УДК 519.622

© 2015 г. **Е.А. Новиков**, д-р физ.-мат. наук
(Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск)

# МЕТОД ТИПА РОЗЕНБРОКА ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА С ВНУТРЕННЕЙ *L*-УСТОЙЧИВОСТЬЮ*

Построен *L*-устойчивый метод типа Розенброка третьего порядка точности, в котором промежуточные численные формулы тоже *L*-устойчивые. Получено неравенство для контроля точности вычислений с применением вложенного метода второго порядка. Сформулирован алгоритм интегрирования переменного шага. Приведены результаты расчетов.

***Ключевые слова:*** жесткая система, метод Розенброка, оценка ошибки, переменный шаг.

## Введение

Проблема решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности возникает во многих важных прикладных задачах: при моделировании физических и химических процессов, при расчете радиоэлектронных схем и электрических цепей, при моделировании динамики механических и электроэнергетических систем, при аппроксимации уравнений в частных производных системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Учет большого числа факторов при построении математических моделей расширяет класс задач, описываемых жесткими системами [1, 2]. Сложность практических задач приводит к возрастающим требованиям к вычислительным алгоритмам.

Для численного решения жестких задач обычно применяются *L*-устойчивые методы [1]. При реализации таких численных схем на каждом шаге решается линейная система алгебраических уравнений с применением LU-разложения некоторой матрицы, размерность которой совпадает с размерностью вектора решения. В силу плохой обусловленности матрицы Якоби жесткой системы дифференциальных уравнений решение алгебраической системы осуществляется с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице. При большой размерности исходной задачи общие вычислительные затраты фактически полностью определяются временем декомпозиции данной матрицы.

В последнее время при решении жестких задач широкое распространение

* Работа поддержана РФФИ (проект 14-01-00047).

получили методы типа Розенброка [3], которые относятся к одношаговым безытерационным численным формулам. В отличие от неявных или полуявных методов типа Рунге-Кутты в данных численных схемах матрица Якоби введена непосредственно в вычислительную формулу. В результате вместо решения нелинейных систем алгебраических уравнений на каждом шаге несколько раз решается линейная система. Кроме того, в методах типа Розенброка достаточно легко оценить вычислительные затраты на шаг до начала вычислений. Довольно полное исследование этих методов содержится в [1, 4].

Здесь для решения жестких задач разработан $L$-устойчивый трехстадийный метод типа Розенброка третьего порядка точности. При определении стадий данного метода в двух точках приближенное решение вычисляется по промежуточным или внутренним численным схемам, для которых тоже выполняется свойство $L$-устойчивости. Построено неравенство для контроля точности вычислений с применением вложенной схемы второго порядка. Сформулирован алгоритм переменного шага. Приведены результаты расчетов.

## Трехстадийный метод типа Розенброка

Рассмотрим задачу Коши для жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$y' = f(y),\ y(t_0) = y_0,\ t_0 \le t \le t_k, \tag{1}$$

где $y$ и $f$ – вещественные N-мерные вектор-функции; $t$ – независимая переменная. Идея методов типа Розенброка заключается во введении матрицы Якоби непосредственно в численную формулу, что приводит на каждом шаге к необходимости решения линейной системы алгебраических уравнений. Это существенно упрощает программную реализацию алгоритмов интегрирования. Отметим, что в неявных и полуявных схемах типа Рунге-Кутта необходим итерационный процесс типа ньютоновского.

Рассмотрим численную формулу вида

$$\begin{aligned} &y_{n+1} = y_n + p_1k_1 + p_2k_2 + p_3k_3, \\ &D_nk_1 = hf(y_n),\ D_nk_2 = hf(y_n + \beta_{21}k_1), \\ &D_nk_3 = hf(y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2), \end{aligned} \tag{2}$$

где $h$ – шаг интегрирования; $D_n = E + ahf_n'$; $E$ – единичная матрица; $f_n' = \partial f(y_n)/\partial y$ – матрица Якоби системы (1); $a$, $p_i$ и $\beta_{ij}$ – числовые коэффициенты.

