

УДК 519.6

## ЯВНЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЁТА ЖЁСТКИХ ЗАДАЧ КОШИ

А. А. Белов<sup>1,2,\*</sup>, член-корреспондент РАН Н. Н. Калиткин<sup>3,\*\*</sup>,  
П. Е. Булатов<sup>1</sup>, Е. К. Жолковский<sup>1</sup>

Поступило 30.10.2018 г.

Предложен явный метод, позволяющий решать жёсткие задачи Коши. Метод использует явные схемы и алгоритм выбора шага, основанный на кривизне интегральной кривой. Для нахождения кривизны построены явные формулы. Для схем Рунге—Кутты с числом стадий до 4 приведены наборы соответствующих коэффициентов схем. Проведена верификация метода на тестовой задаче с известным точным решением. Показано, что метод по точности и надёжности не уступает неявным методам, но кардинально превосходит их по экономичности. Приведён прикладной пример расчёта задач химической кинетики с 9 компонентами и 50 реакциями между ними.

*Ключевые слова:* жёсткая задача Коши, автоматический выбор шага, кривизна в многомерном пространстве, оценки по методу Ричардсона.

DOI: <https://doi.org/10.31857/S0869-56524855553-557>

## 1. ПРОБЛЕМА

Жёсткие задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) возникают во многих прикладных областях. Это задачи химической кинетики, динамические процессы в широкополосной радиоаппаратуре и микросхемах, электрический пробой и подобные процессы с сингулярностями и др. В таких задачах производные отдельных компонент решения (скорости процессов) различаются на много порядков. Расчёт таких задач экономичными явными методами требовал неприемлемо малых шагов. В 1952 г. Далквист доказал теорему о том, что явные методы не могут быть  $A$ -устойчивыми [1]. С тех пор все расчёты задач высокой жёсткости велись по надёжным, но довольно трудоёмким неявным схемам. Много таких схем описано в [2].

Однако не прекращались попытки использовать явные схемы, компенсируя отсутствие  $A$ -устойчивости некоторой стратегией выбора шага: сильно измельчать шаг тогда, когда существенны наиболее быстрые процессы, и увеличивать его при преобладании медленных процессов. Такие стратегии были основаны на использовании вложенных схем или локального сгущения шага. Хорошим примером является употребительная программа DOPRI5 [3].

Однако такие подходы не позволяют построить программы, обеспечивающие заданную точность. Нередко точность удовлетворительна, однако известно много случаев срыва расчёта в таких программах или формального завершения расчёта, но с грубо ошибочными результатами.

Для неявных схем мы предложили иной принцип выбора шага: шаг сильно измельчался на участках большой кривизны интегральной кривой [4, 5]. Этот метод оказался существенно удачнее и позволил построить экономичные неявные методы, обеспечивающие заданную пользователем точность. Однако для этого требовалось не приближённо, а точно вычислять матрицу Якоби от правых частей, что довольно сложно и трудоёмко.

В данной работе построен явный метод вычисления кривизны, использующий стадии явных схем Рунге—Кутты. Этот метод малотрудоёмок и прост. При применении этого метода с явными схемами Рунге—Кутты результаты не уступают по надёжности лучшим неявным схемам, а по экономичности кардинально их превосходят. Метод успешно апробирован на реальных прикладных задачах.

## 2. ПОСТРОЕНИЕ МЕТОДА

## 2.1. Длина дуги

Рассмотрим задачу Коши для системы ОДУ

$$\frac{du_k}{dt} = f_k(\mathbf{u}, t), \quad 1 \leq k \leq K, \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0. \quad (1)$$

Если система жёсткая, то её решение содержит участки быстрого изменения решения — началь-

<sup>1</sup>Московский государственный университет  
им. М. В. Ломоносова

<sup>2</sup>Российский университет дружбы народов, Москва

<sup>3</sup>Институт прикладной математики  
им. М. В. Келдыша, Москва

\*E-mail: [aa.belov@physics.msu.ru](mailto:aa.belov@physics.msu.ru)

\*\*E-mail: [kalitkin@imamod.ru](mailto:kalitkin@imamod.ru)

ный и внутренние пограничные слои (последние называют также контрастными структурами). Численное решение таких задач существенно облегчается, если аргумент  $t$  считать дополнительной компонентой решения  $u_0(t) \equiv t, f_0 \equiv 1$ , а в качестве нового аргумента выбрать длину дуги интегральной кривой

$$dl = \rho dt, \quad \rho = \left(1 + \sum f_k^2\right)^{1/2}. \quad (2)$$

Тогда система (1) принимает вид

$$\frac{du_k}{dl} = F_k(\mathbf{u}), \quad F_k = f_k \rho^{-1}, \quad 0 \leq k \leq K. \quad (3)$$

Система (3) автономна, а её порядок на единицу больше, чем у (1).

