

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Физический факультет
Кафедра астрономии и космической геодезии

УДК 519.62::521.182

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ В ГАК
Зав. кафедрой астрономии и
космической геодезии ФФ ТГУ
д.ф.-м.н. Авдюшев В.А. _____
« ____ » _____ 2013 г.

Булатова Наталья Владимировна
ЭФФЕКТИВНОСТЬ КОЛЛОКАЦИОННЫХ МЕТОДОВ
РУНГЕ–КУТТЫ НА РАЗБИЕНИЯХ ГАУССА–ЛЕЖАНДРА
В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ НЕБЕСНОЙ МЕХАНИКИ
Квалификационная работа на степень бакалавра

Научный руководитель
д.ф.-м.н.
_____ Авдюшев В.А.

Автор работы
студент 5976 группы
_____ Булатова Н.В.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1 КОЛЛОКАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ	4
1.1 Основные формулы	4
1.2 Порядок точности коллокационного метода	6
1.3 Методы Гаусса	7
1.4 Оценивание локальной точности и алгоритм выбора длины шага	9
2 ПАРАМЕТРЫ И АЛГОРИТМ КОЛЛОКАЦИОННОГО ИНТЕГРАТОРА	11
3 ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ	13
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	20
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	21

ВВЕДЕНИЕ

Почти все важные для современной практики дифференциальные уравнения, описывающие динамические системы, не интегрируются аналитически. Поэтому для их решения прибегают к приближенным методам интегрирования, которые условно делят на аналитические и численные. В последнее время главным образом за счет бурного развития компьютерных технологий все чаще прибегают к численным методам интегрирования. Среди них широко применяются методы Рунге–Кутты, в особенности неявные коллокационные методы на разбиениях Гаусса: Лобатто, Радо или Лежандра.

Целью данной квалификационной работы являлось построение коллокационного интегратора на разбиении Гаусса–Лежандра и исследование его эффективности в численном решении дифференциальных уравнений динамики. Одна из древнейших отраслей астрономии, небесная механика, предоставляет, образно говоря, превосходный полигон для тестирования численных методов интегрирования. Их успешная апробация только на задачах о движении небесных тел — уже залог широкого признания специалистами, чья деятельность непосредственно связана с численными исследованиями динамических систем. Рассматриваемые в работе коллокационные методы тестировались на простой задаче небесной механики с аналитическим решением, а именно на задаче двух тел.

Для достижения поставленной цели предполагалось: 1) освоить теорию неявных коллокационных методов Рунге–Кутты; 2) составить алгоритм коллокационного интегратора и программно реализовать его на алгоритмическом языке Фортран 90 в компьютерной арифметике с двойной точностью; 3) провести ряд экспериментов по исследованию эффективности коллокационного интегратора; 4) выполнить анализ полученных результатов.

1 КОЛЛОКАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ

Пусть требуется решить векторное дифференциальное уравнение (систему дифференциальных уравнений) первого порядка

$$\mathbf{x}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \quad (1.1)$$

при начальном условии

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0,$$

где t — независимая переменная; $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m)^T$ — вектор искомых переменных; $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_m)^T$ — заданная вектор-функция t и \mathbf{x} . Штрих означает полную производную по независимой переменной t . Дифференциальные уравнения (1.1) вместе со своими начальными условиями составляют задачу Коши.

При этом будем полагать, что вектор-функция \mathbf{f} удовлетворяет условию Липшица, т.е. для любых решений \mathbf{x}_1 и \mathbf{x}_2 справедливо неравенство

$$\|\mathbf{f}(t, \mathbf{x}_1) - \mathbf{f}(t, \mathbf{x}_2)\| \leq L\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|, \quad (1.2)$$

где L — так называемая постоянная Липшица.

1.1 Основные формулы

Многие неявные методы Рунге–Кутты, широко используемые для численного интегрирования дифференциальных уравнений (1.1), некоторым образом эквивалентны так называемым коллокационным методам [1]. Основная идея коллокационных методов для решения обыкновенных дифференциальных уравнений состоит в том, чтобы в качестве приближенного решения \mathbf{x} подобрать такой полином \mathbf{g} степени s , который бы удовлетворял условиям задачи Коши (1.1) в $s + 1$ точках:

$$\mathbf{g}(t_0) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{g}'(t_0 + hc_i) = \mathbf{f}(t_0 + hc_i, \mathbf{g}(t_0 + hc_i)) \quad (i = 1, \dots, s), \quad (1.3)$$

где c_i — вещественные числа, выбираемые, как правило, на отрезке $[0, 1]$. В соответствии с (1.3) приближенное решение уравнения на шаге h представляется в виде $\mathbf{x}_1 = \mathbf{g}(t_0 + h)$. Например, для $s = 1$ полином должен иметь вид $\mathbf{g}(t) = \mathbf{x}_0 + (t - t_0)\mathbf{k}$ с линейным коэффициентом

$$\mathbf{k} = \mathbf{g}'(t_0 + c_1h) = \mathbf{f}(t_0 + c_1h, \mathbf{g}(t_0 + c_1h)) = \mathbf{f}(t_0 + c_1h, \mathbf{x}_0 + c_1h\mathbf{k}).$$

Отсюда видно, что явный и неявный методы Эйлера, а также метод средней точки являются коллокационными с коэффициентами $c_1 = 0$, $c_1 = 1$ и $c_1 = 1/2$ соответственно.