## Условия порядка

Разложим стадии $k_i$, $1 \le i \le 3$, по степеням $h$ и подставим в первую формулу (2). Получим

$$\begin{aligned} y_{n+1} = y_n &+ (p_1 + p_2 + p_3)hf_n + [ap_1 + (a+\beta_{21})p_2 + (a+\beta_{31}+\beta_{32})p_3]h^2 f_n' f_n + \\ &+ \left\{a^2p_1 + \left(a^2 + 2a\beta_{21}\right)p_2 + \left[a^2 + 2a(\beta_{31}+\beta_{32}) + \beta_{21}\beta_{32}\right]p_3\right\}h^3 f_n'^2 f_n + \\ &+ \frac{1}{2}\left[\beta_{21}^2 p_2 + (\beta_{31}+\beta_{32})^2 p_3\right]h^3 f_n'' f_n^2 + \end{aligned}$$

$$+\left\{a^3 p_1+\left(a^3+3a^2\beta_{21}\right)p_2+\left[a^3+3a^2\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)+3a\beta_{21}\beta_{32}\right]p_3\right\}h^4 f_n'^3 f_n+$$

$$+\left\{a\beta_{21}^2 p_2+\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)\left[a\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)+\beta_{21}\beta_{32}\right]p_3\right\}h^4 f_n'' f_n' f_n^2+$$

$$+\frac{1}{2}\left\{a\beta_{21}^2 p_2+\left[\beta_{21}^2\beta_{32}+a\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)^2\right]p_3\right\}h^4 f_n' f_n'' f_n^2+$$

$$+\frac{1}{6}\left\{\beta_{21}^3 p_2+\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)^3 p_3\right\}h^4 f_n''' f_n^3+O\left(h^5\right).$$

Ряд Тейлора для точного решения $y(t_{n+1})$ в окрестности точки $t_n$ имеет вид

$$y(t_{n+1})=y(t_n)+hf+\frac{1}{2}h^2 f'f+\frac{1}{6}h^3\left[f'^2 f+f''f^2\right]+$$
$$+\frac{1}{24}h^4\left[f'^3 f+f'f''f^2+3f''f'f^2+f'''f^3\right]+O(h). \qquad (3)$$

Полагая $y_n = y(t_n)$ и сравнивая ряды для точного и приближенного решений до членов с $h^3$ включительно, получим условия третьего порядка точности схемы (2), которые записываются следующим образом:

$$p_1+p_2+p_3=1,$$
$$ap_1+\left(a+\beta_{21}\right)p_2+\left(a+\beta_{31}+\beta_{32}\right)p_3=\frac{1}{2},$$
$$\beta_{21}^2 p_2+\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)^2 p_3=\frac{1}{3}, \qquad (4)$$
$$a^2 p_1+\left(a^2+2a\beta_{21}\right)p_2+\left[a^2+2a\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)+\beta_{21}\beta_{32}\right]p_3=\frac{1}{6}.$$

Локальная ошибка $\delta_{n,3}$ численной формулы (2) с коэффициентами (4) имеет вид:

$$\delta_{n,3}=\left\{\frac{1}{24}-a^3 p_1-\left(a^3+3a^2\beta_{21}\right)p_2-\left[a^3+3a^2\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)+3a\beta_{21}\beta_{32}\right]p_3\right\}h^4 f_n'^3 f_n+$$
$$+\left\{\frac{1}{8}-a\beta_{21}^2 p_2-\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)\left[a\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)+\beta_{21}\beta_{32}\right]p_3\right\}h^4 f_n'' f_n' f_n^2+$$
$$+\left\{\frac{1}{24}-\frac{1}{2}a\beta_{21}^2 p_2-\frac{1}{2}\left[\beta_{21}^2\beta_{32}+a\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)^2\right]p_3\right\}h^4 f_n' f_n'' f_n^2+$$
$$+\left\{\frac{1}{24}-\frac{1}{6}\beta_{21}^3 p_2-\frac{1}{6}\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)^3 p_3\right\}h^4 f_n''' f_n^3+O\left(h^5\right).$$

