

СПЛАЙН-ИНТЕГРИРОВАНИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

Власов Сергей Александрович¹, Ширков Петр Дмитриевич²

¹Студент;

ГОУ ВПО «Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,
Институт системного анализа и управления;
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;
e-mail: vlasovs2@yandex.ru.

²Кандидат физико-математических наук, доцент;

ГОУ ВПО «Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,
Филиал «Дмитров»;
141800, Московская обл., г. Дмитров, мкрн. ДФЗС, д. 23
e-mail: pdshirkov@gmail.com.

Работа посвящена исследованию нового подхода численного интегрирования задачи Коши для систем дифференциальных уравнений с запаздыванием. Он основан на построении шаг за шагом векторной сплайн-функции (для каждой компоненты решения), которая является приближением искомой функции. Получаемое приближение является непрерывной и гладкой функцией, что позволяет использовать его в задачах оптимального выбора параметров динамической системы, возникающих, например, в задачах медицины и иммунологии.

Построенные сплайн-методы эквивалентны неявным непрерывным коллокационным методам Рунге-Кутты. Доказана А-устойчивость построенных методов. Для проверки эффективности сплайн-методов проведен сравнительный анализ с классическими методами, такими как явные методы Рунге-Кутты. Выявлены преимущества и недостатки предлагаемого подхода.

Ключевые слова: дифференциальные уравнения с запаздыванием, сплайн-методы, А-устойчивость.

SPLINE INTEGRATION OF DDE

Vlasov Sergey ¹, Shirkov Peter ²

¹Student;

Dubna International University of Nature, Society and Man;
Institute of system analysis and management;
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;
e-mail: vlasovs2@yandex.ru.

²Candidate of Science in Physics and Mathematics, docent;

Dubna International University of Nature, Society and Man, «Dmitrov» branch;
141800, Dmitrov, Moscow reg., DZFS, 23;
e-mail: pdshirkov@gmail.com.

This paper is dedicated to research of new approach for numerical integration of the delay differential equations systems. New methods are based on building step by step vector spline function (for each components of the solution), which is the approximation of the sought function. The approximation is continuous and smooth function. Such properties are necessary for the solution of problem of the optimum choice dynamic system parameter, which appears, for instance, in medicine and immunology.

New spline methods are equivalent to the implicit continuous Runge-Kutta collocation methods. A-stability of new methods have been proved. Benchmark analysis is organized for checking out of efficiency of the spline method in contrast with classic methods such as explicit Runge-Kutta methods. The advantages and defects were revealed of the proposed approach.

Keywords: spline methods, delay differential equations, A-stability.

Введение

Задача Коши для систем дифференциальных уравнений с запаздываниями (DDE – delay differential equations) может быть записана в виде:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \bar{u}(t) = \bar{F}[t, \bar{u}(\beta_1), \bar{u}(\beta_2), \dots, \bar{u}(\beta_k)], & t \in [0, T] \\ \bar{u}(t) = \bar{\varphi}(t), & t \in [-\theta, 0] \end{cases} \quad (1)$$

где β_i ($i=1 \dots k$) – параметры запаздывания, θ – максимальное запаздывание; $t - \theta \leq \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k \leq t$; $\bar{F} : R \times (R^n)^k \rightarrow R^n$, $\bar{u}(t) \in R^n$ – искомая вектор-функция; $\bar{\varphi}(t) \in R^n$ – начальные условия.

Системы подобного типа широко применяются для описания процессов в электрических цепях, биологии, иммунологии, физиологии и так далее. Теория таких систем широко развивалась во второй половине 20-ого столетия, в том числе - благодаря работам математиков отечественной школы [1, 2].

Данный класс систем имеет множество обобщений со своими особенностями. Например: величина запаздывания может меняться в зависимости от времени и самого решения; правая часть системы может включать не только запаздывающие компоненты решения, но и их производные; начальные условия могут быть не согласованы с системой дифференциальных уравнений либо задаваться разрывными функциями. Всё это может вносить большие осложнения, вплоть до нарушения единственности решения начальной задачи [2].

Классические методы основываются на совместном использовании методов численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений, например, явных методов Рунге-Кутты, и аппроксимации запаздывающих переменных, например, методами интерполяции сеточных функций (смотри более подробно [3, 4]).

В явных методах не нужно решать никаких нелинейных систем уравнений. В результате эти методы являются самыми быстрыми. Однако их применение для решения жестких систем дифференциальных уравнений весьма проблематично из-за слабых свойств устойчивости [5, 6].

Явные методы Рунге-Кутты задаются с помощью таблицы Бутчера, а переход в новую точку осуществляется по известным формулам

$$k_i = f(t_n + \tau \cdot c_i, y_n + \tau \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), \quad i = \overline{1, s},$$

$$y_{i+1} = y_i + \tau \cdot \sum_{j=1}^s b_j k_j.$$

Желательно, чтобы величина шага интегрирования выбиралась автоматически, так как это экономит вычислительные затраты и помогает избежать некоторых проблем, связанных с прохождением решения через особые точки (например, такие, в которых нарушается гладкость). Классические стратегии выбора шага приводятся в [5, 6, 7].

Численная интерполяция необходима для получения значений искомой функции между узлами разностного приближения, которые требуются для вычисления правой части. В качестве интерполирующих функций чаще всего используются интерполяционные многочлены Лагранжа, Эрмита, Ньютона [8].

В данной работе предлагается новый способ получения численного решения задачи (1), основанный на пошаговом построении векторной сплайн-функции, компоненты которой удовлетворяют исходной системе уравнений и начальным условиям. Получаемое решение сразу является непрерывно-дифференцируемой функцией, что необходимо для решения задач оптимизации управляющих параметров в задачах иммунологии и медицины (см., например, [9]).

1. Метод сплайн-интегрирования

Методы, в которых используются сплайны, именуются сплайн-методами. Таким образом, сплайн-методы решения систем дифференциальных уравнений можно назвать *сплайн-интегрированием*.

В отличие от классических методов в методе сплайн-интегрирования предполагается сразу строить аппроксимирующую сплайн функцию. Чтобы эта функция была приближением решения достаточно наложить условия соответствия её начальной задаче Коши в некоторых точках.

На каждом шаге интегрирования неизвестная вектор-функция, состоящая из n компонент, рассматривается как n многочленов некоторой степени m . На многочлены накладываются определённые условия, которые однозначно определяют их коэффициенты. Эти же многочлены используются для получения приближенных значений вектора-функции между узлами сетки интегрирования. В результате, после нескольких шагов интегрирования получится приближение решения в виде кусочно-многочленной функции, которую можно называть сплайн-функцией или просто сплайном [10]:

$$S_{i,j}(t) = a_{i,j,0} + a_{i,j,1}(t - t_i) + \frac{a_{i,j,2}}{2}(t - t_i)^2 + \frac{a_{i,j,3}}{6}(t - t_i)^3 + \dots + \frac{a_{i,j,m}}{m!}(t - t_i)^m,$$

где i – номер шага интегрирования; j – номер компоненты; $a_{i,j,0} \dots a_{i,j,m}$ – коэффициенты сплайна.

Сложность одного шага интегрирования для сплайна невысокой степени и относительно несложной правой части системы дифференциальных уравнений составляет

$$O(n^3 \times m^3) \text{ арифметических операций.}$$

Данные методы схожи с полностью неявными непрерывными коллокационными методами Рунге-Кутты [5, 7] и отличаются от них лишь тем, что решение сразу представляется в удобном для вычислений виде.

1.1. Условия, накладываемые на коэффициенты сплайна

Предположим, что сплайн-функция уже определена на отрезке времени от t_0 до t_i . На следующем шаге интегрирования требуется построить следующий кусок сплайна в виде многочленов $S_{i,j}(t)$ для каждой компоненты решения, который задаст поведение сплайна на интервале $(t_i, t_{i+1}]$. Этот шаг будем называть очередным или текущим шагом интегрирования.

Количество коэффициентов для текущего куска сплайна равно $n \times (m + 1)$. Чтобы однозначно их определить, необходимо составить и решить нелинейную систему уравнений, нелинейную потому, что она составляется из условий соответствия сплайна системе нелинейных дифференциальных уравнений в некоторых точках.

Условия, которые накладываются на коэффициенты многочленов, определяют специфику приближения. Они образуют систему и могут быть следующими:

1. $S_{i,j}(t_i) = S_{i-1,j}(t_i)$ (непрерывность сплайна).

2. $\frac{d}{dt} S_{i,j}(t_i + \lambda_1 \cdot (t_{i+1} - t_i)) = F_j(t_i + \lambda_1 \cdot (t_{i+1} - t_i), S_i),$

...