Введем обозначение

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{f}(t_0 + hc_i, \mathbf{g}(t_0 + hc_i)). \quad (1.4)$$

Тогда интерполирующая функция Лагранжа для $\mathbf{g}'(t)$ будет

$$\mathbf{g}'(t_0 + h\tau) = \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j l_j(\tau), \quad \text{где} \quad l_j(\tau) = \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^s \frac{\tau - c_m}{c_j - c_m}, \quad (1.5)$$

а $\tau = (t - t_0)/h$. Отсюда, интегрируя (1.5) по τ и пользуясь записью (1.4), будем иметь¹

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= \mathbf{x}_0 + h \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j \int_0^1 l_j(\tau) d\tau = \mathbf{g}(t_0 + h), \quad \mathbf{k}_i = \mathbf{f}(t_0 + hc_i, \mathbf{y}_i), \\ \mathbf{y}_i &= \mathbf{x}_0 + h \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau = \mathbf{g}(t_0 + hc_i) \quad (i = 1, \dots, s). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Нетрудно видеть, что формулы (1.6) совпадают с формулами неявного метода Рунге–Кутты [1], где в качестве коэффициентов a_{ij} и b_i выступают

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau, \quad b_j = \int_0^1 l_j(\tau) d\tau \quad (i, j = 1, \dots, s). \quad (1.7)$$

Методы Рунге–Кутты с коэффициентами (1.7) называются коллокационными.

Далее, поскольку

$$\tau^{q-1} = \sum_{j=1}^s c_j^{q-1} l_j(\tau) \quad (q = 1, \dots, s)$$

(т.е. интерполяция Лагранжа точна для всех полиномов ниже s -го порядка), то коэффициенты (1.7) должны удовлетворять системам линейных уравнений

$$\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{q-1} = \frac{c_i^q}{q}, \quad \sum_{j=1}^s b_j c_j^{q-1} = \frac{1}{q} \quad (i, q = 1, \dots, s). \quad (1.8)$$

¹Здесь можно обнаружить сходство коллокационных методов и квадратурных формул Ньютона–Котеса, применяемых для вычисления определенных интегралов.

При заданных узлах c_i коэффициенты метода a_{ij} и b_j могут быть получены в результате решения систем линейных уравнений (1.8). Однако с практической точки зрения их удобнее вычислять из интегралов (1.7), используя простые рекуррентные формулы [2].

Для каждого коэффициента a_{ij} имеем

$$\begin{aligned}\gamma_{0l} &= c_i^l/l! \quad (l = 1, \dots, s+1), \\ \gamma_{kl} &= ((c_i - c_k)\gamma_{k-1,l} - l\gamma_{k-1,l+1})/(c_j - c_k) \\ &(k = 1, \dots, j-1, j+1, \dots, s; l = 1, \dots, s-k+1),\end{aligned}\tag{1.9}$$

причем $\gamma_{j,l} = \gamma_{j-1,l}$ ($l = 1, \dots, s-j+1$). Тогда $a_{ij} = \gamma_{s1}$. Для b_j используются те же формулы (1.9), но с заменой c_i на единицу.

Отметим, что коллокационные формулы очень удобны для определения приближенных значений \mathbf{k} следующего шага. Обозначая их как $\bar{\mathbf{k}}$, а величину следующего шага \bar{h} , согласно формулам (1.5), получаем экстраполированную оценку

$$\bar{\mathbf{k}}_i = \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j l_j (1 + c_i \bar{h}/h) \quad (i = 1, \dots, s).\tag{1.10}$$

1.2 Порядок точности коллокационного метода

Покажем, что коллокационный метод имеет, по крайней мере, порядок $p = s$ [1]. Согласно (1.4) и (1.5), коллокационный многочлен удовлетворяет уравнению

$$\mathbf{g}'(t_0 + h\tau) = \sum_{i=1}^s \mathbf{f}(t_0 + hc_i, \mathbf{g}(t_0 + hc_i)) l_i(\tau),$$

тогда как точное решение —

$$\mathbf{x}'(t_0 + h\tau) = \sum_{i=1}^s \mathbf{f}(t_0 + hc_i, \mathbf{x}(t_0 + hc_i)) l_i(\tau) + \mathbf{r}(\tau),\tag{1.11}$$

где $\mathbf{r}(\tau)$ — ошибка интерполяционной формулы Лагранжа, которая, как известно, может быть представлена в виде

$$\mathbf{r}(\tau) = h^s \frac{\mathbf{x}^{(s+1)}(t_0 + h\zeta)}{s!} \prod_{i=1}^s (\tau - c_i) = O(h^s), \quad \zeta = \zeta(\tau) \in [0, 1].$$

Интегрируя уравнения и вычитая их решения, будем иметь

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t_0 + h\tau) - \mathbf{g}(t_0 + h\tau) &= h \sum_{i=1}^s [\mathbf{f}(t_0 + hc_i, \mathbf{x}(t_0 + hc_i)) - \\ &\quad - \mathbf{f}(t_0 + hc_i, \mathbf{g}(t_0 + hc_i))] \int_0^\tau l_i(\xi) d\xi + O(h^{s+1}). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Введем величину

$$B = \max_{\tau \in [0,1]} \sum_{i=1}^s \left| \int_0^\tau l_i(\xi) d\xi \right|.$$

Тогда, используя условие Липшица (1.2), для величины

$$M = \max_{\tau \in [0,1]} \|\mathbf{x}(t_0 + h\tau) - \mathbf{g}(t_0 + h\tau)\|$$

получаем оценку

$$M \leq hLB M + O(h^{s+1}) \quad \text{или} \quad M \leq O(h^{s+1}).$$

Она фактически говорит о том, что для любого $\tau \in [0, 1]$

$$\mathbf{x}(t_0 + h\tau) - \mathbf{g}(t_0 + h\tau) = O(h^{s+1}) \quad (1.13)$$

и, в частности, $\mathbf{x}(t_0 + h) - \mathbf{x}_1 = O(h^{s+1})$. Итак, произвольное разбиение c_i дает коллокационный метод порядка $p = s$.

1.3 Методы Гаусса

Как было показано, в общем случае метод (1.6) имеет порядок $p = s$. Однако если коэффициенты b_j и c_j удовлетворяют первым $2s$ уравнениям во второй системе (1.8) ($q = 1, \dots, 2s$) (т.е. если они являются соответственно весами и узлами квадратурной формулы Гаусса), то коллокационный метод будет иметь порядок $p = 2s$ [3]. Покажем это [6].