Упростим систему (4). Для этого подставим первое равенство во второе и четвертое соотношения (4). Обозначая $\beta = \beta_{31} + \beta_{32}$, имеем

$$p_1+p_2+p_3=1,$$
$$\beta_{21}p_2+\beta p_3=\frac{1}{2}-a,\;\; \beta_{21}^2 p_2+\beta^2 p_3=\frac{1}{3},\;\; \beta_{21}\beta_{32}p_3=\frac{1}{6}-a+a^2, \qquad (5)$$

причем локальная ошибка $\delta_{n,3}$ переписывается в виде

$$\delta_{n,3}=\left(\frac{1}{24}-a^3+\frac{3}{2}a^2-\frac{1}{2}a\right)h^4 f'^3 f+\left[\frac{1}{8}-\frac{1}{3}a-\left(\frac{1}{6}-a+a^2\right)\cdot\beta\right]h^4 f f'' f' f^2+$$
$$+\left[\frac{1}{12}-\frac{1}{3}a-\beta_{21}\left(\frac{1}{6}-a+a^2\right)\right]h^4 f f' f'' f^2+$$
$$+\left[\frac{1}{4}-\beta_{21}^3 p_2-\beta^3 p_3\right]h^4 f''' f^3+O\left(h^5\right).$$

## Исследование устойчивости

Исследование устойчивости численной формулы (2) проведем на тестовом уравнении Далькквиста [5]

$$y'=\lambda y,\ y\left(0\right)=y_0,\ t\geq 0, \tag{6}$$

где $\lambda$ есть комплексное число, Re($\lambda$) < 0. Смысл $\lambda$ – произвольное собственное число матрицы Якоби системы (1). Записывая стадии метода (2) применительно к решению тестовой задачи, имеем

$$k_1=\frac{x}{1-ax}\cdot y_n,\ k_2=\frac{x+\left(\beta_{21}-a\right)x^2}{\left(1-ax\right)^2}\cdot y_n,$$

$$k_3=\frac{x+\left(\beta_{31}+\beta_{32}-2a\right)x^2+\left[a^2-a\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)+\beta_{21}\beta_{32}\right]x^3}{\left(1-ax\right)^3}\cdot y_n,$$

где $x = h\lambda$. Подставляя полученные представления стадий в первую формулу (2), получим $y_{n+1} = Q(x)y_n$, где $Q(x)$ называют функцией устойчивости метода (2). Она имеет вид

$$Q\left(x\right)=\frac{1+\left(1-3a\right)x+\left[3a^2-2a+\beta_{21}p_2+\left(\beta_{31}+\beta_{33}\right)p_3\right]x^2}{\left(1-ax\right)^3}-$$
$$-\frac{\left\{a^3-a^2p_1+a\left(\beta_{21}-a\right)p_2-\left[a^2-a\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)+\beta_{21}\beta_{32}\right]p_3\right\}x^3}{\left(1-ax\right)^3}.$$

Необходимым условием $L$-устойчивости является требование того, чтобы степень многочлена в числителе была на единицу меньше степени полинома в знаменателе. Нетрудно видеть, что это требование будет выполнено, если имеет место соотношение

$$a^3-a^2p_1+a\left(\beta_{21}-a\right)p_2-\left[a^2-a\left(\beta_{31}+\beta_{32}\right)+\beta_{21}\beta_{32}\right]p_3=0.$$

Учитывая соотношения (5), условие $L$-устойчивости записывается в виде

$$a^3-3a^2+\frac{3}{2}a-\frac{1}{6}=0.$$

Данное уравнение имеет три вещественных корня: $a_1$ = 2.40514957850286; $a_2$ = 0.158983899988677; $a_3$ = 0.435866521508459. Согласно [6], схема (2) будет дополнительно $A$-устойчивой, если параметр $a$ удовлетворяет неравенству $1/3 \le a \le$ $\le 1.0685790$. В результате ниже будем полагать значение коэффициента $a$ равным 0.435866521508459, при котором численная схема (2) является $L$-устойчивой.