- $\frac{d}{dt} S_{i,j}(t_i + \lambda_k \cdot (t_{i+1} - t_i)) = F_j(t_i + \lambda_k \cdot (t_{i+1} - t_i), S_i),$ (2)

...

$$\frac{d}{dt} S_{i,j}(t_i + \lambda_m \cdot (t_{i+1} - t_i)) = F_j(t_i + \lambda_m \cdot (t_{i+1} - t_i), S_t).$$

Здесь S_i – кусочно-многочленная функция, построенная к текущему моменту времени; $S_{i,j}(t)$ – отдельный кусок сплайна;

i – номер узла сетки; j – номер компоненты системы;

n – количество компонент системы; m – максимальная степень многочлена;

$0 \leq \lambda_1 \dots \lambda_k \dots \lambda_m \leq 1$ – коэффициенты разбиения интервала $[t_i; t_{i+1}]$ для получения дополнительных условий соответствия сплайна системе в промежуточных точках. В простейшем случае его задает равномерная сетка. При большой степени сплайна ($m > 7$) лучше использовать Чебышевскую сетку.

Получившуюся нелинейную систему для неизвестных коэффициентов сплайна можно решить методом Ньютона [8].

1.2. Нахождение коэффициентов сплайна

На практике оказывается, что для построения сплайна удобнее решать систему нелинейных уравнений относительно производных в промежуточных точках, а по ним находить значения коэффициентов. Рассмотрим случай, когда сплайн кубический и система дифференциальных уравнений имеет только одно уравнение, т.е. $n = 1$, $m = 3$. Тогда система (2) запишется следующим образом:

1. $S_i(t_i) = S_{i-1}(t_i)$;
2. $\frac{d}{dt} S_i(t_i) = F(t_i, S_t)$;
3. $\frac{d}{dt} S_i\left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}\right) = F\left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}, S_t\right)$;
4. $\frac{d}{dt} S_i(t_{i+1}) = F(t_{i+1}, S_t)$; $\frac{d}{dt} S_i(t_{i+1}) = F(t_{i+1}, S_t)$

(3)

где $S_i(t)$ – кусочно-многочленная функция

$$S_i(t) = a_i + b_i(t - t_i) + \frac{c_i}{2}(t - t_i)^2 + \frac{d_i}{6}(t - t_i)^3.$$

Для нахождения коэффициентов a_i , b_i , c_i , d_i следует потребовать выполнения всех четырех условий. Добиться выполнению первых двух условий (3) относительно несложно:

$$a_i = S_{i-1}(t_i) = a_{i-1} + b_{i-1}(t_i - t_{i-1}) + \frac{c_{i-1}}{2}(t_i - t_{i-1})^2 + \frac{d_{i-1}}{6}(t_i - t_{i-1})^3,$$

$$b_i = F(t_i, S_t) = S'_{i-1}(t_i) = b_{i-1} + c_{i-1}(t_i - t_{i-1}) + \frac{d_{i-1}}{2}(t_i - t_{i-1})^2.$$

Чтобы найти c_i и d_i осталось потребовать выполнения ещё двух условий системы (3).

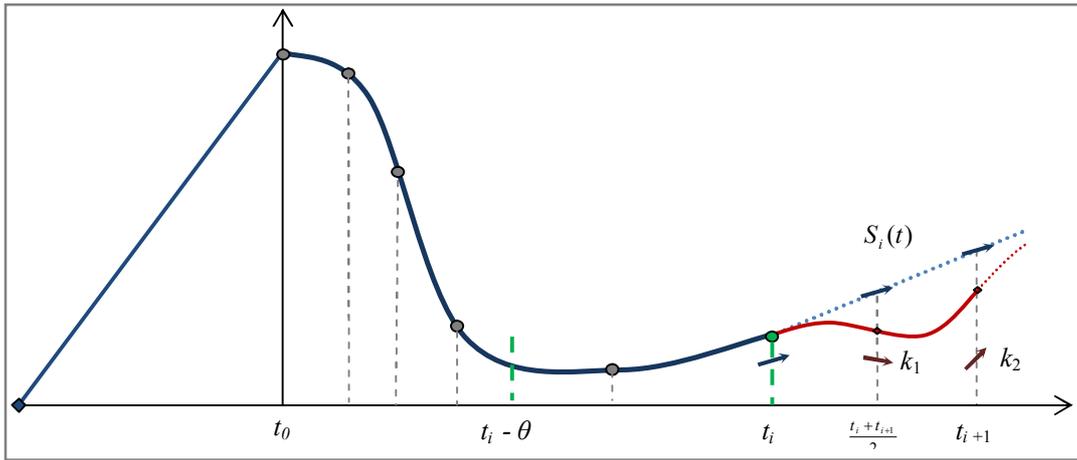


Рис. 1. Построение очередного куска сплайна

Расчёты при этом удобнее проводить не с коэффициентами c_i и d_i , а со связанными с ними значениями производных многочлена $S_i(t)$ в точках $\tau_1 = \frac{t_i + t_{i+1}}{2}$ и $\tau_2 = t_{i+1}$, то есть $S'_i(\tau_1) = k_1$ и $S'_i(\tau_2) = k_2$ (смотри рисунок 1). Тогда из (3) получим

$$\begin{cases} k_1 - F(\tau_1, S_i(k_1, k_2)) = 0, \\ k_2 - F(\tau_2, S_i(k_1, k_2)) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Находятся k_1 и k_2 методом Ньютона, и на каждой его итерации вычисляются значения c_i и d_i по формулам:

$$\begin{cases} c_i = \frac{-3 \cdot b_i + 4 \cdot k_1 - k_2}{(t_{i+1} - t_i)}, \\ d_i = \frac{4 \cdot (b_i - 2 \cdot k_1 + k_2)}{(t_{i+1} - t_i)^2}. \end{cases}$$

В качестве начальных значений k_1, k_2 можно взять значение $S'_i(t_i)$ либо экстраполированные значения производных по предыдущему куску.

Переходя к случаю сплайна более высокой степени, определить кусок сплайна можно решив систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} a_{i,j,2} + \frac{a_{i,j,3}}{2} \tau_1 + \dots + \frac{a_{i,j,m}}{(m-1)!} \tau_1^{m-2} = \frac{S'_{i,j}(\tau_1) - a_{i,j,1}}{\tau_1}, \\ a_{i,j,2} + \frac{a_{i,j,3}}{2} \tau_2 + \dots + \frac{a_{i,j,m}}{(m-1)!} \tau_2^{m-2} = \frac{S'_{i,j}(\tau_2) - a_{i,j,1}}{\tau_2}, \\ \dots \\ a_{i,j,2} + \frac{a_{i,j,3}}{2} \tau_{m-1} + \dots + \frac{a_{i,j,m}}{(m-1)!} \tau_{m-1}^{m-2} = \frac{S'_{i,j}(\tau_{m-1}) - a_{i,j,1}}{\tau_{m-1}}. \end{cases} \quad (5)$$

Решать систему (5) можно методом исключений Гаусса [8].

1.3. Стратегия выбора шага

На первых двух шагах интегрирования контроль погрешности и величина шага выбирается на основе сгущения сетки и экстраполяции Ричардсона. На последующих шагах используется следующая схема:

1. Оцениваем локальную погрешность в точке t_i , используя предыдущие куски сплайна:

$$|err_{i,0}| = \| S_{i-2}(t_i) - S_{i-1}(t_i) \|_{l_2}.$$

2. Делаем попытку угадать шаг:

$$h_{i,0} = h_{i-1} \cdot \sqrt[p]{\frac{Tol}{|err_{i,0}|}},$$

где p – теоретический порядок метода; Tol – заданная погрешность.

3. Строим кусок сплайна и делаем оценку локальной погрешности в точке $t_{i+1} = t_i + h_{i,0}$:

$$|err_{i,1}| = \| S_{i-1}(t_{i+1}) - S_i(t_{i+1}) \|_{l_2}.$$

4. Если $|err_{i,1}| > Tol$, то выбираем другой шаг:

$$h_{i,1} = h_{i-1} \cdot \sqrt[p]{\frac{Tol}{|err_{i,1}|}}.$$

5. Пока $|err_{i,k}| > Tol$, продолжаем уменьшать шаг интегрирования и оценивать локальную погрешность в точке $t_{i+1} = t_i + h_{i,k}$:

$$|err_{i,k}| = \| S_{i,prev}(t_{i+1}) - S_{i,last}(t_{i+1}) \|_{l_2},$$

$$h_{i,k} = h_{i-1} \cdot \sqrt[p]{\frac{Tol}{|err_{i,k}|}}.$$

1.4. Анализ устойчивости метода

Центральной темой в теории численных методов решения систем дифференциальных уравнений, и в особенности жестких уравнений, является определение того, при каких обстоятельствах и в какой степени численный метод столь же устойчив (т.е. так же чувствителен к возмущениям), как и дифференциальные уравнения [5, 6].