Несмотря на то что коллокационный многочлен \mathbf{g} приближенно представляет точное решение \mathbf{x} , он является точным решением некоторого возмущенного уравнения

$$\mathbf{g}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{g}) + \mathbf{p}(t).$$

Согласно (1.13), после линеаризации систему уравнений для возмущений можно представить в виде

$$\mathbf{g}' - \mathbf{x}' = \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)} (\mathbf{g} - \mathbf{x}) + \mathbf{p}(t) + O(h^{2s+2}).$$

Рассматривая ее как систему неоднородных линейных уравнений, применим для ее решения метод вариации произвольных постоянных:

$$\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}(t_0 + h) = h \int_0^1 \Phi(t_0 + h) \Phi^{-1}(t_0 + h\tau) (\mathbf{p}(t_0 + h\tau) + O(h^{2s+2})) d\tau,$$

где $\Phi(t)$ — фундаментальная матрица системы однородных линейных уравнений. Квадратурная формула Гаусса для вычисления интеграла от функции

$$\Phi(t_0 + h) \Phi^{-1}(t_0 + h\tau) \mathbf{p}(t_0 + h\tau)$$

дает нулевой результат, поскольку в точках коллокации $t_0 + hc_i$ возмущения $\mathbf{p}(t)$ равны нулю. Следовательно, интеграл можно рассматривать как ошибку квадратурной формулы, которая в данном случае представляет собой величину $O(h^{2s})$. Таким образом, $\mathbf{x}(t_0 + h) - \mathbf{x}_1 = O(h^{2s+1})$.

Известно, что узловые значения квадратурной формулы Гаусса на отрезке $[0, 1]$ являются корнями смещенного полинома Лежандра, иначе говоря, они являются решениями уравнения

$$\frac{d^s}{d\tau^s} [\tau^s (\tau - 1)^s] = 0. \quad (1.14)$$

Поэтому для получения коллокационного метода порядка $p = 2s$ на практике удобно сначала вычислять c_i из уравнения (1.14), а затем — a_{ij} и b_i из формул (1.9).

Разбиение шага узловыми значениями c_i , удовлетворяющими уравнению (1.14), называется разбиением Гаусса–Лежандра. Если зафиксировать начальное узловое значение ($c_1 = 0$), либо конечное ($c_s = 1$), либо и то и другое ($c_1 = 0$ и $c_s = 1$), то получим другие известные разбиения Гаусса: левое и правое разбиения Радо и разбиение Лобатто, узловые значения которых соответственно удовлетворяют уравнениям

$$\frac{d^{s-1}}{d\tau^{s-1}} [\tau^s (\tau - 1)^{s-1}] = 0, \quad \frac{d^{s-1}}{d\tau^{s-1}} [\tau^{s-1} (\tau - 1)^s] = 0,$$

$$\frac{d^{s-2}}{d\tau^{s-2}}[\tau^{s-1}(\tau-1)^{s-1}] = 0.$$

Однако любой коллокационный метод, построенный на одном из этих разбиений, будет иметь порядок ниже $2s$: узловые значения Радо дают метод порядка $p = 2s - 1$, а узловые значения Лобатто — $p = 2s - 2$. Методы, основанные на рассмотренных разбиениях, называют еще методами Гаусса.

1.4 Оценивание локальной точности и алгоритм выбора длины шага

Управление длиной шага интегрирования в коллокационном методе выполняется так же, как и в методе Эверхарта [4].

Пусть $\|\mathbf{e}\|_{tol}$ — заданная точность. Потребуем, чтобы на каждом следующем шаге в каноническом полиномиальном представлении численного решения сохранялась величина старшего члена, равная $\|\mathbf{e}\|_{tol}$, [4]

$$\frac{h}{s}\|\mathbf{a}_s\| (= \|\mathbf{e}\|_{cal}) = \|\mathbf{e}\|_{tol}. \quad (1.15)$$

Тогда длина следующего шага \bar{h} оценивается по формуле, часто используемой в методах Рунге–Кутты:

$$\bar{h} = hr = h \left(\frac{\|\mathbf{e}\|_{tol}}{\|\mathbf{e}\|_{cal}} \right)^{1/s} = h \left(\frac{s \|\mathbf{e}\|_{tol}}{\bar{h} \|\mathbf{a}_s\|} \right)^{1/s}, \quad (1.16)$$

где разделенная разность $\|\mathbf{a}_s\|$ определяется по формуле

$$\mathbf{a}_s = \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^s \frac{1}{c_j - c_m}. \quad (1.17)$$

Очевидно, при разбиениях Гаусса недостаток такой оценки состоит в том, что шаг по ней выбирается фактически как для решения порядка $s - 1$, поэтому, вообще говоря, она не обеспечивает сохранение требуемой локальной точности.

Во избежание слишком больших (и малых) локальных ошибок, на r следует наложить ограничение

$$r^s < \sigma. \quad (1.18)$$

Для того чтобы сохраняемая величина $h\|\mathbf{a}_s\|/s$ на следующем шаге была ограничена в пределах одного порядка, значение σ должно быть равно $\sqrt{10}$. Это следует из того факта, что [4]

$$h\|\mathbf{a}_s\| \sim r^s.$$

Выполнение обоих неравенств проверяется лишь в начале интегрирования при выборе стартового шага: если (1.18) не выполняется, то интегрирование повторяется с новым шагом $\bar{h} = hr$ и так далее, пока не выполнится условие (1.18). Обычно для получения стартового шага требуется не более 4 итераций. В дальнейшем для ограничения r проверяется только правое неравенство: если неравенство не выполняется, то r принимает значение правого предела.