### 2.2. Выбор шага

Выбор шага по кривизне интегральной кривой был предложен в [4, 5]. Здесь мы воспользуемся конкретной формулой

$$h = h_0(1 + L^{2\nu}(\kappa, \kappa)^\nu)^{-1/(4\nu)}, \quad (4)$$

$L$  — полный промежуток интегрирования по  $l$ ,  $h_0$  — шаг на почти прямолинейном участке интегральной кривой. Численные расчёты показали, что для сверхжёстких задач целесообразно выбирать  $\nu = \frac{1}{8}$ , а для задач меньшей жёсткости  $\nu = \frac{1}{4}$ .

Выбирая некоторое значение  $h_0$ , строим сетку одновременно с вычислением решения. Тем самым сетка будет адаптирована к данному решению. Если затем уменьшать  $h_0$  в 2, 4, 8, ... раз, то получим набор сеток, последовательно сгущающихся приблизительно (но не точно!) в разы. Этот процесс надо остановить, когда различие решений на соседних сетках станет меньше требуемой погрешности.

### 2.3. Вычисление кривизны

Новый вектор правых частей имеет единичную длину

$$|\mathbf{F}|^2 = \sum F_k^2 = 1. \quad (5)$$

Тем самым правые части (3) образуют единичный вектор касательной к интегральной кривой. Как известно, вектор кривизны в многомерном пространстве есть производная единичного вектора направления по длине дуги

$$\kappa = \frac{d\mathbf{F}}{dl}. \quad (6)$$

Рассмотрим способ вычисления этого вектора.

Вычисления проводятся на некоторой сетке узлов. Чтобы не вводить номер узла сетки, будем обозначать решение на текущем шаге через  $\mathbf{u}$ , на новом —  $\hat{\mathbf{u}}$ , на предыдущем —  $\bar{\mathbf{u}}$ . Тогда простейшая аппроксимация для кривизны вычисляется с использованием предыдущего шага

$$\kappa = \check{h}^{-1}(\mathbf{F} - \check{\mathbf{F}}), \quad \check{h} = l - \check{l}. \quad (7)$$

Погрешность такой аппроксимации составляет всего  $O(h)$ , так величина  $\kappa$  фактически относится к середине предыдущего шага. Однако (7) можно использовать с явными схемами любого типа.

Кроме того, кривизна используется лишь для расчёта длины очередного шага. Поэтому она должна слабо влиять на порядок точности самого решения  $\mathbf{u}$ . Проведённые расчёты подтверждают это.

### 2.4. Схемы Рунге—Кутты (РК)

Для конкретных схем можно построить более точные аппроксимации  $\kappa$ . Например, для явных схем РК можно включить в расчёт промежуточные стадии нового шага и не использовать старый шаг. Мы провели такие построения для схем РК с числом стадий до 4. Приведём полученные результаты.

Явные  $S$ -стадийные схемы РК имеют следующий вид:

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + h \sum_{s=1}^S b_s \mathbf{w}_s, \quad \mathbf{w}_s = \mathbf{F} \left( \mathbf{u} + h \sum_{q=1}^{s-1} a_{sq} \mathbf{w}_q \right). \quad (8)$$

Ограничимся схемами с  $S \leq 4$ . Тогда матрицу Бутчера  $\{a_{sq}\}$  и столбец  $\{b_s\}$  можно подобрать так, чтобы  $S$ -стадийная схема имела аппроксимацию  $O(h^S)$ . Будем использовать только такие схемы.

На текущем шаге рассчитаем величину  $\hat{\kappa}$ , которая будет использоваться для нахождения следующего шага. Для этого используем стадии  $\mathbf{w}_s$  и, вдобавок, величину  $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}})$ , поскольку она всё равно будет вычисляться на следующем шаге. Ищем аппроксимацию в виде

$$\hat{\kappa} = h^{-1} \sum_{q=1}^{S+1} c_q \mathbf{w}_q, \quad \mathbf{w}_{S+1} = \mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}}). \quad (9)$$

Коэффициенты  $c_q, b_q, a_{sq}$  нужно подбирать так, чтобы решение (8) имело аппроксимацию  $O(h^S)$ , а аппроксимация кривизны (9) была как можно лучше. Рекомендуются наборы коэффициентов приведены в табл. 1–4. При  $S = 1, 2$  аппроксимация кривизны есть  $O(h)$ , а при  $S = 3, 4$  —  $O(h^2)$ .