Устойчивость методов численного интегрирования жестких систем ОДУ обычно исследуется на примере скалярного уравнения

$$\dot{u} = \lambda \cdot u,$$

$$u(0) = u_0.$$

Положим, что численный метод, применяемый к решению этого уравнения, может быть записан в виде

$$y_{n+1} = R(z)y_n,$$

$$z = \tau \cdot \lambda,$$

где $R(z)$ называется функцией устойчивости.

Численный метод для решения уравнения является абсолютно устойчивым, если выполнено условие

$$R(z) \leq 1.$$

Из определения следует, что $|y_{n+1}| \leq |y_n|$.

Это требование является естественным при $\text{Re}(z) \leq 0$, поскольку в таком случае модуль точного решения есть невозрастающая функция.

Множество всех точек z , для которых $\text{Re}(z) \leq 1$, называется областью абсолютной устойчивости. В зависимости от функции устойчивости $R(z)$ можно выделить несколько типов устойчивости. Например, A , $A(a)$, L , B – устойчивость.

Одношаговые методы можно классифицировать в соответствие с их типом устойчивости, например:

1. A -устойчивые;
2. $A(a)$ -устойчивые;
3. L -устойчивые;
4. B -устойчивые.

Анализ устойчивости – задача не простая (см., например, [6]), однако, если для численного метода удастся построить аналогичный метод Рунге-Кутты, например, составив соответствующую таблицу Бутчера, то можно воспользоваться стандартными критериями устойчивости для методов Рунге-Кутты [11].

Составим таблицу Бутчера для методов сплайн-интегрирования. Рассмотрим подробно i -й шаг метода для j -й компоненты решения. На этом шаге требуется подобрать многочлен $S_{ij}(t)$ степени m , который удовлетворяет дифференциальному уравнению на некоторой вложенной сетке $0 \leq \lambda_1 \dots \lambda_k \dots \lambda_m \leq 1$ в интервале интегрирования, и при этом согласовать его значение на левой границе со значением прошлого куска $S_{i-1,j}(t)$ в той же самой точке. Этот многочлен получается в результате некоторого итерационного процесса. Предположим, что процесс сходится, и в результате значения его производных $S'_m(t)$ на вложенной сетке $0 \leq \lambda_1 \dots \lambda_k \dots \lambda_m \leq 1$ становятся равными значениям правой части дифференциального уравнения в тех же точках. Справедливо следующее утверждение:

$$S_i(t_i + \theta \cdot h) = h \cdot \int_0^\theta S'_i(t_i + \tau \cdot h) d\tau + S_{i-1}(t_i), \tag{6}$$

где $h = t_{i+1} - t_i$ – шаг интегрирования.

Но $S'_i(t_i + \tau \cdot h)$ – полином степени $m-1$, проходящий через m точек вида

$$(x_k, y_k) = (t_i + \lambda_k \cdot h, S'_i(t_i + \lambda_k \cdot h)), \quad k = \overline{1, m}$$

и он может быть записан в интерполяционной форме. Для этой цели воспользуемся интерполяционной формулой Ньютона, имеем:

$$S'_i(t_i + \tau \cdot h) = P_{m-1}(t_i + \tau \cdot h) = D[\lambda_1] + (\tau h - \lambda_1 h) \cdot D[\lambda_2, \lambda_1] + (\tau h - \lambda_1 h) \cdot (\tau h - \lambda_2 h) \cdot D[\lambda_3, \lambda_2, \lambda_1] + \dots,$$

где $D[\lambda_k] = S'_i(t_i + \lambda_k \cdot h)$, $D[\lambda_i, \dots, \lambda_j] = \frac{D[\lambda_i, \dots, \lambda_{j+1}] - D[\lambda_{i-1}, \dots, \lambda_j]}{\lambda_i h - \lambda_j h}$ – разделённые разности.

Как можно заметить, в формуле $P_{m-1}(t_i + \tau \cdot h)$ величина h сокращается. Подставляя её в (6), окончательно получим:

$$S_i(t_i + \theta \cdot h) = S_{i-1}(t_i) + \int_0^\theta P_{m-1}(t_i + \tau \cdot h) d\tau = S_{i-1}(t_i) + h \cdot \sum_{k=1}^m (\gamma_k(\theta) \cdot D_k).$$

Здесь $\gamma_k(\theta)$ – набор функций от θ , который зависит от сетки $0 \leq \lambda_1 \dots \lambda_k \dots \lambda_m \leq 1$.

Покажем аналогию с полностью неявными непрерывными коллокационными методами Рунге-Кутты. Коэффициенты D_k являются стадийными. Запишем необходимые стадийные уравнения:

$$D_k = F(t_i + \lambda_k \cdot h, S_i(t_i + \lambda_k \cdot h)),$$

$$S_i(t_i + \lambda_k \cdot h) = S_{i-1}(t_i) + h \cdot \sum_{j=1}^m (\gamma_j(\lambda_k) \cdot D_k) = S_{i-1}(t_i) + \lambda_k h \cdot \sum_{j=1}^m (\alpha_{k,j} \cdot D_k), \quad k = \overline{1, m}.$$

Теперь можно заполнить таблицу Бутчера (см. Таблицу 1).

Таблица 1. Таблица Бутчера, построенная для сплайн-метода

λ_1	$a_{1,1}$	$a_{1,2}$...	$a_{1,j}$...	$a_{1,m}$
λ_2	$a_{2,1}$	$a_{2,2}$...	$a_{2,j}$...	$a_{2,m}$
...
λ_k	$a_{k,1}$	$a_{k,2}$...	$a_{k,j}$...	$a_{k,m}$
...
λ_m	$a_{m,1}$	$a_{m,2}$...	$a_{m,j}$...	$a_{m,m}$
$y(\theta)$	$\gamma_1(\theta)$	$\gamma_2(\theta)$...	$\gamma_j(\theta)$...	$\gamma_m(\theta)$

Рассмотрим пару примеров. Пусть вложенная сетка $0 \leq \lambda_1 \dots \lambda_k \dots \lambda_m \leq 1$ является равномерной и $\lambda_1 = 0, \lambda_m = 1$. Вычислим таблицу Бутчера для случаев $m=2$ и $m=3$. Результаты приведены в Таблицах 2, 3, соответственно.

Таблица 2. Таблица Бутчера метода 2-го порядка

0	0	0
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$y(\theta)$	$\frac{\theta(-\theta+2)}{2}$	$\frac{\theta^2}{2}$

Таблица 3. Таблица Бутчера метода 4-го порядка

0	0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{24}$	$\frac{8}{24}$	$-\frac{1}{24}$
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$
$y(\theta)$	$\frac{\theta(4\theta^2 - 9\theta + 6)}{6}$	$\frac{\theta(-8\theta^2 + 12\theta)}{6}$	$\frac{\theta(4\theta^2 - 3\theta)}{6}$

Таким образом, при $m=2$ получается метод трапеций, а при $m=3$ – 3-х стадийных метод Лобатто - ША [5, 6]. Данные методы являются А-устойчивыми, поэтому и сплайн-метод тоже А-устойчив. Полученные результаты можно обобщить в Теорему:

Теорема. Сплайн-методы 2-го и третьего порядка А-устойчивы.

2. Система тестов

Тестирование алгоритмов для решения задач Коши происходит по стандартной схеме. Результатом тестирования являются оценки следующих показателей:

1. порядок метода, который оценивается по методу Рунге-Ричардсона;
2. точность метода (погрешность) – норма вектора отклонений результата от эталонного (экстраполяционного) решения в некоторых точках;
3. трудоемкость (быстродействие) оценивается в зависимости от времени счета ЭВМ.

Отклонения считаются по абсолютной величине:

$$\Delta = |y - y^*|, \text{ где } y^* - \text{эталонное решение, } y - \text{приближенное решение.}$$

В качестве норм используются нормы C и L_2 :

$$\|\cdot\|_C = \max |v_i|,$$

$$\|\cdot\|_{L_2} = \sqrt{\sum_i |v_i|^2}, \text{ где } \bar{v}_i - \text{компонента вектора, } i - \text{номер компоненты.}$$

Метод Рунге-Ричардсона позволяет определить порядок и точность численного метода интегрирования, а так же получить уточнённое приближенное решение. Основная идея состоит в вычислении приближения выбранным методом с шагом τ , затем с шагом $\alpha\tau$ и $\alpha^2\tau$ ($0 < \alpha < 1$) и дальнейшем рассмотрении разностей погрешностей для этих трех вычислений.

$$\begin{cases} y_1 = u^* + C_1 \tau^{p_1}, \\ y_2 = u^* + C_2 (\alpha\tau)^{p_2}, \\ y_3 = u^* + C_3 (\alpha^2\tau)^{p_3}, \end{cases}$$

где u^* – точное решение; y_1, y_2, y_3 – приближения с шагом $\tau, \alpha\tau,$ и $\alpha^2\tau$; $C_1\tau^{p_1}, C_2(\alpha\tau)^{p_2}, C_3(\alpha^2\tau)^{p_3}$ – погрешности соответствующих приближений.