Начальное приближение стартового шага получается из оценки, подобной (1.16), для $s = 2$ [5]:

$$\bar{h} = \sqrt{\frac{2h\|\mathbf{e}\|_{tol}}{\|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1\|}}, \quad \mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t_0, \mathbf{x}_0), \quad \mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(t_0 + h, \mathbf{x}_0 + h\mathbf{k}_1), \quad (1.19)$$

где h — малая величина. Если h настолько мала, что в компьютерной арифметике $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$, она увеличивается в 10 раз, и оценка повторяется снова.

2 ПАРАМЕТРЫ И АЛГОРИТМ КОЛЛОКАЦИОННОГО ИНТЕГРАТОРА

Коллокационный интегратор был написан на алгоритмическом языке Фортран 90 для компьютерной арифметики с двойной точностью. Заголовков процедуры интегратора имеет вид

$$\text{RKC}(X, TS, TF, H, ETOL, NE, NS, NI, NST, NF, FUN).$$

Опишем входные и выходные параметры интегратора, помечая их соответственно индексами I и O : X_O^I — интегрируемые переменные; TS^I и TF^I — начальное и конечное значения независимой переменной соответственно; H_O^I — величина стартового шага интегрирования; $ETOL^I$ — значение $\|\mathbf{e}\|_{tol}$ для выбора переменного шага; NE^I — число уравнений; NS^I — число коллокаций, при этом $p = 2NS$; NI^I — число итераций на шаге; NST_O — число выполненных шагов; NF_O — число обращений к процедуре правых частей; FUN^I — название процедуры правых частей \mathbf{f} .

Программно одношаговый неявный коллокационный метод Рунге-Кутты реализуется по типичной для таких методов алгоритмической схеме.

1. Задаются интегрируемые переменные X ; начальный TS и конечный TF моменты времени; величина стартового шага интегрирования $STEP$; локальная точность $\|\mathbf{e}\|_{tol}$ для выбора переменного шага; число уравнений NE ; число коллокаций (узлов разбиения Лежандра) NS , при этом порядок интегрирования будет $p = 2NS$; число итераций на шаге NI для решения системы нелинейных уравнений (1.6) относительно \mathbf{y}_i .
2. Инициализируются требуемые для интегрирования коэффициенты: a_{ij} и b_j (1.7); узловые значения c_i ; предельное значение $\sqrt[s]{\sigma}$ для множителя r (1.18); знак шага в зависимости от направления интегрирования; вводится логическая переменная со значением ложно: $LS = .FALSE.$, которая выступает в качестве признака конечного шага интегрирования.
3. Если интегрирование выполняется в режиме переменного шага, то выбирается длина стартового шага интегрирования в соответствии

с задаваемой локальной точностью ERR для метода второго порядка ($NS = 1$) по формуле (1.19).

4. Последовательно из системы соотношений (1.6) определяются коллокационные решения \mathbf{y}_i на шаге, с первого по последнее ($i = 1, \dots, NS$), и соответствующие им правые части дифференциальных уравнений \mathbf{k}_i . Этап 4 выполняется NIT раз, причем на первом шаге $NITO$ раз ($NITO > NIT$). Параметр $NITO$ задается внутри интегратора.
5. Оценивается локальная точность на шаге $\|\mathbf{e}\|_{cal}$ по формуле (1.15).
6. Определяется множитель r для следующего шага интегрирования (1.16). Если $\|\mathbf{e}\|_{cal} = 0$ или неравенство (1.18) не выполняется, то r принимает значение $\sqrt[s]{\sigma}$.
7. Формируется решение \mathbf{x}_1 на конце шага интегрирования (1.6); задается следующее значение переменной t и длина шага h .
8. Если имеет место признак последнего шага: $LS = .TRUE.$, вычислительный процесс заканчивается.
9. Если конечный момент TF интервала интегрирования оказывается внутри следующего шага, иначе говоря, выполняется неравенство $(t + h - TF)(TF - t) \geq 0$, то задаем признак конечного шага $LS = .TRUE.$. Затем выбираем длину шага так, чтобы на последнем шаге точно выйти на конечный момент интервала интегрирования, т.е. $h = TF - t$.
10. Экстраполируем значения правых частей следующего шага по формуле (1.10) для определения начальных приближений итерационного процесса на этапе 4.
11. Возвращаемся к этапу 4.

3 ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Чтобы исследовать эффективность коллокационного интегратора в решении задач небесной механики, мы провели ряд экспериментов. Интегратор тестировался применительно к дифференциальным уравнениям первого порядка безразмерной плоской задачи двух тел, описывающей эллиптическую орбиту (одного тела относительно другого центрального) с эксцентриситетом e ; единичной большой полуосью $a = 1$; и аргументом перицентра $\omega = 0$:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \dot{\mathbf{x}}, \quad \frac{d\dot{\mathbf{x}}}{dt} = -\frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|^3}$$

с начальными условиями

$$x_1 = 1 - e, \quad x_2 = 0, \quad \dot{x}_1 = 0, \quad \dot{x}_2 = \sqrt{(1+e)/(1-e)}.$$

В качестве показателей эффективности рассматривались точность и быстродействие. Точность интегрирования $|\Delta\mathbf{x}|$ оценивалась путем сравнения получаемых численных результатов с аналитическим решением задачи двух тел, тогда как быстродействие — по количеству обращений NF к процедуре правых частей уравнений FUN.

Поскольку коллокационные значения правых частей \mathbf{k}_i находятся из решения системы (1.6) итерационным способом, необходимо было выяснить, какое число итераций является оптимальным с точки зрения отношения точность–быстродействие. Мы получили характеристики эффективности для интегратора восьмого порядка ($NS = s = 4$) с NIT = 2–6 применительно к моделированию круговой орбиты ($e = 0$) на десяти оборотах (см. рис. 3.1). Характеристики строились по результатам интегрирования при разных значениях $ETOL = \|\mathbf{e}\|_{tol}$. Таким образом, они показывают зависимость качества результатов, количественно выражаемого точностью интегрирования, от трудоемкости вычислительного процесса.

