Авдюшев В.А.

НЕИЗВЕСТНЫЙ МЕТОД ЭВЕРХАРТА

Введение

Что может быть неизвестным в хорошо известном? — спросите вы. Действительно, метод Эверхарта широко применяется в небесной механике, а некоторые даже хорошо знают его анатомию, где какой внутренний орган расположен и для чего он нужен. Однако, я уверен, мало кто знает, что же на самом деле представляет собой метод в общем и в целом, каково же его место в арсенале вычислительных методов.

Незнание порождает как слепую влюбленность, так и ярую ненависть. По этой причине возникают «крылатые фразы» типа: «Методы Рунге–Кутты — вчерашний день. Иное дело — метод Эверхарта!» или «Кто использует метод Эверхарта — просто пижон! Современные методы Рунге–Кутты рулят!» Причем неприязненное отношение часто формируется после того, как метод Эверхарта не оправдывает ожидания и, как оказывается после, просто из-за неправильного использования. Но тогда можно лишь сказать: не умеешь пользоваться, не берись. Все интеграторы имеют свои особенности, которые, разумеется, нужно знать, и поэтому каждый интегратор, как любая женщина, требует к себе особый подход. Не получается — значит, это не твой интегратор. Попробуй что-нибудь другое, попроще, но более понятное и подходящее тебе.

Как говорит К.В. Холшевников, термин бывает удачным или неудачным, а не правильным или неправильным. Метод Эверхарта — термин скорее неудачный, нежели неправильный, и здесь, конечно же, сам Эверхарт ни при чем: названия методу обычно дают пользователи, а не авторы. Хотя, вообще говоря, нужно определиться, что же мы все таки понимаем под методом Эверхарта: метод ли это решения дифференциальных уравнений, а может быть это — метод программной реализации, скажем, другого метода? Так вот, скорее второе, нежели первое. Кто-то возразит, но тогда я спрошу: почему метод Эверхарта нигде не упоминается в литературе по методам решения дифференциальных уравнений? Как будто его вообще никогда не существовало. Это, как вы понимаете, риторический вопрос.

В переписке с Э. Хайрером я попросил его выразить свое мнение по поводу метода Эверхарта. Тогда он, как это ни странно, впервые узнал о методе. Вот его ответ (*). Как мы видим, прозорливость Хайрера не подвела.

То, что астрономы называют методом Эверхарта, на самом деле является близким родственником семейства Рунге–Кутты. Это трудно увидеть с первого и неопытного взгляда, однако озарение приходит сразу, как только начинаешь сопоставлять методы и выискивать общие черты. Рассмотрим сначала всем известные методы Рунге–Кутты.

Методы Рунге–Кутты

Применительно к задаче Коши любой метод Рунге–Кутты можно представить в виде. Здесь (*). Коэффициенты метода подбираются таким образом, чтобы разложения приближенного и точного решений по малому параметру совпадали до нужного порядка.

Коллокационные методы

В середине прошлого века было обнаружено, что многие неявные методы Рунге–Кутты являются коллокационными. За страшным названием кроются простые вещи. Чтобы понять это, вам достаточно лишь хорошо понимать, что такое полиномиальная интерполяция.

Приближенное решение метода может быть представлено в виде многочлена, который определяется из так называемых условий коллокации, т.е. он должен удовлетворять дифференциальному уравнению лишь в некоторых точках и, кроме того, конечно же, должен удовлетворять начальному условию.

Условия коллокации позволяют построить интерполяцию для правой части дифференциальных уравнений. Иначе говоря, условия коллокаций выступают здесь в качестве условий Лагранжа. В коллокационных методах в качестве интерполяционного выбирается полином Лагранжа. Теперь внимание! То, что я сейчас скажу, покажется отступлением, но на самом деле это — центральный момент. Вы все прекрасно знаете, что представление интерполяционного полинома может быть разным, например, каноническим, в форме Ньютона или Чебышева, однако сам полином единственен, не важно, в какой форме он представляется. (*)

Итак, интегрируя интерполяционную формулу, получаем приближенное представление решения внутри шага и соответственно численное решение на конце шага интегрирования. В частности, из слайда видно, что коллокационный метод является методом Рунге–Кутты, где его коэффициенты выражаются через интегралы.

Если присмотреться внимательно, то можно увидеть, что аналогичный подход применяется для составления квадратурных формул Ньютона–Котеса, используемых при вычислении определенных интегралов, а также для построения многошаговых схем интегрирования. Идея везде одна — это замена правой части уравнений либо подынтегральной функции интерполяционным аналогом. В итоге получается приближенная формула интегрирования. Принципиальное отличие подхода в коллокационных методах состоит в том, что коэффициенты интерполяции находятся интерационным способом.