Если шаг τ мал, то справедливы оценки:

$$p = \log_{\alpha} \left| \frac{y_2 - y_3}{y_1 - y_2} \right|,$$

$$C = \frac{y_1 - y_2}{\tau^p (1 - \alpha^p)} = \frac{y_2 - y_3}{\tau^p (\alpha^p - \alpha^{2p})} = \frac{y_1 - y_3}{\tau^p (1 - \alpha^{2p})}.$$

Здесь p – оценка порядка метода, а зная константу C можно оценить погрешности соответствующих приближений

$$\varepsilon_1 = C\tau^p = \frac{y_1 - y_2}{1 - \alpha^p},$$

$$\varepsilon_2 = C(\alpha\tau)^p = \frac{y_1 - y_2}{1 - \alpha^p} \alpha^p,$$

$$\varepsilon_3 = C(\alpha^2\tau)^p = \frac{y_1 - y_2}{1 - \alpha^p} \alpha^{2p}.$$

$$\text{Довольно часто выбирают } \alpha = \frac{1}{2}.$$

Для получения эталонного решения делают серию сгущений основной сетки. Для каждой последовательно идущей тройки получают оценку порядка и точности приближения. Сетку продолжают сгущать до тех пор, пока это возможно, либо погрешность не перестанет уменьшаться.

2.1. Линейная однокомпонентная задача

Это простейшая задача, содержащая одно уравнение с одним запаздыванием и имеющее точное аналитическое решение:

$$u'(t) = u(t - \theta), \quad t \in [0, T],$$

$$\theta = 1, T = 10.$$

Начальные условия согласуются с дифференциальным уравнением:

$$\begin{cases} u(t) = 1, & t \in [-\theta, 0] \\ u'(0) = 1 \end{cases}.$$

2.2. Хищник-жертва с запаздыванием

Это тестовая задача, содержащая две компоненты решения и два запаздывания. Она описывает динамику развития численности двух популяций (хищника N_2 и жертвы N_1) при их взаимодействии [12].

Начальная задача Коши:

$$\begin{cases} \dot{N}_1 = \frac{\lambda}{1+a} (1 + a \cdot (1 - N_2) - N_1(t-1)) \cdot N_1, & t \in (0, T], \\ \dot{N}_2 = \mu \cdot (N_1 - N_2(t-d_2)) \cdot N_2 \\ N_1 = \varphi_1(t) \\ N_2 = \varphi_2(t) \end{cases}, \quad t \in [-\theta, 0],$$

$$a = 2, \lambda = 2, \mu = 1, d_2 = 2,$$

$$\varphi_1(t) = const = 10, \varphi_2(t) = const = 1, T = 100,$$

где a – степень давления хищника на жертву; μ, λ – мальтузианские скорости роста популяций; d_2 – отношение возраста половой зрелости самок хищника и жертвы. Время в задаче нормировано на возраст половой зрелости самок жертвы.

2.3. Задача из иммунологии

Биологическая схема, лежащая в основе математической модели [13], показана на рисунке 2.

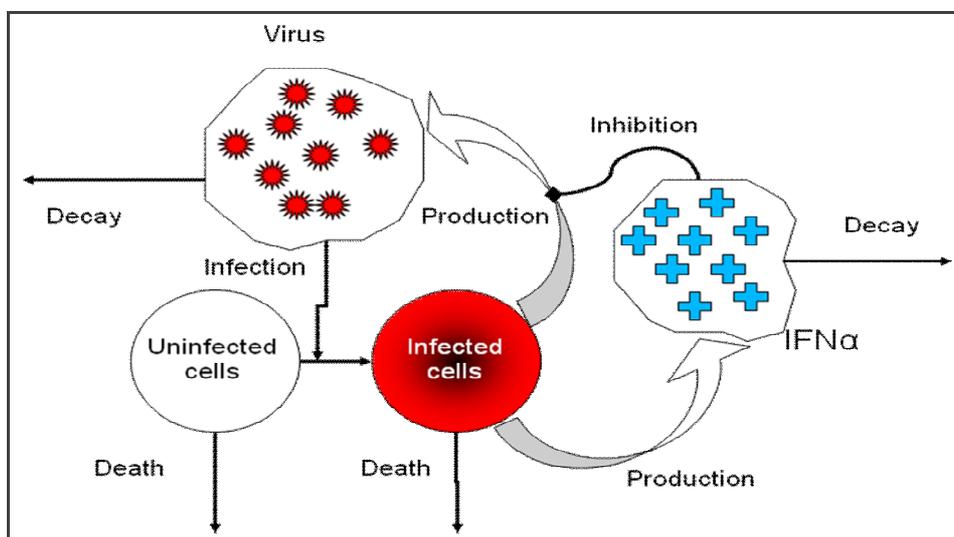


Рис. 2. Биологическая схема противовирусного ответа

Математическая модель включает в себя рассмотрение динамики четырех характеристик антивирусного ответа интерферона первого типа:

1. $V(t)$ – количество вируса в одном миллилитре;
2. $I(t)$ – количество интерферона в одном миллилитре;
3. $C(t)$ – плотность неинфицированных живых клеток;
4. $C_v(t)$ – плотность инфицированных живых клеток.

В этой модели, в частности, система дифференциальных уравнений с запаздыванием может выглядеть следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} V(t) = \frac{\rho_V}{1 + I(t)/\theta} C_v(t - \tau_V) - d_V V(t), \\ \frac{d}{dt} I(t) = \rho_I C_v(t - \tau_I) - d_I I(t), \\ \frac{d}{dt} C_v(t) = \sigma_V C(t) - d_{Cv}(t) C_v(t), \\ \frac{d}{dt} C(t) = -\sigma_V C(t) - d_C(t) C(t), \end{cases}$$

где параметры определяются на основе экспериментальных данных. Можно взять в качестве значений среднюю оценку по каждому из параметров:

$$\rho_V = 1,1; \quad \theta = 11,6; \quad \tau_V = 4,9; \quad d_V = 0,155;$$

$$\rho_I = 0,00091; \quad \tau_I = 4,5; \quad d_I = 0,012;$$

$$\sigma_V = 2,1 \cdot 10^{-6};$$

$$d_{Cv}(t) = \frac{0,1}{0,13} (e^{0,13t} - 1);$$

$$d_C(t) = \frac{0,0055}{0,089} (e^{0,089t} - 1).$$

Возьмём в качестве начальных условий следующие условия:

$$V(0) = 2340;$$

$$I(0) = 3,8;$$

$$C_v(0) = (1 - fi) \cdot 10^6 = 992300;$$

$$C(0) = fi \cdot 10^6 = 7700;$$

для $t < 0$ все функции $V(t)$, $I(t)$, $C(t)$, $C_v(t)$ равны нулю.

2.4. Результаты тестирования

Тестирование проводилось по следующей схеме:

1. находится эталонное решение в некоторых точках (путем экстраполяции на сгущающихся сетках);
2. строится решение классическими методами и методами сплайн-интегрирования при различных значениях погрешности tolerance;
3. оценивается трудоемкость метода, как время, требуемое методу на получение решения;

4. оценивается точность метода путем сопоставления полученного решения с эталонным.

Задача 1. Для линейной задачи на основе сгущающейся равномерной сетки со стартовым шагом $h = 0,1$ строится экстраполяционное решение в точке с абсциссой $T = 10$ численными методами сплайн-интегрирования с целью определения их порядка.

Все методы сплайн-интегрирования в качестве вложенной сетки используют равномерную сетку. В Таблице 4 для простоты выводятся только наиболее точные приближения, их абсолютная погрешность и порядок метода. Сплайн (k) – метод сплайн-интегрирования с использованием сплайна ($k - 1$) степени.

Таблица 4. Решение линейной задачи различными сплайн-методами.

Метод	Приближение	Погрешность	Порядок
Сплайн3	3,268078845226096200E+0002	1,655855201531257610E-0002	2,000735512610197880E+0000
Сплайн4	3,267913169220535610E+0002	4,222860608167260840E-0008	4,000149123535628770E+0000
Сплайн5	3,267913169689782100E+0002	4,691751205317661920E-0009	4,000281681224977700E+0000
Сплайн6	3,267913169642857010E+0002	1,300448575776151960E-0014	5,999433776803491410E+0000
Сплайн7	3,267913169642857150E+0002	1,230576530155670510E-0015	5,993793872191951770E+0000
Сплайн8	3,267913169642857140E+0002	6,684467794097296670E-0016	-1,765534746362977060E+0000

Методы Сплайн4 и Сплайн6 имеют завышенный порядок, связанный с проявлениями симметрий в разложении в ряд Тейлора. У метода Сплайн8 порядок должен быть равен 8, но в примере подобную оценку получить не удалось из-за того, что погрешность оказалась на уровне мантиссы.