Из рис. 3.1 видно, что достаточно высокая эффективность метода имеет место при 4–6 итераций. Тем не менее, для дальнейших вычислений в качестве оптимального мы приняли NIT = 5, несмотря на то, что при NIT = 6 эффективность коллокационного метода чуть выше.

Заметим сразу, что любой характеристике эффективности точность–быстродействие свойственно наличие «колена». Оно главным образом обусловлено влиянием ошибок округления, когда методическая точность

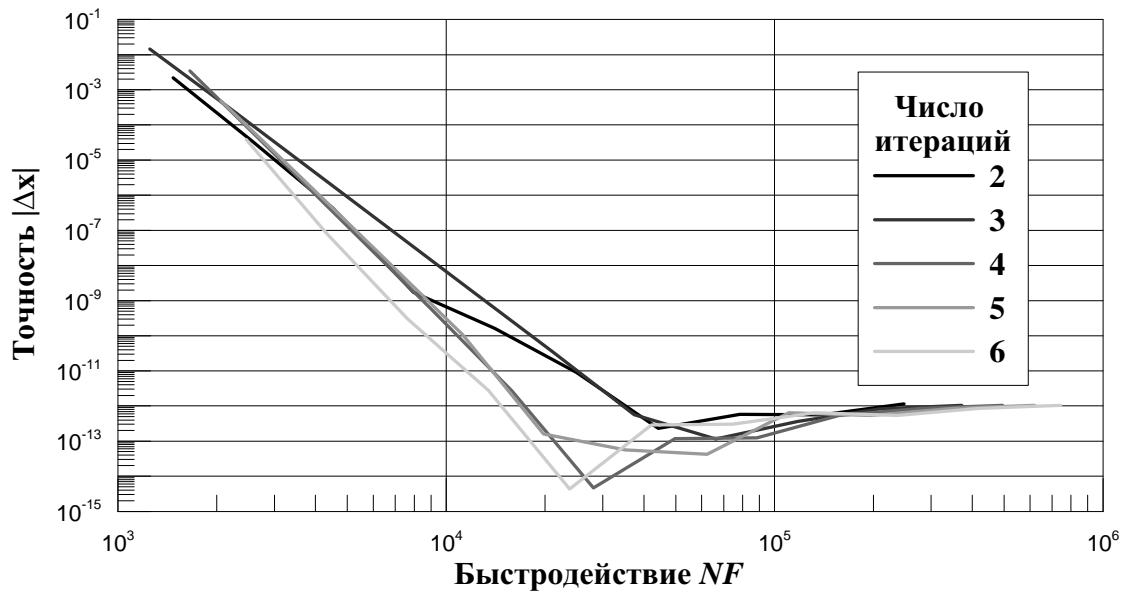


Рисунок 3.1 — Характеристики точность–быстродействие для метода порядка $p = 8$ ($s = 4$) в зависимости от числа итераций в численном решении системы уравнений (1.6) ($e = 0$; $\Delta t = 10$ оборотов)

при малых h и соответственно больших NF становится выше вычислительной, и тогда результирующая точность интегрирования определяется именно вычислительными ошибками, которые интенсивно накапливаются с увеличением объемов вычисления. Поэтому с возрастанием NF до «колена» точность сначала повышается, тогда как после падает. Если бы вычислительные ошибки отсутствовали, то характеристики в логарифмических шкалах представляли собой прямые, что отвечает зависимости $|\Delta \mathbf{x}| \propto h^p \propto NF^{-p}$.

На рис. 3.2 показана зависимость эффективности коллокационного метода от его порядка $p = 2s = 2NS$. Из рисунка видно, что эффективность, как и ожидалось, повышается с увеличением порядка метода. При одинаковом объеме вычислений высокий порядок обеспечивает значительно лучшую точность, нежели низкий порядок или, что то же самое, одинаковая точность методом высокого порядка достигается существенно, а именно в разы, быстрее, нежели методом низкого порядка.

Эффективность предлагаемого коллокационного интегратора сравнивалась с эффективностью интегратора Гаусса–Эверхарта [4], который также является коллокационным [5] и широко используется в небесной механике для численного интегрирования орбит. Тестирование выполня-

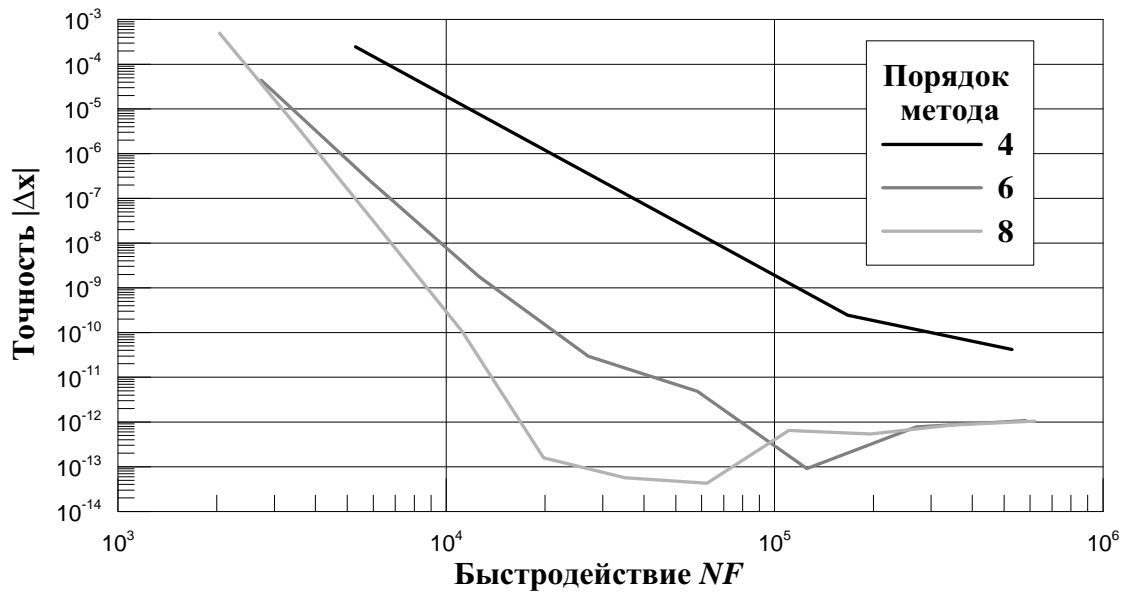


Рисунок 3.2 — Характеристики точность–быстродействие в зависимости от порядка метода ($e = 0$; $\Delta t = 10$ оборотов)