**Таблица 1.** Коэффициенты схемы (8) и кривизны (9) для  $S = 1$

$c_q$	$b_s$	$a_{sq}$
-1	1	—
1	—	—

**Таблица 2.** Коэффициенты схемы (8) и кривизны (9) для  $S = 2$

$c_q$	$b_s$	$a_{sq}$
0	0	0
2	1	$\frac{1}{2}$
2	—	—

**Таблица 3.** Коэффициенты схемы (8) и кривизны (9) для  $S = 3$

$c_q$	$b_s$	$a_{sq}$
$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{9}$	0
-2	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$
$-\frac{8}{3}$	$\frac{4}{9}$	0
4	—	—

**Таблица 4.** Коэффициенты схемы (8) и кривизны (9) для  $S = 4$

$c_q$	$b_s$	$a_{sq}$
1	$\frac{1}{6}$	0
-2	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$
-2	$\frac{1}{3}$	0
0	$\frac{1}{6}$	0
3	—	—

### 3. ВЕРИФИКАЦИЯ МЕТОДА

Предложенные методы верифицировались на задачах с известными точными решениями, содержащими внутренние пограничные слои. В качестве наглядного примера приведём задачу для одного уравнения [4, 5]

$$\frac{du}{dt} = -\lambda(t)(u^2 - a^2)^2(u^2 + a^2)^{-1}. \quad (10)$$

Её точное решение имеет вид

$$u(t) = -2\Lambda(t)a^2\{1 + [1 + 4a^2\Lambda(t)^2]^{1/2}\}^{-1}, \quad (11)$$

$$\Lambda(t) = u^0[(u^0)^2 - a^2]^{-1} + \int_0^t \lambda(\tau)d\tau.$$

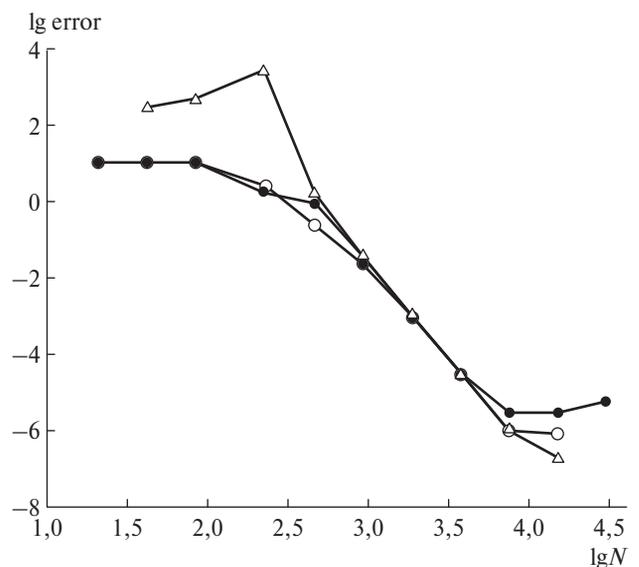
Задача (10) имеет два стационарных решения  $u = \pm a$ . При  $\lambda(t) = \lambda_0 \cos t$  и  $u^0 = 0$  получим  $\Lambda(t) = \lambda_0 \sin t$ .

Тогда при  $\lambda_0 \gg 1$  решение будет попеременно притягиваться к нижнему и верхнему стационарам. Пограничные слои шириной  $\sim \lambda_0^{-1}$  будут располагаться у моментов  $t_k = \pi k$ .

Приведём пример расчёта задачи высокой жёсткости с  $\lambda = 10^4$ . Расчёт проводился по явной четырёхстадийной схеме РК с описанным выбором шага. Решение включало чуть больше одного периода, т.е. захватывало три пограничных слоя, включая начальный. На рис. 1 показан график зависимости погрешности в норме  $L_2$  от полного числа шагов. Погрешность определялась двумя способами: первый — непосредственным сравнением с точным решением, второй — по внутреннему контролю при помощи сравнения решений на двух соседних сетках и применения ричардсоновской оценки. Оба способа дали практически совпадающие кривые.

Видно, что кривая в двойном логарифмическом масштабе выходит на прямую линию, что свидетельствует о степенном характере сходимости. Тестируемая схема имеет точность  $O(h^4)$ , так что следовало ожидать наклона кривой  $\text{tg } \alpha = -4$ . Наблюдаемый наклон составляет  $-5$ , что соответствует даже более высокому порядку точности. Причина такого улучшения пока непонятна.