При расчетах по схеме (2) в двух промежуточных точках $(t_n + (\beta_{31} + \beta_{32})\cdot h)$ и $(t_n + \beta_{21}\cdot h)$ вычисляются приближенные решения $y_{n+1,\alpha}$ и $y_{n+1,\beta}$ соответственно по внутренним численным формулам

$$y_{n+1,\alpha} = y_n + \beta_{21}k_1,\ y_{n+1,\beta} = y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2. \qquad (7)$$

Исследуем устойчивость методов (7). Применяя их для решения тестового уравнения (6), имеем $y_{n+1,\alpha} = Q_\alpha(x)\cdot y_n$ и $y_{n+1,\beta} = Q_\beta(x)\cdot y_n$, где функции устойчивости $Q_\alpha(x)$ и $Q_\beta(x)$ внутренних схем имеют вид

$$Q_\alpha(x) = \frac{1+(\beta_{21}-a)x}{1-ax}\cdot y_n,$$

$$Q_\beta(x) = \frac{1+(\beta_{31}+\beta_{32}-2a)x+\left[a^2-a\beta+\beta_{21}\beta_{32}\right]x^2}{(1-ax)^2}\cdot y_n,$$

где $\beta = \beta_{31} + \beta_{32}$. Требование $L$-устойчивости промежуточных численных схем приводят к двум дополнительным соотношениям на коэффициенты

$$\beta_{21} - a = 0,\ a^2 - a\beta + \beta_{21}\beta_{32} = 0.$$

### Исследование совместности условий порядка и устойчивости

Учитывая равенство $\beta_{21} = a$, перепишем условия порядка и устойчивости

$$\begin{aligned}&1)\, p_1+p_2+p_3=1,\ 2)\, ap_2+\beta p_3=\frac{1-2a}{2},\ 3)\, a^2p_2+\beta^2p_3=\frac{1}{3},\\ &4)\, \beta_{32}p_3=\frac{6a^2-6a+1}{6a},\ 5)\, \beta_{32}=\beta-a,\ 6)\, \beta=\beta_{31}+\beta_{32}.\end{aligned} \qquad (8)$$

Исследуем совместность нелинейной алгебраической системы (8). Вычтем из третьего уравнения второе, умноженное на коэффициент $a$. Затем перепишем четвертое равенство, учитывая пятое соотношение (8). Получим:

$$\beta(\beta-a)p_3 = \frac{6a^2-3a+2}{6},\ (\beta-a)p_3 = \frac{6a^2-6a+1}{6a}.$$

Отсюда при условии $\beta \ne a$ и $p_3 \ne 0$ имеем $\beta = \dfrac{a(6a^2-3a+2)}{6a^2-6a+1}$. Тогда с помощью пятого уравнения (8) вычислим $\beta_{32}$, а из шестого уравнения имеем $\beta_{31} = a$. Из четвертого уравнения (8) получим $p_3 = \dfrac{6a^2-6a+1}{6a(\beta-a)}$, а из второго равенства имеем $p_2 = \dfrac{1-2a-2\beta p_3}{2a}$. Оставшийся коэффициент $p_1$ определим из первого уравнения (8). В результате получим коэффициенты $L$-устойчивого метода (2) третьего порядка точности, промежуточные численные схемы которого тоже являются $L$-устойчивыми. Данные коэффициенты имеют вид:

$a = 0.435866521508459$, $p_1 = \beta_{21} = \beta_{31} = a$, $\beta = \dfrac{a\left(6a^2 - 3a + 2\right)}{6a^2 - 6a + 1}$,

$\beta_{32} = \beta - a$, $p_3 = \dfrac{6a^2 - 6a + 1}{6a(\beta - a)}$, $p_2 = \dfrac{1 - 2a - 2\beta p_3}{2a}$, $p_1 = 1 - p_2 - p_3$.