Задача 2. Эталонное решение было получено методом экстраполяции Рунге-Ричардсона и показано на рисунок 3. На рисунке 4 показаны сетки при различных погрешностях, полученные при автоматическом выборе шага у метода сплайн-интегрирования третьей степени

В Таблице 5 приведены статистические данные, показывающие, хорошо ли работает стратегия автоматического определения величины шага (в методе Сплайн4). Видно, что встречаются случаи завышения величины шага, однако, за одну итерацию не было отброшено более чем пять шагов подряд. При различных значениях погрешности *tolerance* стратегия ведет себя схожим образом. Это говорит, что стратегия вполне работоспособная.

На рисунке 5 приведено сравнение методов Сплайн4 и РК3. Как можно видеть, по быстродействию метод Сплайн4 опережает РК3, это связано с более высоким порядком метода. И по точности результатов данный метод имеет лучшие характеристики.

На рисунке 6 приведено сравнение методов Сплайн4 и ДП5. В этом случае метод сплайн-интегрирования по быстродействию уже заметно отстает от классического метода. Однако зависимость достигаемой погрешности от задаваемой у метода Сплайн4 ведет себя более предсказуемо, чем у ДП5.

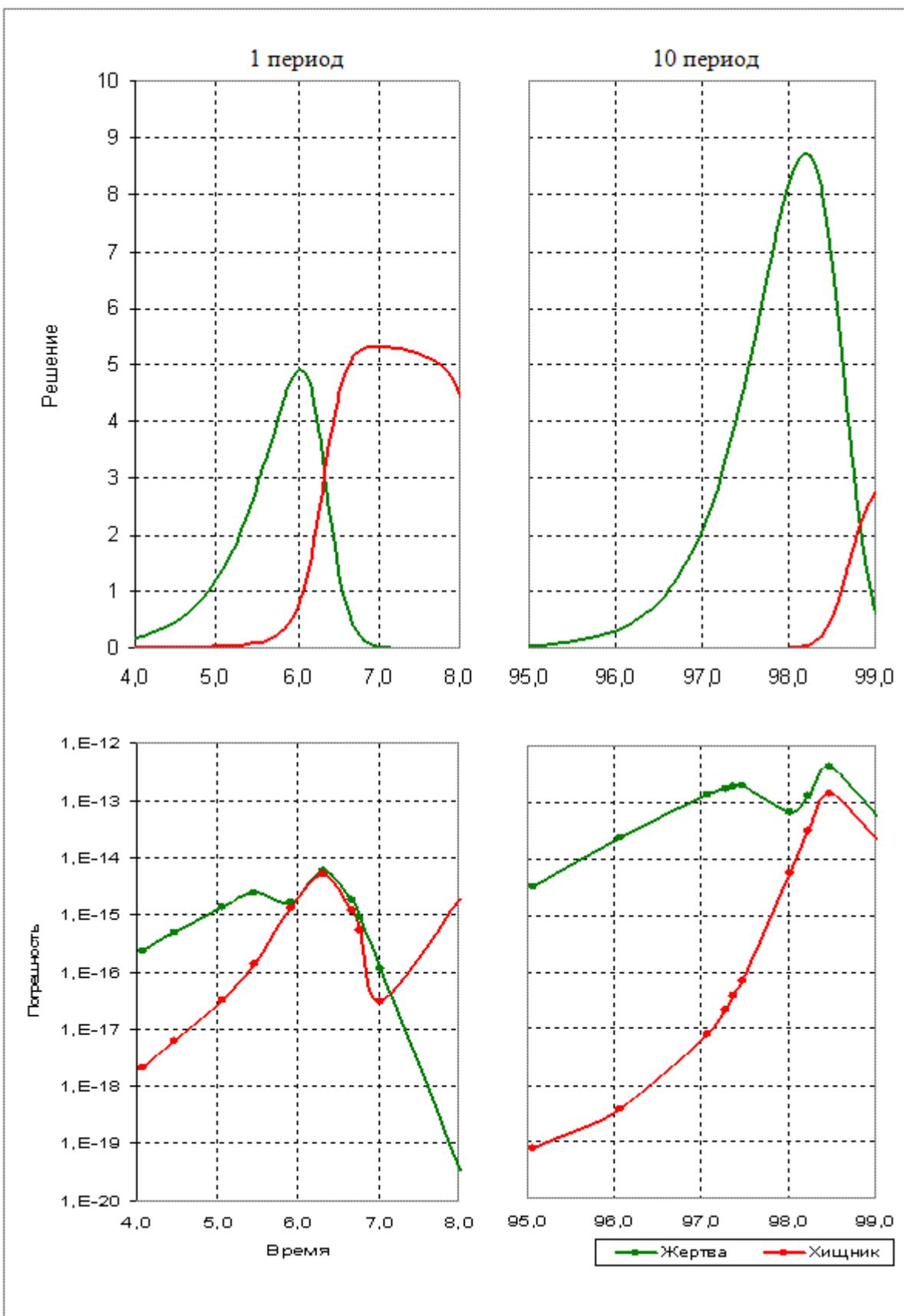


Рис. 3. Экстраполяционное решение задачи хищник-жертва

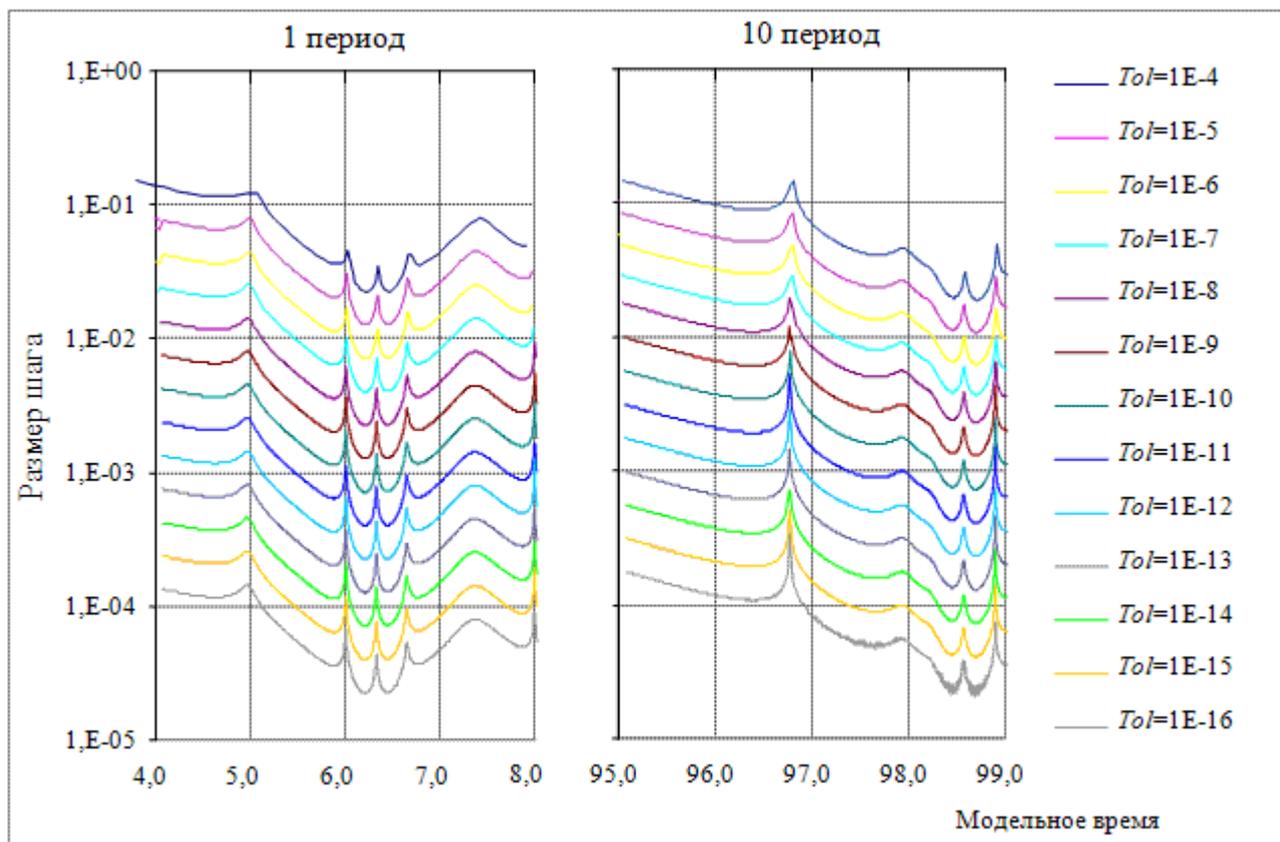


Рис. 4. Эволюция шага интегрирования

Таблица 5. Статистика отбрасывания шагов

Задаваемая погрешность	Число принятых шагов	Число отброшенных шагов	Максимальное число отбрасывания за итерацию	Процент отбрасывания
1E-4	1423	692	3	32,72%
1E-5	2496	1262	3	33,58%
1E-6	4395	2295	2	34,30%
1E-7	7771	4129	3	34,70%
1E-8	13754	7371	3	34,89%
1E-9	24395	13140	3	35,01%
1E-10	43319	23402	4	35,07%
1E-11	76957	41633	3	35,11%
1E-12	136801	74087	5	35,13%
1E-13	243165	131156	4	35,04%
1E-14	432294	218659	3	33,59%
1E-15	768940	359364	3	31,85%
1E-16	1373089	636771	3	31,68%

