, используемых нами, оценщики погрешности имеют порядок на 2 меньший, чем основные методы (то есть оценка ведется меньшим порядком по сравнению с конкурентами того же порядка), что влияет на алгоритм управления шагом. Тем не менее при малой жесткости (эксцентриситет орбиты 0.3, рисунок 2) RKS6(5)7F оказывается примерно на треть экономичнее CMR6(5)9F. При большей жесткости $\varepsilon = 0.7$ (рисунок 3) поведение обоих методов шестого порядка в целом совпадает, но кривая для RKS6(5)7F раньше начинает менять наклон, что связано с вычислительной погрешностью. Дело в том, что структурные методы численно несколько менее устойчивы и обладают более узким интервалом длин шагов, на которых обеспечивается хорошая оценка погрешности. Однако все это сказывается только на достаточно

высоких требованиях на относительную локальную погрешность и не является критичным для успешного применения структурных методов.

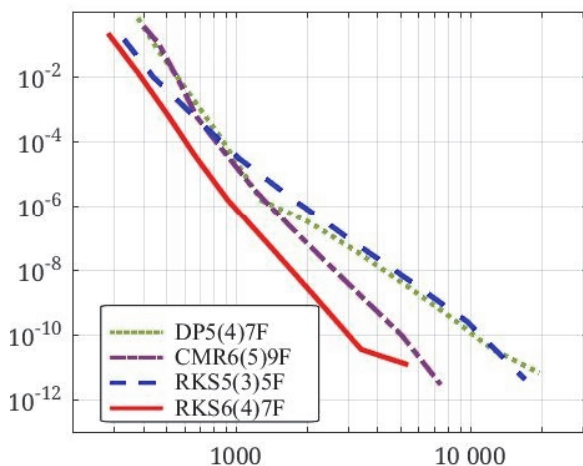


Рис. 2. Результаты теста для системы (10) с $\varepsilon = 0.3$

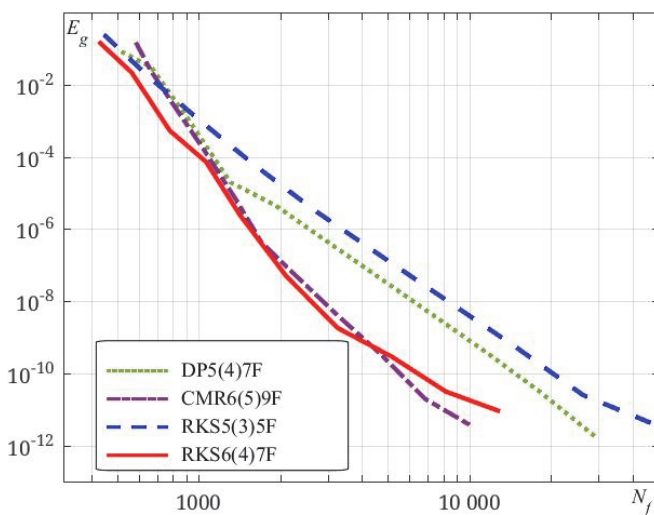


Рис. 3. Результаты теста для системы (10) с $\varepsilon = 0.7$

Примеры 3 и 4 (рисунки 4 и 5) так же показывают, что оба структурных метода не менее, а в большинстве случаев более эффективны, чем их оппоненты тех же порядков.

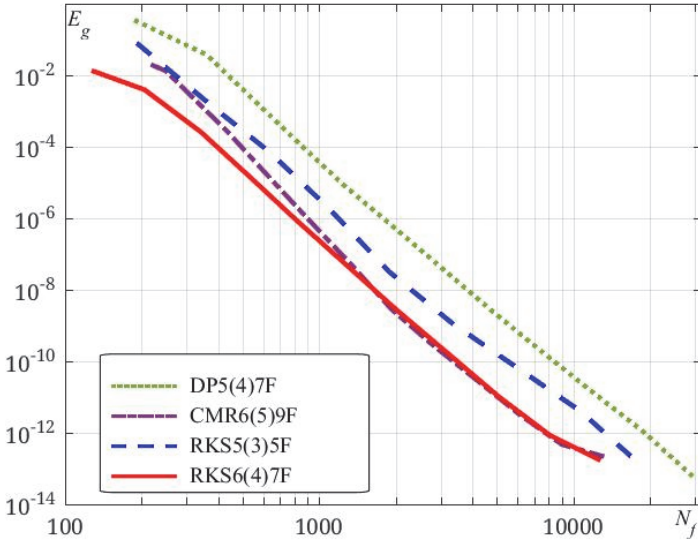


Рис. 4. Результаты теста для уравнения (11)