лось на примере сильноэллиптической задачи, где орбита также интегрировалась на десяти оборотах интеграторами 8-го порядка ($p = 8$). При этом в интеграторе использовалось разбиение Лежандра ($s = 4$), тогда как в интеграторе Гаусса–Эверхарта — разбиение Лобатто ($s = 5$). Характеристики точность–быстродействие для интеграторов приведены на рис. 3.3.

Характеристики показывают, что коллокационный интегратор при двух итерациях ($NIT = 2$) заметно менее эффективен, нежели интегратор Гаусса–Эверхарта. На первый взгляд, это может показаться странным, ведь первый имеет меньше число этапов s , нежели второй, причем при одном и том же порядке. Поэтому, казалось бы, коллокационный метод должен работать быстрее. Однако парадокс объясняется очень просто: все дело в экстраполяции. Начальные приближения для итерационного процесса в обоих интеграторах определяются на основе интерполяции правых частей уравнений (1.5) текущего шага с последующей их экстраполяцией (1.10) на новый шаг. Однако точность интерполяции на разбиении с пятью узлами выше, нежели с четырьмя, поэтому соответственно начальные приближения для итерационного процесса в интеграторе Гаусса–Эверхарта определяются лучше и, следовательно, итерационный процесс сходится быстрее. Это объяснение подтверждают другие

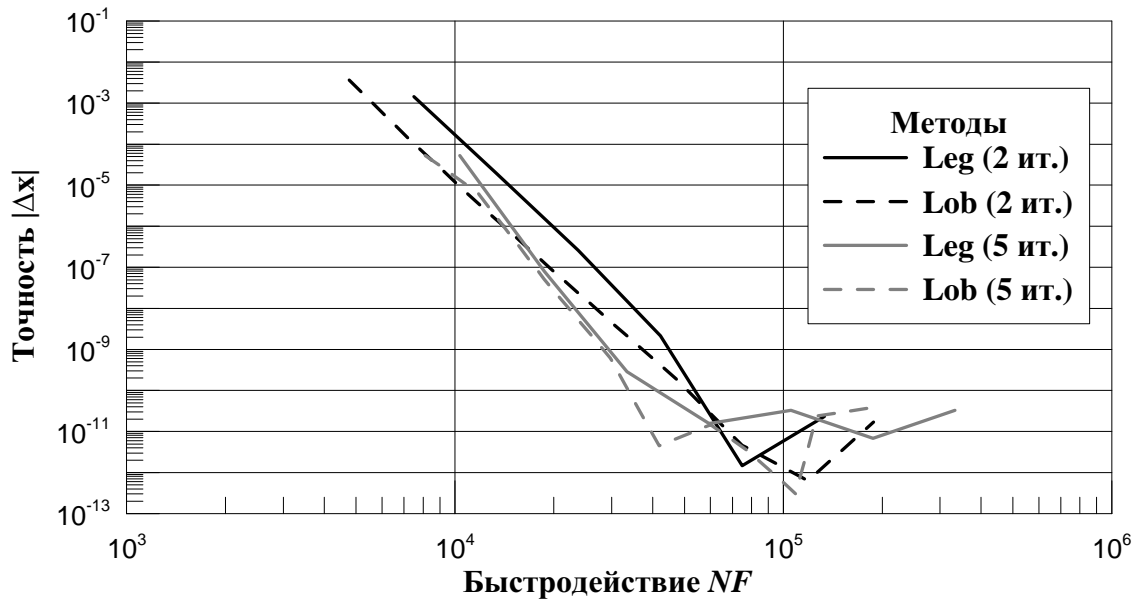


Рисунок 3.3 — Характеристики точность–быстродействие для коллокационного интегратора на разбиении Лежандра (**Leg**) и интегратора Гаусса–Эверхарта на разбиении Лобатто (**Lob**) ($e = 0.9$; $\Delta t = 10$ оборотов)

характеристики, полученные при пяти итерациях ($MIT = 5$). Они почти совпадают. Для интегратора Гаусса–Эверхарта пять итераций избыточны, и поведение характеристики определяется непосредственно ошибками метода интегрирования, а не ошибками итерационно уточняемых приближений для правых частей уравнений. В то же время коллокационному интегратору эти пять итераций как раз необходимы, с тем чтобы его эффективность стала сопоставимой с эффективностью интегратора Гаусса–Эверхарта.