Для расчетов с двойной точностью вычислим
$p_1 = \beta_{21} = \beta_{31} = a = 0.435866521508459$, $\beta_{32} = -2.116053335949811$,
$p_2 = 0.4782408332745185$, $p_3 = 0.0858926452170225$.

## Контроль точности вычислений

В жестких задачах для методов третьего порядка поведение ошибки определяется элементарным дифференциалом $f'^3$f [7, 8], который называют главным членом. Поэтому при построении оценки ошибки будем учитывать только первое слагаемое в локальной ошибке. Для организации контроля точности вычислений и автоматического выбора величины шага интегрирования поступим по аналогии [9, 10]. Для оценки ошибки используем идею вложенных методов. Рассмотрим двухстадийную численную формулу

$$y_{n+1,2} = y_n + b_1k_1 + b_2k_2,\ D_nk_1 = hf\left(y_n\right),\ D_nk_2 = hf\left(y_n + \beta_{21}k_1\right), \tag{9}$$

где приближение $y_n$ вычислено по формуле (2), $\beta_{21} = a$. Отметим, что в численной формуле (9) применяются стадии метода (2), и поэтому применение (9) практически не приводит к увеличению вычислительных затрат.

Потребуем, чтобы численная схема (9) имела второй порядок точности. Ряд Тейлора для приближенного решения $y_{n+1,2}$ имеет вид

$$y_{n+1,2} = y_n + \left(b_1 + b_2\right)hf_n + \left[ab_1 + \left(a + \beta_{21}\right)b_2\right]h^2 f_n' f_n + O\left(h^3\right).$$

Сравнивая полученное представление приближенного решения с рядом Тейлора для точного решения (3), получим, что метод (9) будет иметь второй порядок, если $b_1 + b_2 = 1$, $ab_1 + \left(a + \beta_{21}\right)b_2 = 0.5$ или $b_1 + b_2 = 1$, $ab_2 = 0.5 - a$. Отсюда следует, что при значениях коэффициентов $b_1 = \dfrac{4a-1}{2a}$, $b_2 = \dfrac{1-2a}{2a}$ схема (9) имеет второй порядок точности, а ее локальная ошибка $\delta_{n,2}$ получается в виде:

$$\delta_{n,2} = \frac{6a^2 - 6a + 1}{6}h^3 f'^2 f + \frac{6a^2 - 3a + 2}{12}h^3 f'' f^2 + O\left(h^4\right).$$

Локальная ошибка $\delta_{n,3}$ схемы (2) записывается следующим образом:

$$\delta_{n,3} = \frac{1 - 12a + 36a^2 - 24a^3}{24}h^4 f'^3 f + O\left(h^4\right).$$

Учитывая вид локальных ошибок $\delta_{n,2}$ и $\delta_{n,3}$ в неравенстве,
для контроля точности можно применять оценку ошибки $\varepsilon_n$ вида [9, 10]:

$$\varepsilon_n = \frac{1 - 12a + 36a^2 - 24a^3}{4\left(6a^2 - 6a + 1\right)}\left(y_{n+1} - y_{n+1,2}\right).$$