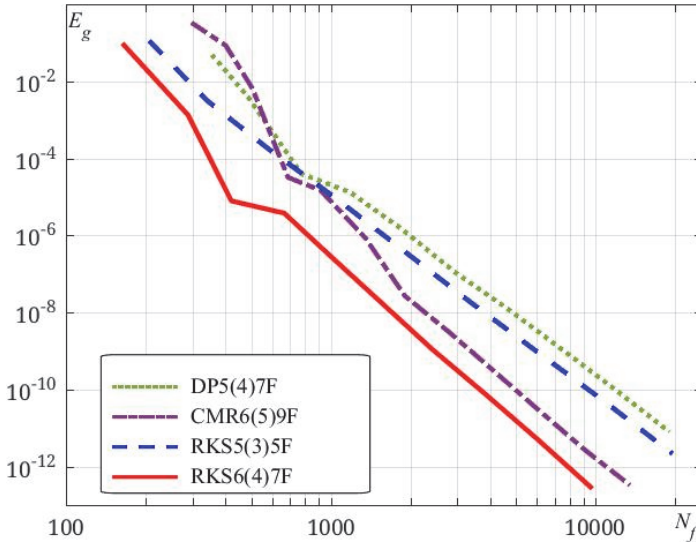


Рис. 5. Результаты теста для системы (12)

7. Заключение. Само собой, классические численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений, применимые к системам наиболее общего вида, удобны именно в силу своей универсальности. Однако для большинства примеров представленное сравнение демонстрирует лучшее соотношение глобальной точности и затрат у предложенных структурных методов. При этом системы, вид которых позволяет использовать структурные методы, достаточно распространены и могут встретиться в любых приложениях, так как используемая особенность структуры не является характеристикой той или иной предметной задачи, а отражает математические свойства системы уравнений.

Конечно, на стадии реализации новых методов и подготовки системы (выбора порядка нумерации уравнений) к применению структурных методов придется затратить больше усилий, чем при использовании входящих в базу MATLAB процедур. Но выигрыш во времени на этапе расчетов может оказаться куда больше. Поэтому окончательное решение о применении новых методов нужно принимать в зависимости от задачи.

Литература

1. *Kalogiratou Z. et al.* Runge–Kutta type methods with special properties for the numerical integration of ordinary differential equations // *Phys. Rep.* 2014. vol. 536. no. 3. pp. 75–146.
2. *Niegemann J., Diehl R., Busch K.* Efficient low-storage Runge–Kutta schemes with optimized stability regions // *J. Comp. Phys.* 2012. vol. 231. no. 2. pp. 364–372.
3. *Hadjimichael Y. et al.* SSP ERKs of Maximal Effective Order // *SIAM J. Numer. Anal.* 2013. vol. 51. no. 4. pp. 2149–2165.
4. *Kosti A.A., Anastassi Z.A., Simos T.E.* An optimized explicit Runge–Kutta–Nyström method for the numerical solution of orbital and related periodical initial value problems // *Comput. Phys. Comm.* 2012. vol. 183. no. 3. pp. 470–479.
5. *Nassif N.R., Makhoul-Karam N., Erhel J.* A globally adaptive explicit numerical method for exploding systems of ordinary differential equations // *Appl. Numer. Math.* 2013. vol. 67. pp. 204–219.
6. *Balac S., Mahé F.* Embedded Runge–Kutta scheme for step-size control in the interaction picture method // *Comput. Phys. Comm.* 2013. vol. 184. no. 4. pp. 1211–1219.
7. *Kulikov G.Yu.* Cheap global error estimation in some Runge–Kutta pairs // *IMA J Numer Anal.* 2013. vol. 33. no. 1. pp. 136–163.
8. *Hofer E.* A partially implicit method for large stiff systems of ODEs with only few equations introducing small time-constants // *SIAM J. Numer. Anal.* 1976. vol. 13. no. 5. pp. 645–663.
9. *McLachlan R.L., Ryland B.N., Sun Y.* High order multisymplectic Runge–Kutta methods // *SIAM J. Sci. Comput.* 2014. vol. 36. no. 5. pp. A2199–A2226.
10. *Wang D., Xiao A., Li X.* Parametric symplectic partitioned Runge–Kutta methods with energy-preserving properties for Hamiltonian systems // *Comput. Phys. Comm.* 2013. vol. 184. no. 2. pp. 303–310.
11. *Ketcheson D.I., MacDonald C.B., Ruuth S.J.* Spatially partitioned embedded Runge–Kutta methods // *SIAM J. Numer. Anal.* 2013. vol. 51. no. 5. pp. 2887–2910.
12. *Sandu A., Günther M.* A generalized-structure approach to additive Runge–Kutta methods // *SIAM J. Numer. Anal.* 2015. vol. 53. no. 1. pp. 17–42.