Для сравнения был проведён расчёт по полностью неявной схеме Рунге—Кутты четвёртого порядка точности (BORK4) [6, 7], в которой шаг также вычислялся по кривизне, а для самой кривизны использовалось точное выражение, соответ-



**Рис. 1.** Погрешности в тесте (10) при  $\lambda_0 = 10^4$ . Светлые маркеры — схема РК4, тёмные маркеры — схема BORK4. Кружки — сравнение с точным решением, треугольники — оценки по методу Ричардсона.

ствующее решению (11). Этот расчёт дал такую же кривую погрешности.

Этот пример показывает высокую надёжность явной схемы с геометрически-адаптивным выбором шага, сравнимую с надёжностью полностью неявных схем РК. Точности явной и неявной схем оказываются также примерно одинаковыми. Но по экономичности явные схемы кардинально превосходят неявные.

#### 4. РАСЧЁТ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

В качестве важного приложения рассмотрим расчёт кинетики химических реакций горения смеси водорода с кислородом. Система содержит 25 прямых и столько же обратных реакций и учитывает девять компонентов: O, H, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, OH, H<sub>2</sub>O, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Сама система довольно громоздка и приведена в [8]. Приведём пример расчёта “гремучей смеси” (две части молекулярного водорода и одна часть молекулярного кислорода) при температуре  $T = 2000$  К. Время горения 10 мкс. Расчёт проводился со сгущением сеток до выхода на заданную высокую точность.

На рис. 2 приведена зависимость концентраций важнейших компонентов от времени. Хорошо виден пограничный слой, соответствующий вспышке смеси, и выход концентраций на стационарные значения. Все графики являются гладкими линиями без пилообразных осцилляций. Это иллюстрирует хорошее качественное поведение численного решения и свидетельствует о надёжности схемы.

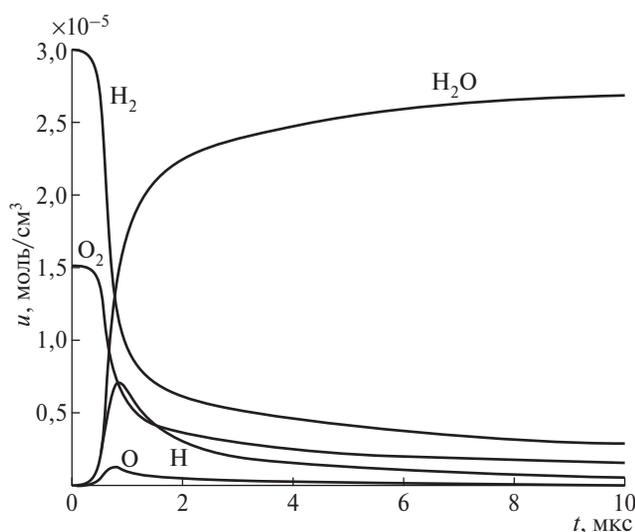


Рис. 2. Горение водорода в кислороде при  $T = 2000$  К. Поведение концентраций.

Точное решение данной задачи неизвестно. Поэтому погрешность решения определялась методом Ричардсона по сгущению сеток. Вычислялась погрешность в норме  $L_2$ , в которой усреднение проводилось не только по времени, но и по всем компонентам. На рис. 3 приведены погрешности расчёта с геометрически-адаптивной сеткой для трёх явных схем: четырёхстадийная схема РК, двухстадийная схема РК и специализированная схема точности  $O(h^2)$ , названная химической [8]. График дан в двойном логарифмическом масштабе. Все три линии выходят на прямые, а их наклоны соответствуют теоретическим порядкам точности схем.

Видно, что наилучшую точность при хорошей надёжности обеспечивает четырёхстадийная схема РК. Точность двухстадийной схемы РК существенно хуже. Химическая схема несколько уступает по точности двухстадийной схеме РК. Тем самым все описанные явные схемы вполне пригодны для расчёта сложных прикладных задач, если используется выбор шага по кривизне.

Однако если вести расчёты на равномерной сетке с принудительно заданным шагом, картина меняется. Счёт по явным схемам РК даёт разумный результат лишь при неприемлемо малом постоянном шаге, а при увеличении шага быстро рассыпается. Специализированная химическая схема остаётся надёжной и на довольно крупном постоянном шаге. Поэтому для расчёта задач газовой динамики с химической кинетикой, где шаг по времени навязан газодинамическими уравнениями, целесообразно применять химическую схему.