Согласно условиям коллокаций, коллокационный многочлен должен точно удовлетворять дифференциальному уравнению. Поскольку многочлен приближенно представляет решение, то будем иметь уравнение для него, где ошибку представим следующим образом. Это ошибка интерполяции. Вычитая уравнения друг из друга и интегрируя, получим разность решений. Введем вспомогательные величины. Тогда согласно условию Липшица, имеем. Здесь L — постоянная Липшица. Отсюда следует, что многочлен представляет решение на шаге с точностью до величины порядка h в степени $s + 1$, т.е. коллокационный метод имеет, по крайней мере, порядок $p = s$. Однако при специальном выборе разбиения на шаге, порядок можно повысить вдвое. Покажем это.

Методы Гаусса

Поскольку коллокационные многочлен приближенно представляет решение, он будет точно удовлетворять не исходному дифференциальному уравнению, а некоторому возмущенному. Линеаризуя его относительно точного решения, получим следующие линейные неоднородные уравнения. Их решение можно представить в виде (*). Здесь (*). Допустим, мы используем разбиение квадратурной формулы Гаусса. Тогда выражая интеграл через квадратуру, получим. Поскольку возмущения в точках коллокаций равны нулю, то интеграл становится ничем иным, как ошибкой квадратурной формулы. Следовательно, приближенное решение становится порядка $2s$. Можно использовать другие гауссовы разбиения, Гаусса–Радо или Гаусса–Лобатто, но тогда порядки будут соответственно на один, два ниже.

Метод Эверхарта

Вернемся к основным формулам коллокационных методов. Так вот, что такое метод Эверхарта. Если вы замените интерполяцию Лагранжа канонической интерполяцией, вы неизменно получите тот самый метод Эверхарта. Почему Эверхарт воспользовался этой интерполяцией (хотя заметьте, ни о какой интерполяции в работах Эверхарта нет и речи)? Дело в том, что она позволяет практически просто представить приближенное решение. Однако нужна связь коэффициентов с правыми частями в точках коллокации. Из условия коллокации имеем линейную связь: прямую и обратную. Тогда коэффициенты определяются методом простых итераций в модификации Зейделя. Основные этапы итерационного процесса можно представить в виде схемы (*).

Это то, что мог сделать Эверхарт, но не сделал. Почему? Возможно, его смутила необходимость обращение матрицы Вандермонда. Хотя с точки зрения программирования, это не такая уж сложная процедура, причем обращение матрицы для определенного порядка требуется всего лишь один раз.

Вместо этого Эверхарт вводит ньютоновскую интерполяцию, коэффициенты которой представляют собой разделенные разности и явно выражаются через правые части уравнений. Но тогда требуются переходы от ньютоновской интерполяции к канонической, и наоборот. Коэффициенты полиномов связаны линейно. В свою очередь, коэффициенты линейных преобразований, вычисляются непосредственно, через значения узлов интерполяции. Таким образом, итерационный процесс строится следующим образом (*).

Как видно, итерационный процесс усложняется. Впрочем, тут же напрашивается вопрос: раз коэффициенты интерполяции Ньютона вычисляются так просто, почему Эверхарт не воспользовался только им для представления решения? Ответ может быть один: Эверхарт просто не знал алгоритма вычисления интегралов типа (*). Такой алгоритм в действительности существует и применяется для многошаговых методов с переменным шагом. Однако, если в многошаговом методе интегралы вычисляются на каждом шаге, то в коллокационных методах только один раз, в начале интегрирования.

Как бы то ни было, но конструкция приближенного решения значительно проще в классических коллокационных методах, где применяется интерполяция Лагранжа. Здесь так же, как и при использовании ньютоновской интерполяции, необходимо вычислять интегралы такого типа (*). Упрощается также итерационный процесс.

Конечно, возникает вопрос: можно ли после всего сказанного говорить, что метод Эверхарта стал результатом упущенных возможностей? С одной стороны, да: ведь программная реализация метода могла быть существенно лучше, но, с другой стороны, нужно понимать, идя свои путем, Эверхарт разработал интегратор, который остается пока наиболее эффективным, по крайней мере, применительно к решению задач небесной механики. В чем же состоит его преимущество? Давайте, разберемся.

Представление решения в виде полинома позволяет вычислять начальные приближения коэффициентов для итерационного процесса на следующем шаге, используя коэффициенты предыдущего. Фактически они получаются в результате продолжения полученного полинома на интервал следующего шага. Как видно, формулы для классических коллокационных методов и в этом случае значительно проще. Здесь e — это числа арифметического треугольника. Кстати, честно говоря, я не знаю, что на самом деле выбирается в других интеграторах в качестве начальных приближений. Хотя, на мой взгляд, продолжение интерполяционного полинома в коллокационных методах — это естественный прием.