Далее мы исследовали вопрос: насколько значительно экстраполяция, используемая для получения начальных приближений в итерационном решении системы (1.6), повышает эффективность численного интегрирования? Представленные на рис. 3.4 характеристики точность–быстродействие фактически говорят о том, что экстраполяция (**fx**) является важным этапом в численном интегрировании. Если отказаться от экстраполяции и на следующем шаге в качестве начальных приближений принимать полученные на текущем шаге коллокационные значения правых частей уравнения (**f**), то это может понизить быстродействие вычислительного процесса в 2–4 раза. Если же в численном итерационном

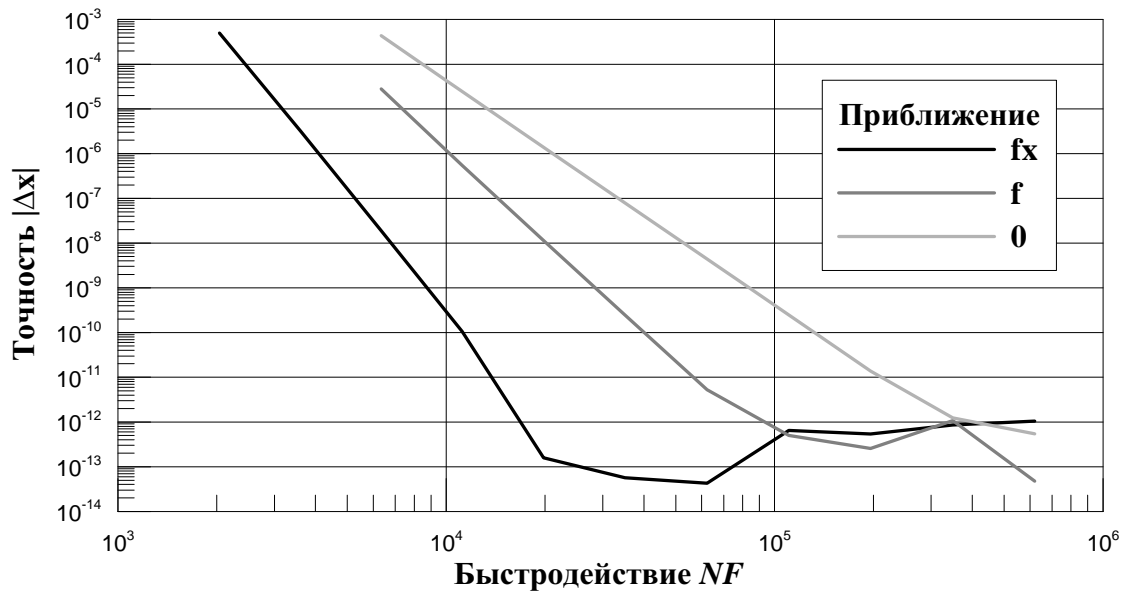


Рисунок 3.4 — Эффективность численного интегрирования в зависимости от точности начальных приближений в итерационном решении системы (1.6) ($e = 0$; $\Delta t = 10$ оборотов)

решении системы (1.6) вообще стартовать от нулевых начальных приближении (0), как на первом шаге, то быстродействие упадет почти на порядок.

Примечательно, что коллокационные методы на разбиениях Лежандра являются геометрическими [6]: симметричными и симплектическими. Между тем геометрические свойства методов интегрирования улучшают поведение глобальной методической ошибки, что весьма полезно при численном моделировании на длительных временных интервалах. Если для обычных методов ошибка ведет себя со временем квадратично, то для геометрических — линейно, т.е. медленнее.

Впрочем, геометрические свойства нелинейных коллокационных методов на разбиениях Лежандра будут иметь место только в том случае, если коллокационные значения правых частей уравнений удовлетворяют соотношениям (1.6), иными словами, если приближения \mathbf{k}_i , полученные итерационно, достаточно точные. В противном случае геометрические свойства нарушаются. Кроме того, чтобы улучшить поведение ошибки, интегрирование необходимо выполнять с постоянным шагом [6].

На рис. 3.5, 3.6 и 3.7 показано поведение глобальной ошибки для коллокационных методов (на разбиениях Лежандра) четвертого, шестого и

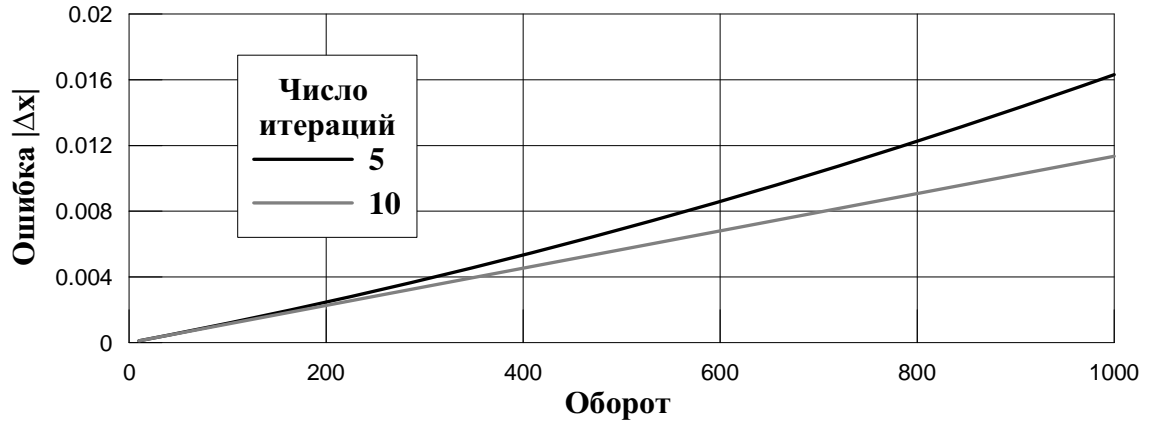


Рисунок 3.5 — Поведение методической ошибки со временем для метода 4-го порядка с величиной шага $h = 2\pi/64$