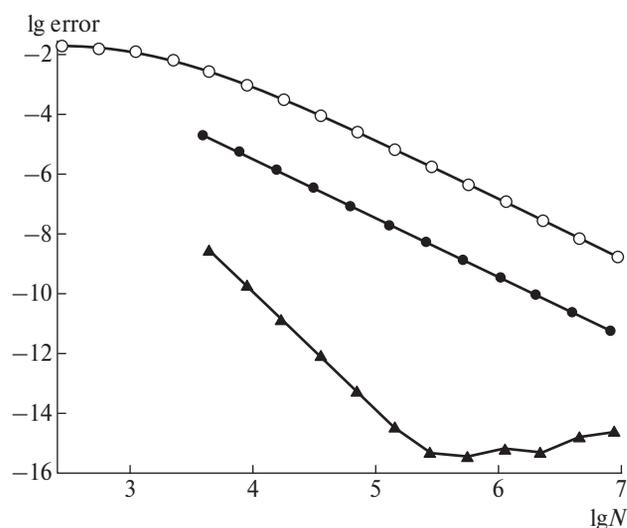


Рис. 3. Горение водорода в кислороде при  $T = 2000$  К. Погрешности схем:  $\blacktriangle$  — РК4,  $\bullet$  — РК2,  $\circ$  — специальная химическая схема.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Явные схемы имеют ряд серьёзных преимуществ перед неявными: очень малую трудоёмкость и лёгкость распараллеливания, что особенно важно при расчётах многомерных задач. Однако недостаточная надёжность таких схем серьёзно затрудняла их использование. Приведённые результаты показывают, что выбор шага по кривизне кардинально повышает надёжность расчётов по явным схемам и позволяет применять их к широкому кругу актуальных жёстких задач. Кроме того, выбор шага по кривизне, в отличие от общепринятых стратегий выбора шага, вычисляет решение одновременно с асимптотически точным значением его погрешности, т.е. даёт гарантированную оценку точности.

**Источники финансирования.** Работа поддержана грантом РФФИ 18–01–00175, грантом Президента РФ МК-1780.2019.1 и программой РУДН 5–100.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Dahlquist G.* Convergence and Stability in the Numerical Integration of Ordinary Differential Equations // *Math. Scand.* 1956. V. 4. P. 33–53.
2. *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.
3. *Dormand J.R., Prince P.J.* A Family of Embedded Runge–Kutta Formulae // *J. Comp. Appl. Math.* 1980. V. 6. P. 223–232.
4. *Белов А.А., Калиткин Н.Н., Пошивайло И.П.* Геометрически-адаптивные сетки для жестких задач Коши // *ДАН.* 2016. Т. 466. № 3. С. 276–281.
5. *Белов А.А., Калиткин Н.Н.* Выбор шага по кривизне для жестких задач Коши // *Мат. моделирование.* 2016. Т. 28. № 11. С. 97–112.
6. *Калиткин Н.Н., Пошивайло И.П.* Обратные Ls-устойчивые схемы Рунге–Кутты // *ДАН.* 2012. Т. 442. № 2. С. 175–180.
7. *Калиткин Н.Н., Пошивайло И.П.* Вычисления с использованием обратных схем Рунге–Кутты // *Мат. моделирование.* 2013. Т. 25. № 10. С. 79–96.
8. *Белов А.А., Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В.* Моделирование химической кинетики в газах // *Мат. моделирование.* 2016. Т. 28. № 8. С. 46–64.

## EXPLICIT METHODS FOR INTEGRATING STIFF CAUCHY PROBLEMS

**A. A. Belov<sup>1,2</sup>, Corresponding Member of the RAS N. N. Kalitkin<sup>3</sup>,  
P. E. Bulatov<sup>1</sup>, E. K. Zholkovskii<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

<sup>2</sup>*Peoples Friendship University of Russia, Moscow, Russian Federation*

<sup>3</sup>*Federal Research Center Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

Received October 30, 2018

An explicit method for solving stiff Cauchy problems is proposed. The method relies on explicit schemes and a step size selection algorithm based on the curvature of an integral curve. Closed-form formulas are derived for finding the curvature. For Runge–Kutta schemes with up to four stages, the corresponding sets of coefficients are given. The method is validated on a test problem with a given exact solution. It is shown that the method is as accurate and robust as implicit methods, but is substantially superior to them in efficiency. A numerical example involving chemical kinetics computations with 9 components and 50 reactions is given.

*Keywords:* stiff Cauchy problem, automatic step selection, curvature in multidimensional space, the Richardson method estimations.