13. *Günther M., Sandu A.* Multirate generalized additive Runge–Kutta methods // *Numerische Mathematik*. 2016. vol. 133. no. 3. pp. 497–524.
14. *Еремин А. С., Олемской И. В.* Вложенный метод интегрирования систем структурно разделенных обыкновенных дифференциальных уравнений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2010. Т. 50. № 3. С. 434–448.
15. *Olemskoy I.V., Eremin A.S.* An embedded fourth order method for solving structurally partitioned systems of ordinary differential equations // *Appl. Math. Sci.* 2015. vol. 9. no. 97. pp. 4843–4852.
16. *Олемской И. В.* Методы интегрирования систем структурно разделенных дифференциальных уравнений // СПб: СПбГУ. 2009. 179 с.
17. Документация по MATLAB на официальном сайте. Раздел Choose an ODE Solver. URL: <https://www.mathworks.com/help/Matlab/math/choose-an-ode-solver.html> (дата обращения: 14.12.2016).
18. *Dormand J.R., Prince P.J.* A family of embedded Runge–Kutta formulae // *J. Comp. Appl. Math.* 1980. vol. 6. no. 1. pp. 19–26.
19. *Хайпер Э., Нёрсертт С. П., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи // М.: Мир. 1990. Том 1. 512 с.
20. *Овсянников Д. А., Егоров Н. В.* Математическое моделирование систем формирования электронных и ионных пучков // СПб: Изд-во СПбГУ. 1998. 276 с.
21. *Кватко А. Н.* Об одном методе решения граничной задачи для нелинейной управляемой системы в классе дискретных управлений // *Дифференциальные уравнения*. 2008. Т. 44. № 11. С. 1499–1509.
22. *Олемской И. В.* Вложенный пятиэтапный метод пятого порядка типа Дормана–Принса // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2005. Т. 45. № 7. С. 1181–1191.
23. *Olemskoy I.V., Eremin A.S., Kovrizhnykh N.A.* Embedded methods of order six for special systems of ordinary differential equations // *Appl. Math. Sci.* 2017. vol. 11. no. 1. pp. 31–38.
24. *Calvo M., Montijano J.I., Rande L.* A new embedded pair of Runge–Kutta formulas of orders 5 and 6 // *Comput. & Math. with Appl.* 1990. vol. 20. no. 1. pp. 15–24.
25. *Hull T.E. et al.* Comparing numerical methods for ordinary differential equations // *SIAM J. Numer. Anal.* 1972. vol. 9. no. 4. pp. 603–637.

Бубнов Владимир Петрович — д-р техн. наук, доцент, профессор кафедры информационных и вычислительных систем факультета автоматизации и интеллектуальных технологий, Петербургский государственный университет путей сообщения императора Александра I (ПУУПС). Область научных интересов: вероятностные модели аппаратно-программных комплексов, марковские процессы, дифференциальные уравнения. Число научных публикаций — 162. bubnov1950@yandex.ru, <http://www.pgups.ru>; Московский пр., 9, Санкт-Петербург, 190031; р.т.: +79052807904, Факс: +7(812)457-8606.

Еремин Алексей Сергеевич — доцент кафедры информационных систем факультета автоматизации и интеллектуальных технологий, Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ). Область научных интересов: численные методы решения дифференциальных уравнений, уравнения с запаздывающим аргументом, вероятностные модели. Число научных публикаций — 23. ereminh@gmail.com, <http://www.spbu.ru>; Университетский пр. 35, Петергоф, Санкт-Петербург, 198504; р.т.: +7(812)428-7159, Факс: +7(812)428-7159.

Коврижных Николай Александрович — аспирант кафедры информационных систем факультета прикладной математики — процессов управления, Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ). Область научных интересов: численные методы решения дифференциальных уравнений, методы оптимизации. Число научных публика-

ций — 2. sagoyewatha@mail.ru, <http://www.spbu.ru>; Университетский пр. 35, Петергоф, Санкт-Петербург, 198504; р.т.: +7(812)428-7159, Факс: +7(812)428-7159.

Олемской Игорь Владимирович — д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры информационных систем факультета прикладной математики — процессов управления, Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ). Область научных интересов: численные методы решения систем обыкновенных уравнений, дискретная математика. Число научных публикаций — 56. i.olemskoj@spbu.ru, <http://www.spbu.ru>; Университетский пр. 35, Петергоф, Санкт-Петербург, 198504; р.т.: +7(812)428-7159, Факс: +7(812)428-7159.