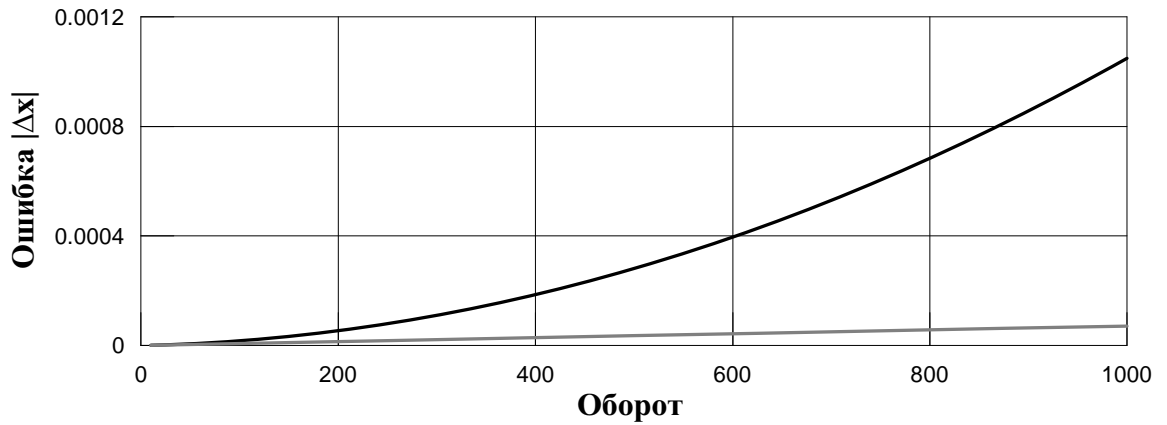


Рисунок 3.6 — То же, что и на рис. 3.5, но для метода 6-го порядка с величиной шага $h = 2\pi/32$

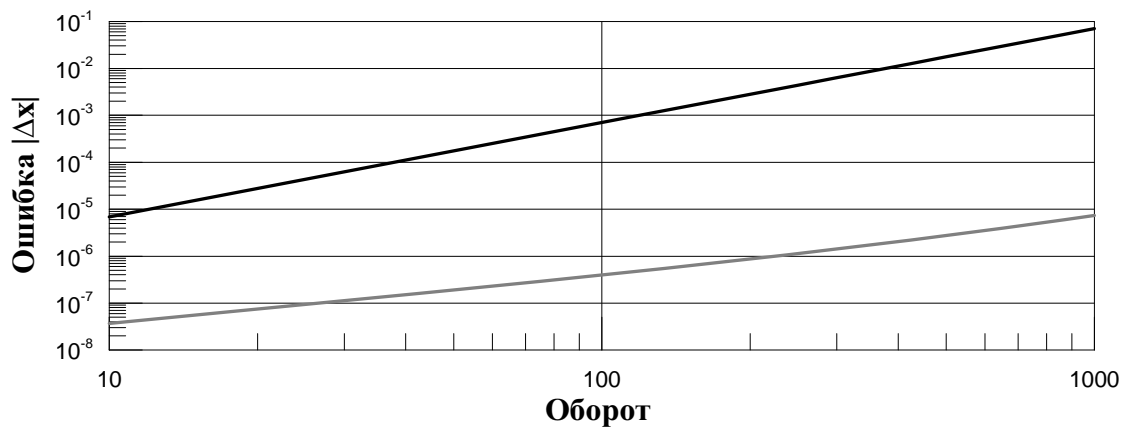


Рисунок 3.7 — То же, что и на рис. 3.5, но для метода 8-го порядка с величиной шага $h = 2\pi/16$

восьмого порядков соответственно при интегрировании круговой орбиты с постоянным шагом на временном интервале $\Delta t = 1000$ оборотов. Как видно из рисунков, принятых нами ранее оптимальных пять итераций оказывается недостаточно для обеспечения геометрических свойств интегратора, поэтому глобальная ошибка ведет себя квадратично со временем. Ситуация кардинально меняется, если число итерации увеличить до десяти: геометрические свойства сразу же проявляются в линейном поведении глобальной ошибки. Тем не менее, следует иметь в виду, что достижение геометрических свойств может быть сопряжено с увеличением объемов вычислений и понижением эффективности численного интегрирования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе получены следующие результаты:

1. Освоена теория неявных коллокационных методов Рунге–Кутты.
2. Составлен алгоритм коллокационного интегратора на разбиениях Гаусса–Лежандра, который программно реализован на языке Фортран 90.
3. Проведены численные эксперименты по исследованию эффективности коллокационного интегратора.
4. В результате анализа численных результатов определено оптимальное количество итераций для получения коллокационных значений правых частей дифференциальных уравнений.
5. Установлена зависимость эффективности численного интегрирования от порядка используемого коллокационного метода.
6. Проведено сравнение эффективностей интегратора Гаусса–Эверхарта на разбиении Лобатто и разработанного нами коллокационного интегратора на разбиении Лежандра. В частности, показано, что разбиение Лобатто обеспечивает более высокую эффективность численного интегрирования.
7. Исследовано, насколько значительно экстраполяция, предназначенная для получения начальных коллокационных приближений правых частей уравнений на следующем шаге с их последующим итерационным уточнением, повышает эффективность численного интегрирования. Экспериментально показано, что отказ от экстраполяции настолько существенно ухудшает численные результаты, что использование коллокационного интегратора становится весьма сомнительным.
8. Наконец, линейный характер поведения глобальной ошибки со временем позволил выявить геометрические свойства рассматриваемых коллокационных методов на разбиениях Лежандра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] *Hairer E., Norsett S.P., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations. Nonstiff Problems. Springer, 1993. 539 p.
- [2] *Холл Дж., Уатт Дж.* Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1979. 312 с.
- [3] *Butcher J.C.* Implicit Runge–Kutta Processes // Math. Comput. 1964. Vol. 18. P. 50–64.
- [4] *Everhart E.* An Efficient Integrator That Uses Gauss–Radau Spacings // Dynamics of Comets: Their Origin and Evolution, Proceedings of IAU Colloq. 83, held in Rome, Italy, June 11–15, 1984 / ed. by A. Carusi and G. B. Valsecchi. Dordrecht: Reidel, Astrophysics and Space Science Library, 1985. Vol. 115. P. 185–202.
- [5] *Авдюшев В.А.* Интегратор Гаусса–Эверхарта // Вычисл. технологии. 2010b. Т. 15. № 4. С. 31–47.
- [6] *Hairer E., Lubich C., Wanner G.* Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Springer, 2002. 659 p.