

**АВДЮШЕВ В.А.**

**LOBBIE — новый коллокационный интегратор  
(теоретическая часть доклада)**

Около десяти лет назад я представил новую версию интегратора Эверхарта, которую многие из вас знаю, а кое-кто даже использует для построения орбитальных моделей. Интегратор был подвергнут серьезной редакции, так что от оригинального кода осталось меньше половины. В интеграторе сохранились ядро, где итерационно формируется решение на шаге, а также предиктор к нему. Что же появилось нового? Прежде всего, интегратор поставлен на гауссовы разбиения Лежандра и Лобатто, которые придают интегратору геометрические свойства: симплектичность, симметричность и орбитальная устойчивость. На прежнем разбиении Радау интегратор не является геометрическим. Далее, переписана преамбула процедуры для вычисления вспомогательных коэффициентов, которые непосредственно участвуют в формировании решения. Наконец, пересмотрена стратегия выбора переменного шага интегрирования, которая насквозь пронизывает весь интегратор. В частности, разработан алгоритм автоматического подбора стартового шага.

С тех пор я несколько раз предпринимал попытки модифицировать интегратор, с тем чтобы упростить его код и тем самым, возможно, повысить эффективность. Хотя значительно преуспеть в этом предприятии мне долгое время никак не удавалось: новые версии были проще, но работали хуже. Только где-то около месяца назад я понял причину моих неудач, и тут же за день буквально с чистого листа написал новый интегратор. Очевидно, что его прототипом стал интегратор Эверхарта. Поэтому, чтобы лучше донести идею нового интегратора, я начну свой доклад с представления его предшественника.

Метод Эверхарта — это коллокационный метод Бутчера на гауссовых разбиениях: Лежандра, Радау и Лобатто, на основе аналитического приближения решения каноническим полиномом. Что такое коллокационный метод применительно к решению обыкновенных дифференциальных уравнений?

Допустим, требуется найти решение задачи Коши (\*) на заданное значение независимой переменной, близкое от начального. Идея коллокационных методов предельно простая. Кстати, чтобы понять ее, можно вообще ничего не знать о других методах, скажем, Рунге–Кутты или Адамса. Достаточно знать лишь, что такое дифференциальные уравнения, интегрирование и интерполяция.

Итак, в коллокационных методах решение приближенно представляется в виде многочлена, который удовлетворяет дифференциальному уравнению лишь в некоторых точках (\*). Кроме того, этот многочлен должен удовлетворять начальному условию (\*). Из этих условий определяется коллокационный многочлен, и тогда искомым решением задачи будет значение многочлена для заданного значения независимой переменной (\*).

Геометрический смысл условий коллокаций состоит в том, что касательные к многочлену в точках коллокаций должны совпадать с направлениями векторного поля, создаваемого функцией дифференциального уравнения (\*). При этом значения самого многочлена могут заметно отличаться от точного решения.

Условия коллокаций можно рассматривать как условия Лагранжа, налагаемые на производную от коллокационного многочлена, которая в таком случае будет выступать в роли (полиномиального) интерполянта функции (правой части) дифференциального уравнения. Из условий Лагранжа конструируется интерполяционный полином. Поскольку он является производной от коллокационного полинома (\*), следовательно, интегрируя его

по предельным значениям на отрезке интерполяции, мы получаем приближенное решение.

Полином зависит от промежуточных решений в точках коллокаций (\*). Они определяются также путем интегрирования интерполянта по соответствующим предельным значениям. Таким образом, коллокационный метод можно представить как сводку формул (\*).

Промежуточные решения задаются неявным образом через нелинейные уравнения, поэтому все коллокационные методы неявные. Уравнения решаются, как правило, методом простых итераций в модификации Зейделя, т.е. поочередно уточняя промежуточные решения на каждой итерации.

Фактически итерационное решение нелинейных уравнений является ядром интегратора, и его эффективность во многом зависит от того, насколько удачно организован итерационный процесс.

Точность метода зависит от количества точек коллокаций и специфики их распределения. Для произвольного распределения порядок метода равен количеству точек коллокаций. Однако при использовании узловых значений гауссовых квадратур порядок можно повысить до двух раз.

Коллокационные методы примечательны тем, что они дают не только одно решение на конце шага интегрирования и несколько промежуточных. Они дают целую аналитическую формулу для приближенного решения внутри шага, чем, собственно, мы и пользуемся в интеграторе Эверхарта при модельном представлении плотных рядов наблюдений.

Кроме того, наличие интерполянта позволяет получать хорошие начальные приближения для итерационного определения промежуточных решений на следующем шаге.

Особо следует отметить, что на разбиениях Лежандра и Лобатто коллокационные методы становятся геометрическими: симметричными и орбитально устойчивыми, а на разбиении Лежандра — еще и симплектическими.

Казалось бы, разбиение Лежандра предпочтительней, поскольку при одном и том же количестве точек коллокаций его порядок на два выше. Но посмотрим на другие характеристики (\*). Несмотря на то что порядок метода на разбиении Лобатто ниже, он и работает немного быстрее. Кроме того, интерполянт правой части уравнения строится на всем шаге интегрирования. Следовательно, предиктор метода на разбиении Лобатто будет лучше, что очень важно для программной реализации метода.