V.P. BUBNOV, A.S. EREMIN, N.A. KOVRIZHNYKH, I.V. OLEMSKOY
**COMPARATIVE STUDY OF THE ADVANTAGES OF
 STRUCTURAL NUMERICAL INTEGRATION METHODS FOR
 ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS**

Bubnov V.P., Eremin A.S., Kovrizhnykh N.A., Olemskoy I.V. Comparative Study of the Advantages of Structural Numerical Integration Methods for Ordinary Differential Equations.

Abstract. Effectiveness of practical implementation of integration methods for ordinary differential equations is studied. The algorithm implemented in program realization of Dormand–Prince method (one of the most popular MATLAB built-in integration procedure «ode45») is analyzed. The structural methods for partitioned systems of ordinary differential equations are presented. They demand fewer computations for a single step than the Dormand–Prince method used in ode45. Structural methods are implemented on the basis of the same algorithmic and programming core as ode45 to provide more objective comparison of the considered methods’ effectiveness. For several test problems better performance (in global error to computational cost ratio) of the considered structural methods than of «classical» Runge–Kutta methods is demonstrated.

Keywords: numerical integration, ordinary differential equations, MATLAB, embedded methods, structural methods, ode45.

Bubnov Vladimir Petrovich — Ph.D., Dr. Sci., associate professor, professor of informatics and computer systems department, Petersburg state transport university. Research interests: probabilistic models of hardware and software complexes, Markovian processes, differential equations. The number of publications — 162. bubnov1950@yandex.ru, <http://www.pgups.ru>; 9, Moskovsky pr., Saint-Petersburg, 190031, Russia; office phone: +79052807904, Fax: +7(812)457-8606.

Eremin Alexey Sergeevich — Ph.D., associate professor of information systems department of the applied mathematics and control processes faculty, Saint-Petersburg State University. Research interests: numerical solution of differential equations, delay differential equations, probabilistic models. The number of publications — 23. ereminh@gmail.com, <http://www.spbu.ru>; 35, Universitetskii prospekt, Peterhof, Saint-Petersburg, 198504, Russia; office phone: +7(812)428-7159, Fax: +7(812)428-7159.

Kovrizhnykh Nikolai Aleksandrovich — Ph.D. student of information systems department of the applied mathematics and control processes faculty, Saint-Petersburg State University. Research interests: numerical solution of differential equations, delay differential equations, methods of optimization. The number of publications — 2. sagoyewatha@mail.ru, <http://www.spbu.ru>; 35, Universitetskii prospekt, Peterhof, Saint-Petersburg, 198504, Russia; office phone: +7(812)428-7159, Fax: +7(812)428-7159.

Olemskoy Igor Vladimirovich — Ph.D., Dr. Sci., professor of information systems department of the applied mathematics and control processes faculty, Saint-Petersburg State University. Research interests: numerical solution of differential equations, discrete mathematics. The number of publications — 56. i.olemskoy@spbu.ru, <http://www.spbu.ru>; 35, Universitetskii prospekt, Peterhof, Saint-Petersburg, 198504, Russia; office phone: +7(812)428-7159, Fax: +7(812)428-7159.