Подчеркнем особенность построенной оценки. Из вида функции устойчивости $Q(x)$ следует, что при $x \to -\infty$ выполняется соотношение $|Q(x)| \to 0$. Для точного решения $y(t_{n+1}) = \exp(x)y(t_n)$ задачи (6), выполняется аналогичное свойство. Тогда естественным будет требование стремления к нулю оценки ошибки $\varepsilon_n$ при $x \to -\infty$. Однако для построенной оценки имеет место $\varepsilon_n = O(1)$, потому что метод второго порядка (9) при используемом значении коэффициента $a$ не является $L$-устойчивым. Для исправления асимптотического поведения ошибки вместо $\varepsilon_n$, рассмотрим оценки $\varepsilon_n(j_n)$ вида

$$\varepsilon_n\left(j_n\right)=\frac{1-12a+36a^2-24a^3}{4\left(6a^2-6a+1\right)}D_n^{1-j_n}\left(y_{n+1}+y_{n+1,2}\right).$$

При $j_n = 1$ оценка $\varepsilon_n(j_n)$ совпадает с $\varepsilon_n$ и будет $A$-устойчивой, а при $j_n = 2$ − $L$-устойчивой. Теперь неравенство для контроля точности имеет вид [9]:

$$\left\|D_n^{1-j_n}\left(y_{n+1}+y_{n+1,1}\right)\right\|\le c\cdot\varepsilon,\ \ 1\le j_n\le 2, \tag{10}$$

где $c = 4\cdot|(6a^2 - 6a + 1)/(1 - 12a + 36a^2 - 24a^3)| \approx 3$; $\|\cdot\|$ – некоторая норма в $R^N$; $\varepsilon$ – требуемая точность интегрирования, а параметр $j_n$ выбирается наименьшим значением, при котором выполняется неравенство (10).

Заметим, что в смысле главного члена оценки $\varepsilon_n(1)$ и $\varepsilon_n(2)$ совпадают. Неравенство (10) при $j_n = 2$ проверяется редко, в основном при резком увеличении шага интегрирования. Поэтому применение $\varepsilon_n(j_n)$ вместо $\varepsilon_n$ к значительному росту вычислительных затрат не приводит. Более того, за счет применения $\varepsilon_n(j_n)$ эффективность расчетов повышается более чем на 10%.

## Алгоритм интегрирования

Норма $\|\xi\|$ в левой части неравенства (10) вычисляется по формуле

$$\|\xi\|=\max_{1\le i\le N}\left\{\left|\xi_i\right|/\left(\left|y_n^i\right|+r\right)\right\},$$

где $r$ – положительный параметр. В случае выполнения неравенства $|y_n^i| < r$ по $i$-й компоненте решения контролируется абсолютная ошибка $r\cdot\varepsilon$. В противном случае контролируется относительная ошибка $\varepsilon$. Иногда с целью повышения надежности расчетов задают набор параметров $r_i$, $1 \le i \le N$.

Теперь сформулируем алгоритм интегрирования. Пусть приближение $y_n$ к решению $y(t_n)$ задачи (1) вычислено в точке $t_n$ с шагом $h_n$. Учитывая $\varepsilon_n(j_n) = O(h_n^3)$, $1 \le j_n \le 2$ , алгоритм интегрирования формулируется следующим образом.

Шаг 1. Вычисляется матрица Якоби.

Шаг 2. Формируется матрица $D_n = E + ahf_n'$.

Шаг 3. Вычисляются стадии $k_1$, $k_2$ и $k_3$ по формулам (2).

Шаг 4. Вычисляется оценка ошибки $\varepsilon_n(1)$.

Шаг 5. Вычисляется величина $q_1$ по формуле $q_1^3\cdot\|\varepsilon_n(1)\| = c\cdot\varepsilon$.

Шаг 6. Если $q_1 < 1$, т.е. требуемая точность не выполнена, вычисляется $\varepsilon_n(2)$. В противном случае $\varepsilon_n(2)$ полагается равным $\varepsilon_n(1)$.

Шаг 7. Вычисляется значение параметра $q_2$ по формуле $q_2^3\cdot\|\varepsilon_n(2)\| = c\cdot\varepsilon$.