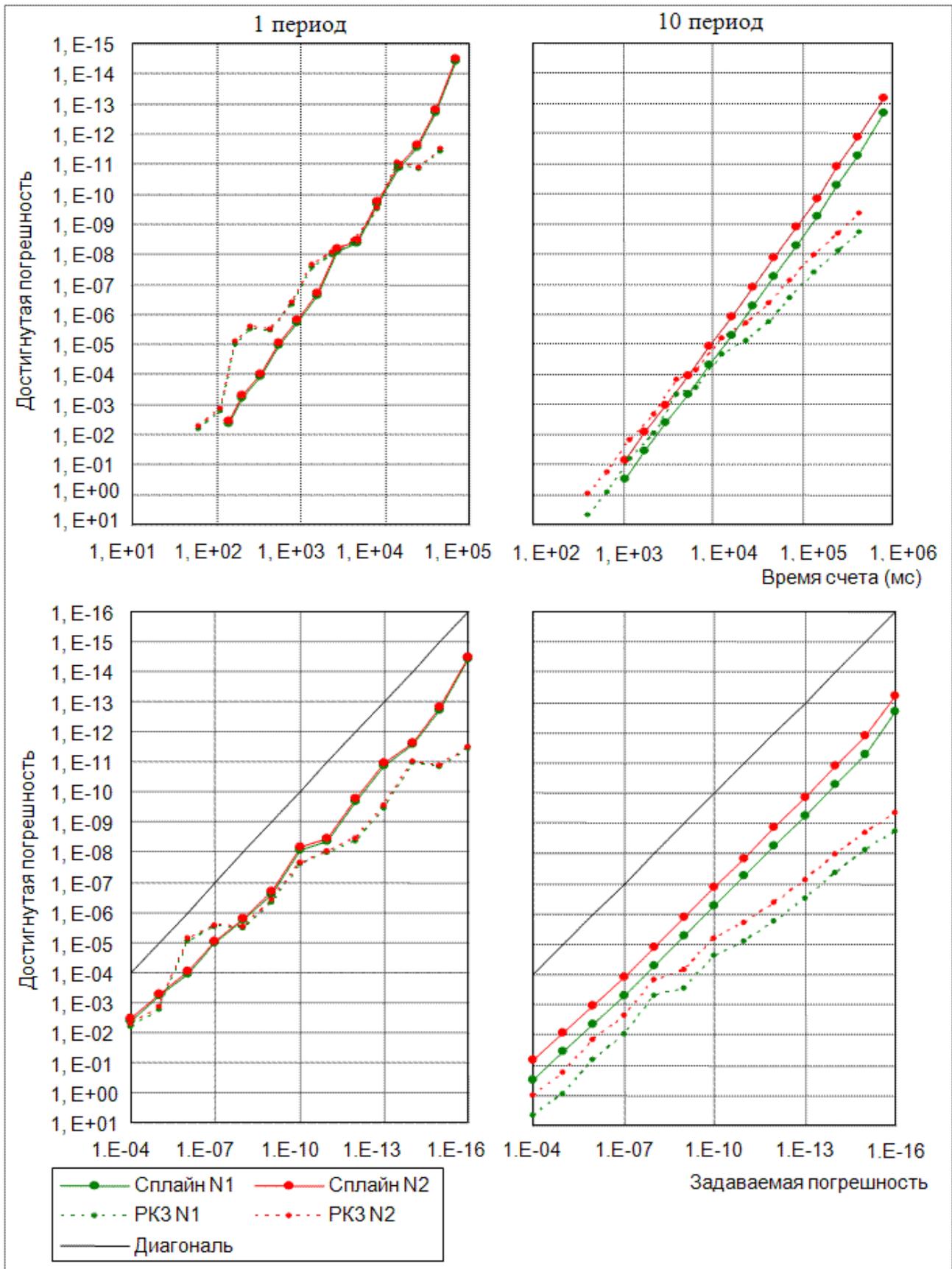


Рис. 5. Сравнение Сплайн4 ($p=4$) и РКЗ ($p=3$) (тестовая задача 2).

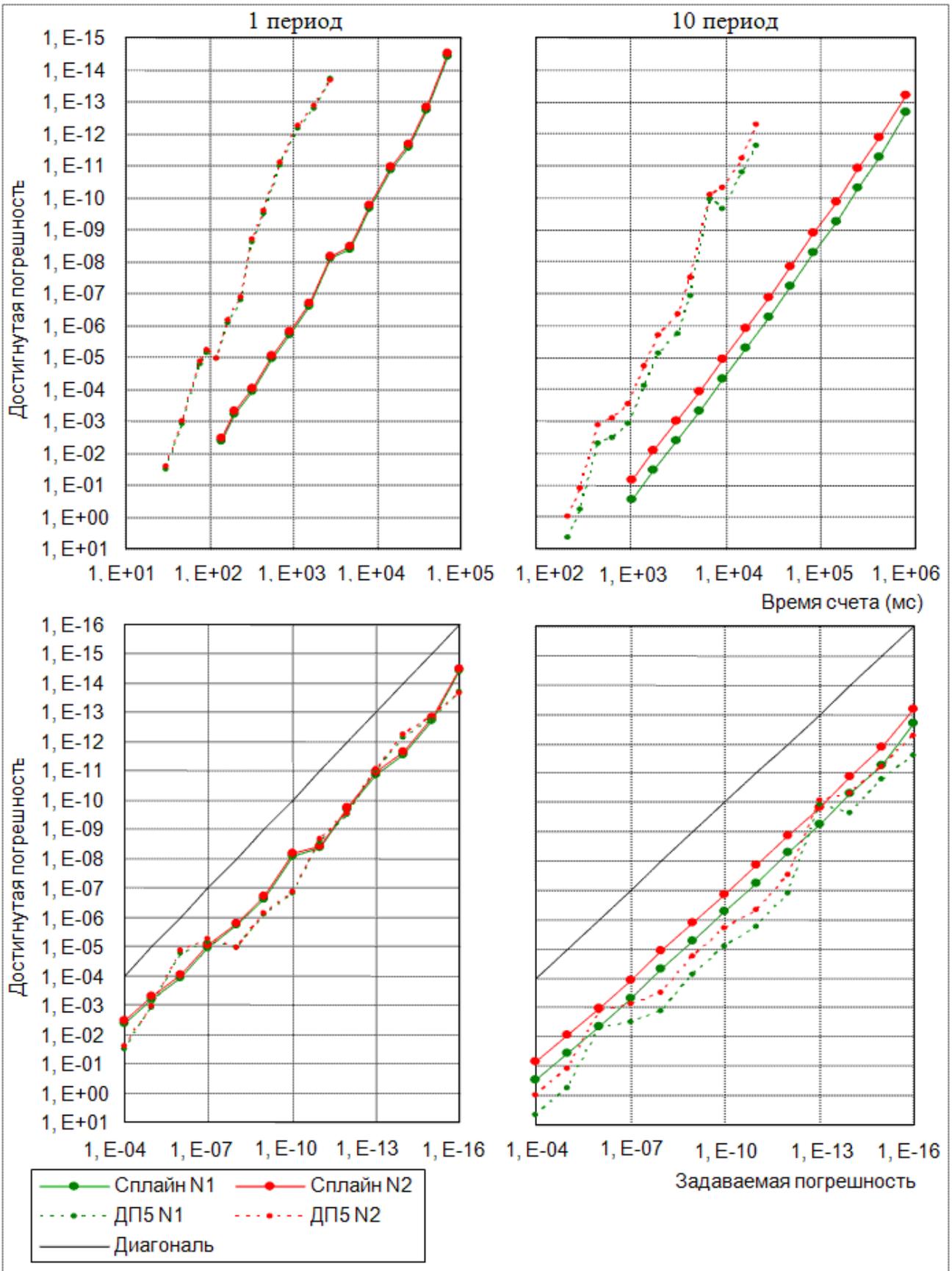


Рис. 6. Сравнение Сплайн4 ($p=4$) и ДП5 ($p=5$) (тестовая задача 2)

Задача 3. Для простоты вычислений из основной сетки было выбрано 12 контрольных точек (7 точек из интервала $t \in [5, 13]$ и 5 точек из интервала $t \in [40, 50]$). На основании результатов экстраполяции было получено эталонное решение.