References

1. Kalogiratos Z. et al. Runge–Kutta type methods with special properties for the numerical integration of ordinary differential equations. *Phys. Rep.* 2014. vol. 536. no. 3. pp. 75–146.
2. Niegemann J., Diehl R., Busch K. Efficient low-storage Runge–Kutta schemes with optimized stability regions. *J. Comp. Phys.* 2012. vol. 231. no. 2. pp. 364–372.
3. Hadjimichael Y. et al. SSP ERKs of Maximal Effective Order. *SIAM J. Numer. Anal.* 2013. vol. 51. no. 4. pp. 2149–2165.
4. Kosti A.A., Anastassi Z.A., Simos T.E. An optimized explicit Runge–Kutta–Nyström method for the numerical solution of orbital and related periodical initial value problems. *Comput. Phys. Comm.* 2012. vol. 183. no. 3. pp. 470–479.
5. Nassif N.R., Makhoul-Karam N., Erhel J. A globally adaptive explicit numerical method for exploding systems of ordinary differential equations. *Appl. Numer. Math.* 2013. vol. 67. pp. 204–219.
6. Balac S., Mahé F. Embedded Runge–Kutta scheme for step-size control in the interaction picture method. *Comput. Phys. Comm.* 2013. vol. 184. no. 4, pp. 1211–1219.
7. Kulikov G.Yu. Cheap global error estimation in some Runge–Kutta pairs. *IMA J Numer Anal.* 2013. vol. 33. no. 1. pp. 136–163.
8. Hofer E. A partially implicit method for large stiff systems of ODEs with only few equations introducing small time-constants. *SIAM J. Numer. Anal.* 1976. vol. 13. no. 5. pp. 645–663.
9. McLachlan R.I., Ryland B.N., Sun Y. High order multisymplectic Runge–Kutta methods. *SIAM J. Sci. Comput.* 2014. vol. 36. no. 5. pp. A2199–A2226.
10. Wang D., Xiao A., Li X. Parametric symplectic partitioned Runge–Kutta methods with energy-preserving properties for Hamiltonian systems. *Comput. Phys. Comm.* 2013. vol. 184. no. 2. pp. 303–310.
11. Ketcheson D.I., MacDonald C.B., Ruuth S.J. Spatially partitioned embedded Runge–Kutta methods. *SIAM J. Numer. Anal.* 2013. vol. 51. no. 5. pp. 2887–2910.
12. Sandu A., Günther M. A generalized-structure approach to additive Runge–Kutta methods. *SIAM J. Numer. Anal.* 2015. vol. 53. no. 1. pp. 17–42.
13. Günther M., Sandu A. Multirate generalized additive Runge–Kutta methods. *Numerische Mathematik.* 2016. vol. 133. no. 3. pp. 497–524.
14. Eremin A.S., Olemskoy I.V. [An embedded method for integrating systems of structurally separated ordinary differential equations]. *Zhurnal vychislitel'noj matematiki i matematicheskoy fiziki – Computational Mathematics and Mathematical Physics.* 2005. vol. 50. no. 3. pp. 414–417. (In Russ.).
15. Olemskoy I.V., Eremin A.S. An embedded fourth order method for solving structurally partitioned systems of ordinary differential equations. *Appl. Math. Sci.* 2015. vol. 9. no. 97. pp. 4843–4852.
16. Olemskoy I.V. *Metody integrirvaniya sistem strukturno razdelennykh differentsialnykh uravnenii* [Integration of structurally partitioned systems of differential equation]. SPb: SPbSU. 2009. 179 p. (In Russ.)
17. Dokumentacija po MATLAB na oficial'nom sajte. Razdel Choose an ODE Solver [Official MATLAB website documentation. Choose an ODE Solver]. URL: <https://www.mathworks.com/help/Matlab/math/choose-an-ode-solver.html> (accessed: 14.12.2016).
18. Dormand J.R., Prince P.J. A family of embedded Runge-Kutta formulae. *J. Comp. Appl. Math.* 1980. vol. 6. no. 1. pp. 19–26.
19. Hairer E., Nørsett S. P., Wanner G. Solving ordinary differential equations I. Nonstiff problems. 2.ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2008. 528 p. (Russ. ed.: Hajrer

- Je., Njorsett S. P., Vanner G. *Reshenie obyknovennyh differencial'nyh uravnenij. Nezhjostkie zadachi*. M.: Mir, 1990. Issue 1. 512 p.).
20. Ovsyannikov D.A., Egorov N.V. *Matematicheskoe modelirovanie sistem formirovaniya elektronnykh i ionnykh puchkov* [Mathematical modelling of electron and ion beam-forming systems]. SPb: SPbSU. 1998. 276 p. (In Russ.).
 21. Kvitko A.N. A method for solving boundary value problems for nonlinear control systems in the class of discrete controls. *Differencial'nye uravnenija – Differential Equations*. 2008. vol. 44. no. 11. pp. 1559–1570. (In Russ.).
 22. Olemskoy I.V. [A fifth-order five-stage embedded method of the Dormand–Prince type]. *Zhurnal vychislitel'noj matematiki i matematicheskoy fiziki – Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2005. vol. 45. no. 7. pp. 1140–1150. (In Russ.).
 23. Olemskoy I.V., Eremin A.S., Kovrizhnykh N.A. Embedded methods of order six for special systems of ordinary differential equations. *Appl. Math. Sci.* 2017. vol. 11. no. 1. pp. 31–38.
 24. Calvo M., Montijano J.I., Rande L. A new embedded pair of Runge–Kutta formulas of orders 5 and 6. *Comput. & Math. with Appl.* 1990. vol. 20. no. 1. pp. 15–24.
 25. Hull T.E. et al. Comparing numerical methods for ordinary differential equations. *SIAM J. Numer. Anal.* 1972. vol. 9. no. 4. pp. 603–637.