Шаг 8. Если $q_2 < 1$, то $h_n$ полагается равным $\min(q_1,q_2)\cdot h_n$, и происходит повторное вычисление решения – возврат на шаг 2.

Шаг 9. Вычисляется приближение к решению в точке $t_{n+1}$ по формуле (2).

Шаг 10. Вычисляется значение прогнозируемого шага $h_{n+1} = \min(q_1,q_2)\cdot h_n$.

Шаг 11. Выполняется следующий шаг интегрирования.

## Результаты расчетов

Работоспособность построенного алгоритма интегрирования проверена на реакции пиролиз этана в отсутствии кислорода, которая описывается последовательностью элементарных стадий вида [11]:

$$C_2H_6 \to CH_3{+}CH_3, \quad CH_3{+}C_2H_6 \to CH_4{+}C_2H_5, \quad C_2H_5 \to C_2H_4{+}H,$$
$$H{+}C_2H_6 \to H_2{+}C_2H_5, \quad C_2H_5{+}C_2H_5 \to C_4H_{10}.$$

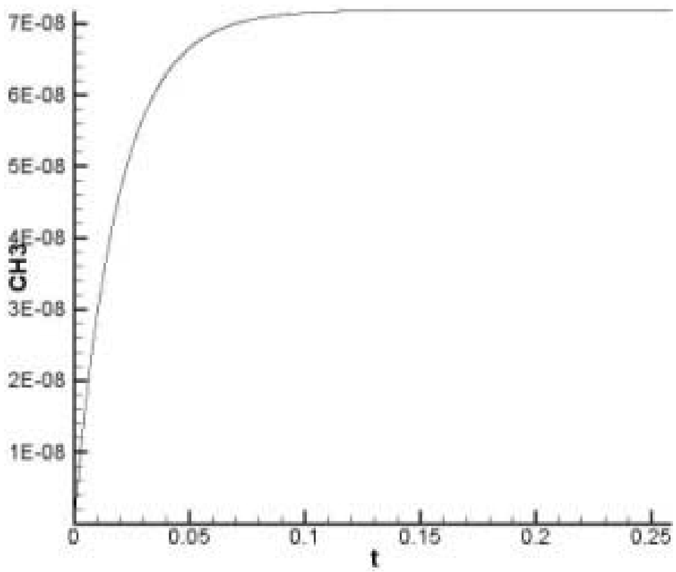
Константы скоростей стадий имеют вид: $k_1 = 1.34\cdot 10^{-5}$, $k_2 = 3.73\cdot 10^{2}$, $k_3 = 3.69\cdot 10^{3}$, $k_4 = 3.66\cdot 10^{5}$, $k_5 = 1.62\cdot 10^{7}$. Обозначим концентрации реагентов следующим образом:

$$c_1 = [C_2H_6],\ c_2 = [CH_3],\ c_3 = [CH_4],\ c_4 = [C_2H_5],$$
$$c_5 = [C_2H_4],\ c_6 = [H],\ c_7 = [H_2],\ c_8 = [C_4H_{10}].$$

Тогда соответствующая система состоит из 8 обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\begin{aligned} &c_1' = -k_1c_1 - k_2c_1c_2 - k_4c_1c_6,\ c_2' = 2k_1c_1 - k_2c_1c_2,\\ &c_3' = k_2c_1c_2,\ c_4' = k_2c_1c_2 - k_3c_4 + k_4c_1c_6 - 2k_5c_4^2,\\ &c_5' = k_3c_4,\ \ c_6' = k_3c_4 - k_4c_1c_6,\ c_7' = k_4c_1c_6,\ \ c_8' = k_5c_4^2. \end{aligned} \tag{11}$$

Начальная концентрация этана $c_1 = [C_2H_6]$ равна 0.14, для остальных реагентов концентрации равны нулю. Численное решение осуществлялось на промежутке [0,0.26] [11]. Данная задача удовлетворяет ”классическому” определению жесткости. В начале интервала интегрирования наблюдается переходный участок (сотые доли секунды), а затем происходит медленное установление. Зависимость $c_2 = [CH_3]$ показана на рисунке.