Правда, следует заметить, что начальные приближения для метода Эверхарта определяются лучше, поскольку они еще уточняются по отклонениям начальных приближений относительно результирующих на предыдущем шаге. То есть у интегратора есть память о том, насколько грубыми были начальные приближения на предыдущем шаге и эта информация также учитывается. Подобная процедура почему-то не срабатывает для интерполяции Лагранжа. За счет этого метод Эверхарта требует меньше итераций, и поэтому его эффективность оказывается заметно выше классических неявных методов Рунге–Кутты. Так вот, именно эту мелочь, незаметную, но весьма важную, как некое ноу-хау следует выделять, когда вы обосновываете преимущества интегратора Эверхарта.

Итак, что представляет собой то, что обычно называют «методом Эверхарта»?

Метод Эверхарта, часто представляемый как оригинальный метод, в действительности основан на видоизмененных формулах неявных коллокационных методов Рунге–Кутты типа Бутчера, которые сейчас называют методами Гаусса. Поэтому интегратор обладает всеми присущими им как достоинствами, так и недостатками.

Интегратор позволяет выполнять численное интегрирование с любым порядком точности. Для этого, правда, необходимо предварительно вычислить узловые значения соответствующего гауссова разбиения: Радо, Лобатто, либо Лежандра. В принципе могут использоваться другие разбиения, но они обеспечивают более низкую точность интегрирования.

Далее, поскольку в основе приближеного решения лежит полином, он может использоваться для представления решений не только на конце, но и внутри шага.

Известно также, что симметричные коллокационные методы на разбиениях Лобатто и Лежандра орбитально устойчивы, т.е. они сохраняют круговую орбиту, описываемую гармоническим осциллятором. Кроме того, они геометрические, и это свойство улучшает поведение ошибок интегрирования.

Однако главный недостаток интегратора заключается в несовершенстве алгоритма выбора шага, точнее, в оценке локальной точности.

Оценивание точности и выбор шага

Локальная ошибка обычно оценивается путем сравнения двух решений: либо одного порядка по формулам Рунге или Милна, либо разных порядков как во вложенных и экстраполяционных методах, а также в многошаговых методах Адамса–Мультона. В методе Эверхарта формально используется та же идея, где рассматриваются два решения разных порядков для s и $s - 1$. Главная составляющая разности этих решений, иначе говоря, последний член канонического представления исходного решения, принимается за оценку локальной ошибки.

Таким образом, шаг в методе Эверхарта контролируется по этой оценке: он выбирается таким, чтобы сохранялась ее заданная величина. Если рассматривать канонический многочлен как отрезок ряда Тейлора, то это фактически означает, что шаг для гауссовых методов выбирается как для методов более низкого порядка. Например, (*).

Проблема эта теоретически разрешима. Для оценки точности, точнее, разделенной разности соответствующего порядка можно помимо уже полученных правых частей использовать вычисленные на предыдущем шаге. Однако практически разделенные разности высоких порядков очень чувствительны к вычислительным ошибкам. Настолько, что вообще непригодны для оценки точности интегрирования и выбора шага. Что здесь можно сделать?

Разделенные разности предполагают вычитание близких величин, что в программировании более неприятное явление, нежели суммирование, поскольку результат может содержать достаточно большую (относительную) ошибку. Впрочем, оценку разделенной разности можно выразить как взвешенную сумму правых частей, если воспользоваться интерполяцией Лагранжа. Возможно, значительные потери точности можно будет избежать, но это еще нужно исследовать.

Попутно хотел бы обратить ваше внимание, что предлагаемый подход для разрешения проблемы оценивания точности наводит на другие конструктивные мысли: а почему бы вообще не использовать промежуточные решения предыдущего шага для конструирования приближенного решения следующего шага. Возможно не только предыдущего, но и предпредыдущего и так далее. Тогда можно было бы добиться сумасшедшего порядка, даже не прибегая к гауссовым разбиениям. Вы узнаете, на что это похоже? На самом деле подобная идея уже используется в неявных многошаговых методах. Почему подобная? Потому что в многошаговых методах итерационно находится одно решение, тогда как в коллокационных — несколько. С этой точки зрения, указанный мною подход являет обобщением того, который используется в многошаговых методах. Насколько он может быть эффективным, это также еще нужно исследовать.

Заключение

Итак, противопоставлять методы Эверхарта и Рунге–Кутты совершенно нелепо, поскольку первые являются представителями последних, причем класса коллокационных гауссовых методов. В действительности Эверхарт изобрел велосипед. Тем не менее, нельзя недооценивать значимость этого изобретения. Велосипед Эверхарта остается пока самым лучшим и востребованным (правда, пока в небесной механике), даже несмотря на некоторые недоработки, которые, как мы увидели, легко устраняются и поэтому должны быть устранены. В этом смысле изобретение Эверхарта ожидает своего дальнейшего усовершенствования.