Простые примеры коллокационных методов (\*). Теория коллокационных методов была сформирована в середине прошлого века, хотя основная идея, заложенная в основу коллокационных методов, была известна еще в эпоху Ньютона. Его ученик, Роджер Котс, разработал квадратурные формулы для приближенного вычисления определенных интегралов путем замены подынтегральной функции интерполяционным полиномом Лагранжа (\*). Позже, еще в 1855 г., Джон Адамс (математик, астроном) предложил своему коллеге Франсису Башфорту (механику, баллистику) оригинальный способ решения дифференциального уравнения, описывающего форму капли. Так появился первый метод Адамса (\*).

Если в качестве интерполянта правой части дифференциального уравнения использовать полином Лагранжа (\*), то мы получаем коллокационный метод Рунге–Кутты в классической форме (\*). Здесь коэффициенты представляют собой интегралы от базисных функций Лагранжа.

Эдгар Эверхарт в качестве интерполянта выбрал канонический полином (\*). Хороший выбор! Действительно, канонический полином очень просто интегрируется и дает очень простой коллокационный полином (также в канонической форме). Таким образом, приближенное решение можно представить в виде (\*). Чтобы выразить коэффициенты полинома через коллокационные значения функции дифференциального уравнения, Эверхарт прибегает к разделенным разностям интерполяции Ньютона (\*), которые как раз непосредственно определяются из коллокационных значений. Между тем коэффициенты канонического полинома выражаются через разделенные разности посредством линейного преобразования Стирлинга (\*).

Несмотря на простое представление решения, использование разделенных разностей в качестве посредников серьезно усложняют итерационный процесс для определения промежуточных решений. Тем не менее, вопреки всякой логике, метод Эверхарта работает довольно эффективно.

Уже когда я написал новую версию интегратора, я задавал себе вопрос: зачем Эверхарт прибегает к двойной интерполяции, когда можно было бы воспользоваться одной из форм полиномиального приближения? Свои соображения по этому вопросу я даже опубликовал в своей монографии.

Уже из условий коллокаций видно, что коэффициенты канонического полинома связаны с правыми частями уравнения линейно посредством матрицы Вандермонда (\*). Следовательно, чтобы выразить коэффициенты полинома через правые части необходимо применить лишь обратное преобразование. Либо Эверхарт упустил этот момент, либо посчитал, что обращение матрицы Вандермонда может привести к существенной потере точности коэффициентов обратного преобразования (что, собственно, так и есть). Впрочем, в то время уже был разработан

прямой метод вычисления обратной матрицы Вандермонда без численного обращения. Видимо, Эверхарт о нем не знал.

С другой стороны, почему Эверхарт не отбросил канонический полином как балласт и не воспользовался полиномом Ньютона для конструирования приближенного решения? Ответ, по-моему, очевиден: скорее всего, Эверхарт не знал, как программно вычислять интегралы от базисных функций Ньютона. Между тем есть точные методы для вычисления подобных интегралов.

Предполагая дальнейшее развитие идей Эверхарта, я некоторое время назад написал фактически новый интегратор, где в качестве коллокационного полинома выбрал канонический как в интеграторе Эверхарта, но без использования разделенных разностей. Полином Ньютона в качестве интерполянта на тот момент я даже не рассматривал как альтернативу, поскольку полагал, что интегратор должен быть значительно сложнее.

На мое удивление и вопреки моим ожиданиям, новый интегратор работал заметно хуже. Я не стал углубляться в проблему и только совсем недавно вернулся к ней, в то время как я приступил к написанию раздела о методе Эверхарта к моей новой статье по коллокационным методам. Свежий взгляд позволил мне увидеть нечто новое в программной реализации метода Эверхарта, чему я ранее не придавал особого значения. Мой интегратор отличался от интегратора Эверхарта уже в самом ядре. (Имп.)

Тогда я понял, что изначально нужно было бы воспользоваться альтернативным представлением решения на основе полинома Ньютона. На тот момент у меня уже были некоторые программные наработки, из которых я быстро скомпоновал новый интегратор и тут же оттестировал его. Интегратор оказался проще и легче интегратора Эверхарта, при том что обеспечивал ту же самую эффективность. Название (Имп.) и коэффициенты (Имп.).

На следующий день я написал версию интегратора уже для уравнений второго порядка. Сделать это было не сложно, когда уже был под рукой интегратор для уравнений первого порядка.

Действительно, уравнения второго порядка, которые обычно описывают динамику, можно рассматривать как уравнения первого порядка относительно скоростей (производных). Тогда решения для них будут точно такие же, как и в предыдущей версии, а решения для координат получаются путем точного интегрирования приближенных формул для скоростей. Обратите внимание, что точность вычисления координат на порядок выше, нежели для скоростей.

Синтезируя две версии интегратора, я тут же написал третью для совместного решения уравнений первого и второго порядков (\*). Здесь первые описывают динамику (координаты и скорости), а вторые — какие-либо вспомогательные величины. Когда нам приходится иметь дело с такими системами уравнений?

За примерами далеко ходить не надо. Например, при исследовании динамического хаоса, когда вместе с уравнениями орбитального движения необходимо совместно интегрировать уравнения первого порядка для показателей хаотичности; также при интегрировании систем регулярных и линейных уравнений Кустанхаймо–Штифеля или Шперлинга–Боде, которые содержат уравнения первого порядка для интегральных параметров и времени.