Зависимость $c_2 = [CH_3]$.

Решение в конце интервала интегрирования имеет следующий вид:

$$c_1 = 0.1397782,\ c_2 = 0.7184977\cdot 10^{-7},\ c_3 = 0.9030942\cdot 10^{-6},$$
$$c_4 = 0.3352456\cdot 10^{-6},\ c_5 = 0.2204030\cdot 10^{-3},\ c_6 = 0.2418056\cdot 10^{-7},$$
$$c_7 = 0.2203789\cdot 10^{-3},\ c_8 = 0.2718340\cdot 10^{-6}.$$

## Заключение

Построенный алгоритм интегрирования переменного шага основан на *L*-устойчивом трехстадийном методе типа Розенброка третьего порядка точности. В данной численной схеме приближенное решение вычисляется в двух промежуточных точках. Коэффициенты выбраны таким образом, чтобы внутренние схемы тоже обладали свойством L-устойчивости.

В построенной численной схеме на каждом шаге один раз вычисляется матрица Якоби, один раз выполняется декомпозиция матрицы $Dn$ (прямой ход в методе Гаусса с выбором главного элемента), три раза вычисляется функция f и три раза выполняется обратный ход в методе Гаусса. Для выбора величины шага интегрирования применяется оценка ошибки, вычисленная с помощью вложенной численной формулы второго порядка точности. Из результатов расчетов 12 задач [1] и 10 тестовых примеров из области химической кинетики [12] следуют надежность и эффективность неравенства для контроля точности вычислений и автоматического выбора величины шага интегрирования.

Наибольшая эффективность построенного алгоритма достигается при задаваемой точности расчетов $\varepsilon = 10^{-4}$. Это следствие третьего порядка точности численной формулы.

## ЛИТЕРАТУРА


1. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999.
2. *Новиков Е.А., Шорников Ю.В.* Компьютерное моделирование жестких гибридных систем. – Новосибирск: НГТУ, 2012.
3. *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer. – 1963. – № 5. – P.329-330.
4. *Деккер К., Вервер Я.* Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. – М.: Мир, 1988.
5. *Dahlquist G.* A special stability problem for linear multistep methods // BIT. – 1963. – Vol. 3. – P.23-43.
6. *Демидов Г.В., Юматова Л.А.* Исследование некоторых аппроксимаций в связи с A-устойчивостью полуявных методов // Численные методы механики сплошной среды. − 1977. − Т. 8, №3. − С.68-79.
7. *Новиков Е.А.* Явные методы для жестких систем. – Новосибирск: Наука, 1997.
8. *Новиков А.Е., Новиков Е.А.* Численное решение жестких задач с небольшой точностью // Математическое моделирование. − 2010. − Т. 22, №1. − С.46-56.
9. *Новиков Е.А.*Численное моделирование кольцевого модулятора (3,2)-методом решения жестких задач // Информатика и системы управления. – 2011. – №1(27). – С.50-61.
10. *Новиков Е.А.* Моделирование билиарной системы методом Фельберга с контролем точности и устойчивости // Информатика и системы управления.– 2014.– №1(39). – С.42-52.
11. *Kulich D.M., Taylor J.E.* Mathematical simulation of the oxygen ethane reaction // J. Chem. Kinetic. – 1975. – Vol. 8. – P.89-97.
12. *Enright W.H., Hull T.E., Lindberg B.* Comparing numerical methods for the solutions of stiff systems of ODE's // BIT. – 1975. – № 15. – P.10-48.



*Статья представлена к публикации членом редколлегии Е.Л. Ереминым.*



*E-mail:*
*Новиков Евгений Александрович – novikov@icm.krasn.ru.*