Таблица 6. Контрольные точки и решение (все значащие цифры верные)

t	$V(t)$	$I(t)$	$C_v(t)$	$C(t)$
Первая группа контрольных точек (G1)				
5,01232675024663714	1671,9269315688	7,14140301730	1589,928132897781	915431,8681271533
6,14075595407569420	5826,269507024	14,397521076639	631,3476431992449	875268,2935386098
8,23034438576807899	8378,573019834	23,598293905044	53,236526099547	779402,75059350186
9,34043506399625805	8172,20390598	25,84114613299	9,3609146425828	718474,1548698833
10,1301127617582812	7681,658130161	26,573096381775	2,5643207342257	671716,5971731703
11,2466053451146953	6760,600926238	26,849298125682	0,6947857022172	601921,0262978826
12,3335640397656522	5813,048675631	26,69358351532	0,41185268892656	531338,18969671144
Вторая группа контрольных точек (G2)				
40,1132030112629963	78,99900986736	19,16865351313	6,991460309E-0012	4,610153356E-0004
44,5070425855490604	39,98043403324	18,18414827070	3,859632E-0017	4,5293575E-0009
46,3236231484816293	30,16915962174	17,792041910947	5,663E-0020	8,4293847E-0012
48,4417097580372086	21,72615367996	17,34551955879	6E-0024	1,3208495E-0015
50,0000000000000000	17,064184375190	17,02418110728	5E-0025	6,58891E-0019

Часть результатов тестирования показаны на рисунках 7 – 10, на которых отображены быстродействие и точность протестированных методов (только для первой компоненты решения) в начале и в конце процесса интегрирования.

На рисунках 7 и 8 можно видеть, что методы сплайн-интегрирования уступают по быстродействию классическим методам, так как в сплайн-методах приходится решать системы нелинейных уравнений размерности пропорциональной числу компонент решения (для задачи из иммунологии их четыре), в то время как классические методы выражаются явными формулами.

На рисунке 9, на котором отображена точность методов сразу после прохождения точки излома, особой разницы между методами не наблюдается. На рисунке 10, на котором отображена точность методов, когда компоненты $C(t)$ и $C_v(t)$ становятся близкими к нулю, классические методы достигают лучшей точности, чем сплайн-методы.

Таким образом, методы сплайн-интегрирования являются более трудоемкими по сравнению с классическими методами, особенно при большом количестве компонент решения и в тоже время более точными при оценке достигнутой погрешности. Главным их достоинством является вид получаемого решения: его аналитическое представление в виде непрерывно-дифференцируемой функции.

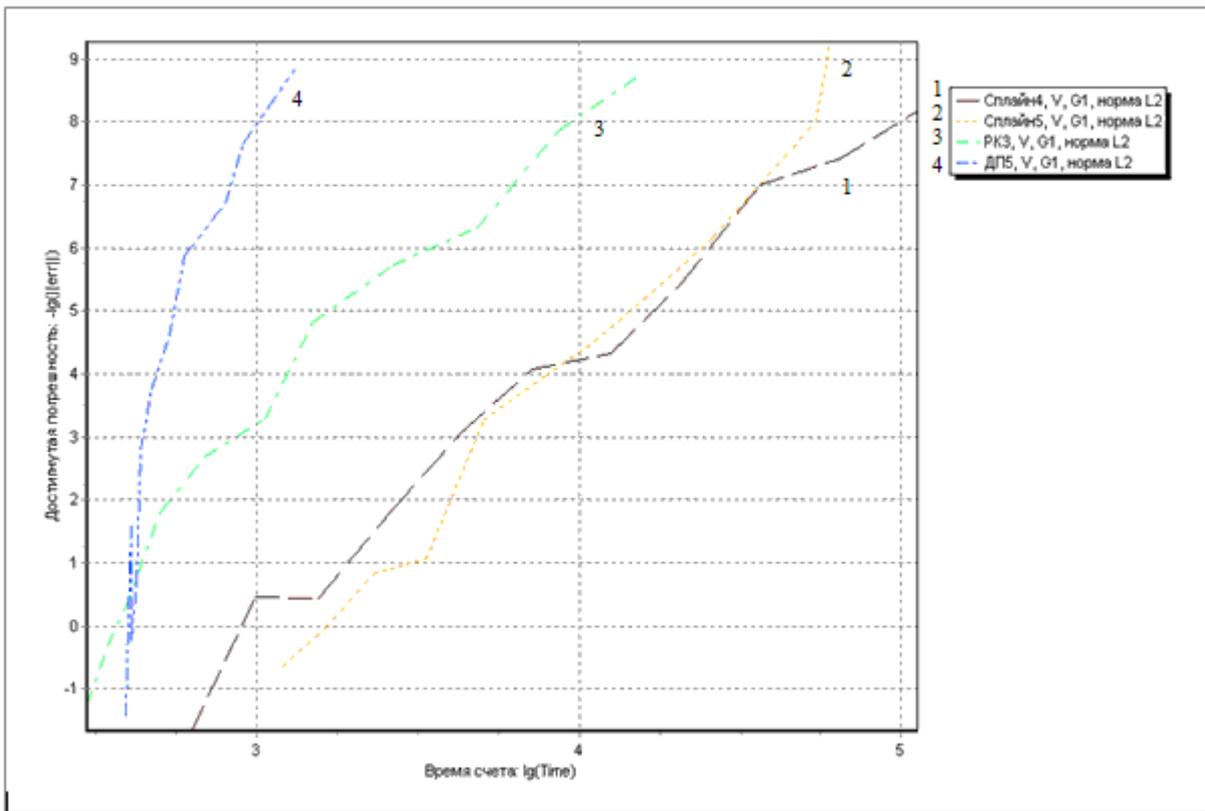


Рис. 7. Зависимость достигнутой точности от времени счета (компонента V, гр. G1) (тестовая задача 3)

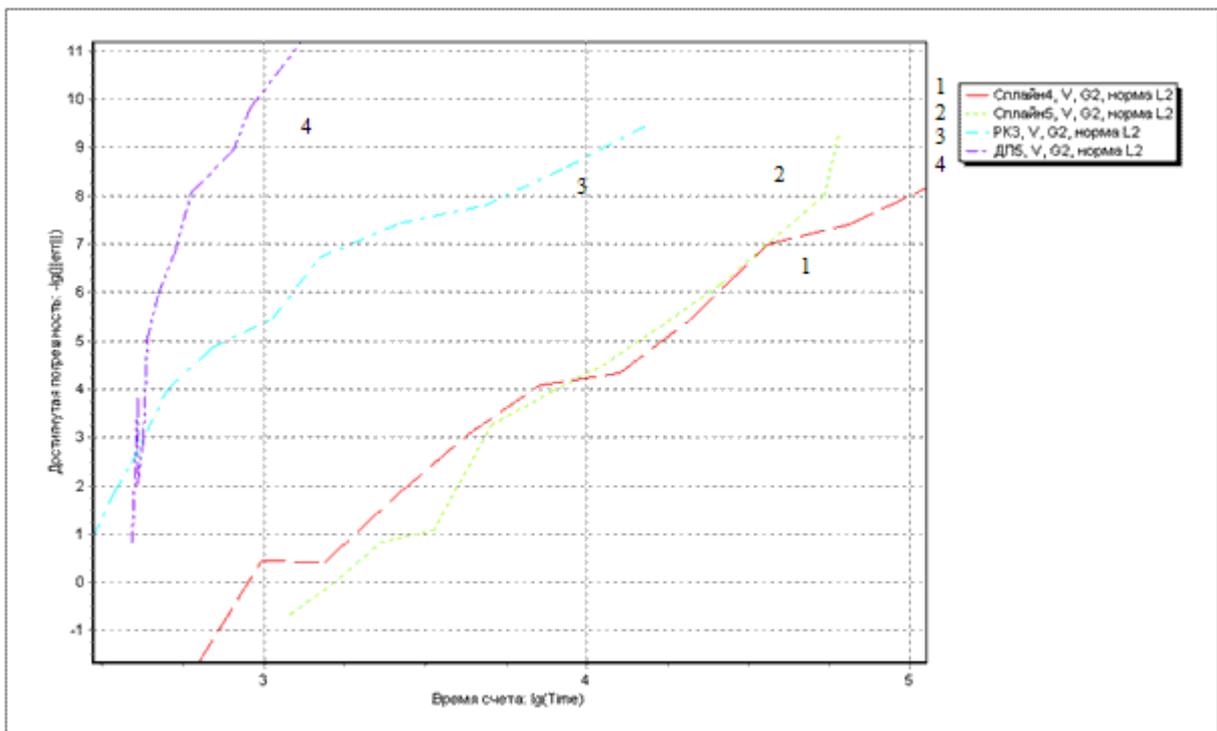


Рис. 8. Зависимость достигнутой точности от трудоемкости (компонента V, гр. G2) (тестовая задача 3)

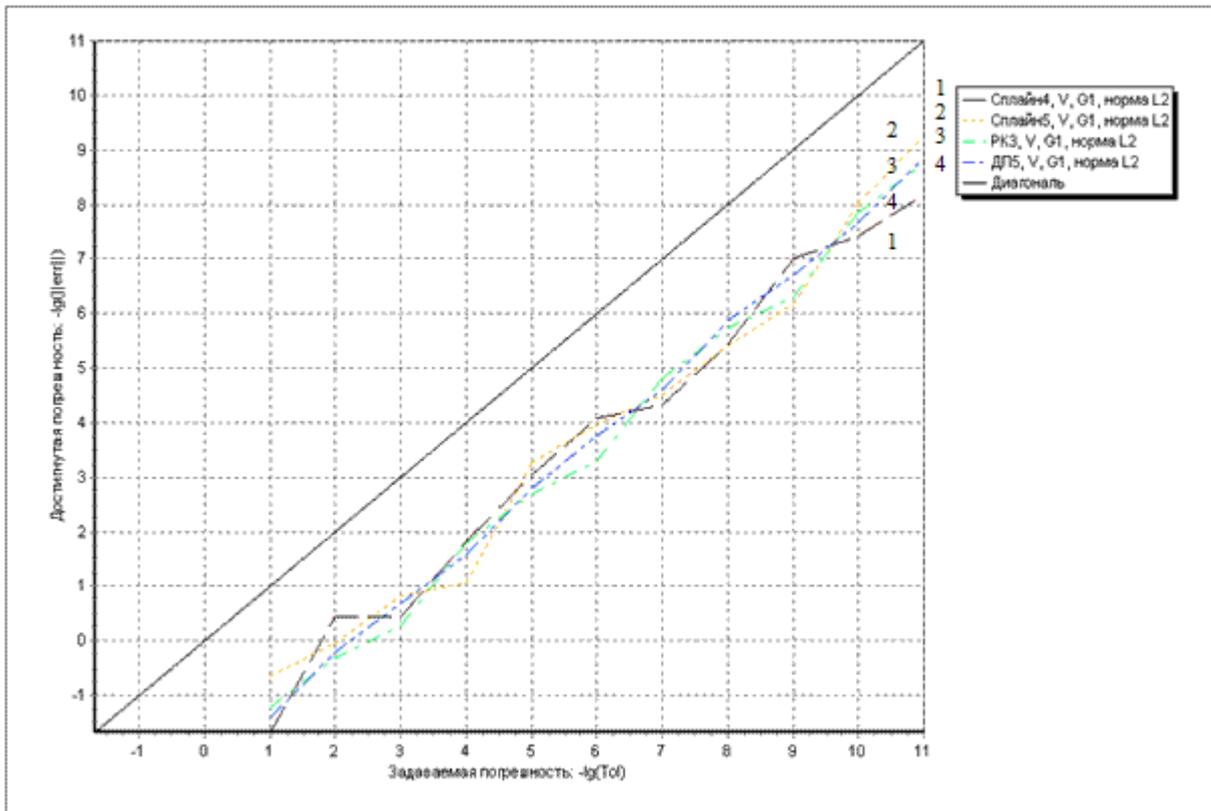


Рис. 9. Зависимость достигнутой точности от задаваемой (компонента V, гр. G1) (тестовая задача 3)

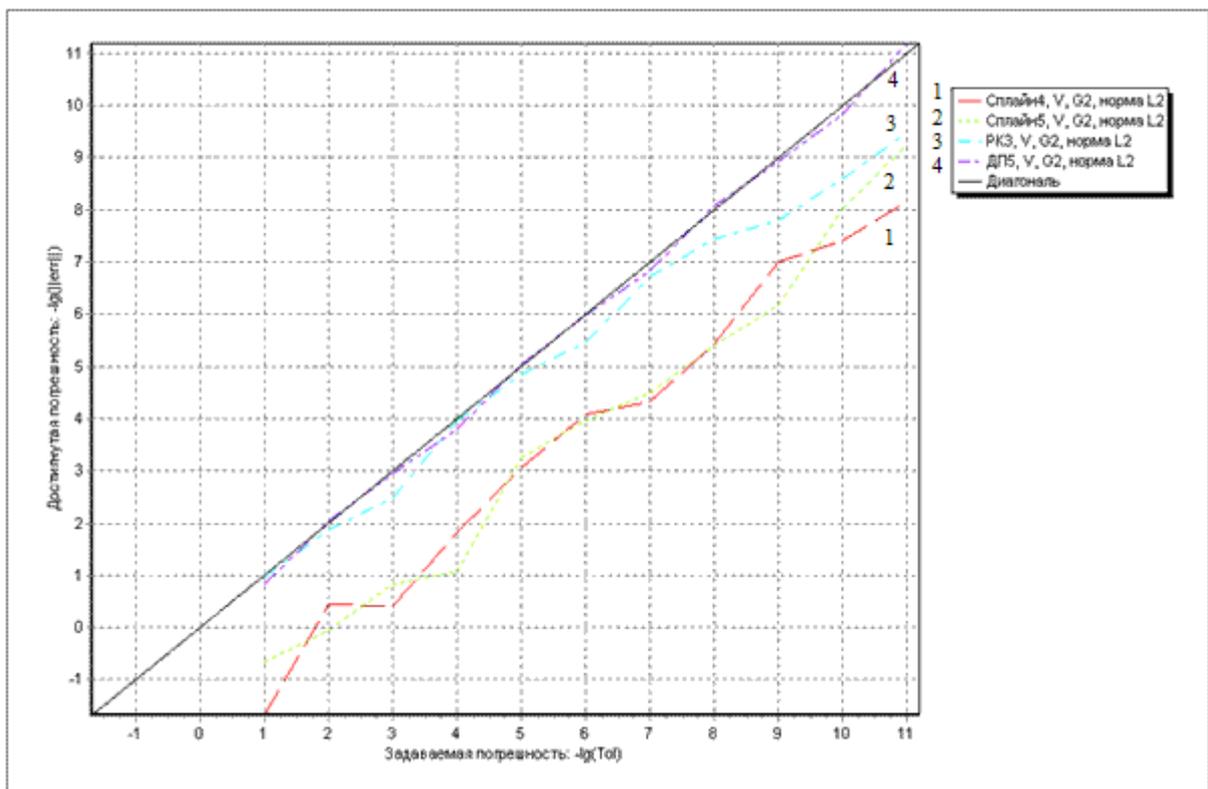


Рис. 10. Зависимость достигнутой точности от задаваемой (компонента V, гр. G2) (тестовая задача 3)

Список литературы

1. Мышкис А.Д. Линейные дифференциальные уравнения с запаздывающим аргументом. – М.: Наука, 1972.
2. Эльсгольц Л.Э., Норкин С.Б. Введение в теорию дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. – М.: Наука, 1971. – С. 296.
3. Марчук Г.И. Математические модели в иммунологии. – М.: Наука, 1997. – С. 40.
4. Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений: Не жесткие задачи. – М.: Мир, 1990. – С. 512.
5. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений: Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999. – С. 685.
6. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. – М.: Мир, 1988. – С. 334.
7. Gustafsson K. Control of Error and Convergence in ODE Solvers. – Department of Automatic Control, Lund Institute of Technology, Sweden, 1992. – P. 184.
8. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: БИНОМ. Лаборатория Знаний, 2003. – С. 632.
9. Backer C. T. H., Bocharov G.A. Computational aspects of time-lag models of Marchuk type that arise in immunology // Rus. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2005. –Vol. 20. – № 3. – Pp. 247-262
10. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко Б.Л. Методы сплайн-функций. – М.: Наука, 1980. – С. 355.
11. Ширков П.Д. AN- устойчивость ROW методов. // Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. – № 16. – 2001. – С. 20.
12. Лобанов А.И., Петров И.Б., Старожилова Т.К. Вычислительные методы для анализа моделей сложных динамических систем. Ч. II.: Учебное пособие. – МФТИ, 2002. – С. 155.
13. Bocharov G. A., Cervantes-Barragan L., Zust R., Eriksson K., Thiel V., Ludewig B. Mathematical modeling of the antiviral type I interferon response. Proceeding of the FOSBE 2007 – Stuttgart, Germany, September 9 – 12, 2007.