

**Кнауб Людмила Владимировна**

**РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНЫХ ЯВНЫХ МЕТОДОВ И КОМПЛЕКСА  
ПРОГРАММ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ  
УМЕРЕННОЙ ЖЕСТКОСТИ**

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Институте вычислительного моделирования СО РАН, г.Красноярск и Федеральном государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет», г.Красноярск.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор  
Новиков Евгений Александрович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор  
Добронец Борис Станиславович

доктор физико-математических наук,  
профессор  
Черных Геннадий Георгиевич

Ведущая организация: Тюменский государственный университет

Защита диссертации состоится «29» мая 2009 г. в 14 часов в ауд. УЛК-115 на заседании диссертационного совета ДМ 212.099.06 ФГОУ ВПО «Сибирский федеральный университет» по адресу: 660074, г. Красноярск, ул. Киренского, д. 26 б.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Сибирского федерального университета.

Ваш отзыв заверенный печатью предприятия просим направлять по адресу: 660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 26 б, учёному секретарю диссертационного совета ДМ 212.099.06.  
тел./факс. (3912)912-235.

Автореферат разослан

“27” апреля 2009 .

Учёный секретарь  
диссертационного совета

Р.Ю. Царев

## **Общая характеристика работы**

**Актуальность исследований.** В химической кинетике, радиоэлектронике и других важных приложениях возникает проблема численного решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Класс задач, описываемых жесткими системами, расширяется, так как учитывается все большее число факторов при построении математических моделей физических процессов. Поэтому возникает необходимость решения жестких задач все более высокой размерности. Это, в свою очередь, повышает требования к вычислительным алгоритмам. Современные методы решения жестких задач, как правило, на каждом шаге требуют обращение матрицы Якоби, что при достаточно большой размерности задачи определяет общие вычислительные затраты. Известные явные методы, в которых матрица Якоби не применяется, в основном не приспособлены для решения задач даже умеренной жесткости по двум причинам. Во-первых, области устойчивости явных методов малы, что приводит к обременительным ограничениям на величину шага интегрирования. Во-вторых, на участке установления решения шаг раскачивается из-за противоречивости требований точности вычислений и устойчивости численной схемы. Поэтому построение новых эффективных явных методов с расширенными областями устойчивости и контролем устойчивости численных схем, а также алгоритмов переменного порядка и шага, является актуальной задачей.

**Цель работы** – построение эффективных алгоритмов интегрирования переменного порядка и шага для решения задач умеренной жесткости.

Цель достигается выполнением следующих задач: построением явных методов типа Рунге-Кутты высокого порядка с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы, разработкой методов первого порядка с расширенными областями устойчивости, созданием алгоритмов переменного порядка и шага, разработкой комплекса программ на основе построенных методов.

### **Научная новизна:**

- Разработаны новые методы с расширенными областями устойчивости.
- Для данных методов построены неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы.
- Созданы алгоритмы переменного порядка и шага.
- Разработан комплекс программ для решения задач средней жесткости.

## **Теоретическая значимость**

Построены два новых метода с неравенствами для контроля точности и устойчивости. На основе стадий данных методов разработаны численные схемы первого порядка точности с расширенными областями устойчивости. Сформулированы три алгоритма интегрирования переменного порядка и шага на основе двухстадийной, трехстадийной и пятистадийной схем типа Рунге-Кутты для решения задач умеренной жесткости.

## **Практическая значимость**

Разработан комплекс программ для решения задач средней жесткости. Проведены тестовые испытания, подтверждающие эффективность построенного комплекса программ. Проведено численное моделирование двух практических задач.

## **Методы исследования**

В работе применяется теория разностных схем и обыкновенных дифференциальных уравнений, используются методы математического анализа. Эффективность алгоритмов интегрирования проверяется с помощью численных экспериментов.

## **Апробация работы**

Результаты диссертации докладывались:

Международная конференция “Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании”, Павлодар, 2006.

Семинар кафедры защиты информации Тюменского государственного университета.

Семинары отдела вычислительной математики Института вычислительного моделирования СО РАН (Красноярск).

Семинары кафедры математического обеспечения дискретных устройств и систем (МОДУС) Сибирского федерального университета.

**Достоверность полученных результатов** подтверждается численными испытаниями полученных алгоритмов на семи жестких тестовых примерах. Результат тестовых расчетов подтверждает надежность и эффективность неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной формулы, а так же показывает более чем десятикратное повышение эффективности вычислений алгоритмами переменного порядка по сравнению с расчетами по фиксированной численной схеме.

### На защиту выносятся:

- Алгоритмы интегрирования с контролем точности вычислений и устойчивости численных формул на основе двухстадийной и трехстадийной схем.
- Алгоритмы интегрирования переменного порядка и шага на основе двухстадийной, трехстадийной и пятистадийной схем.
- Комплекс программ с программными реализациями построенных методов интегрирования.
- Результаты моделирования двух практических задач.

**Общая характеристика диссертации.** Работа состоит из введения, пяти глав, заключения, библиографического списка из 105 наименований и приложения. Общий объем работы составляет 122 стр., приложения на 1стр.

### Содержание работы

**Во введении** дан обзор работ по теме диссертации и приведено краткое описание ее содержания по главам.

**Глава 1** посвящена построению неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости явных методов типа Рунге-Кутта. В первом параграфе приведены основные определения; во втором предлагаются два способа получения неравенства для контроля точности вычислений, а так же приведена формула для выбора величины шага интегрирования по точности; в третьем изучается подход к построению неравенства для контроля устойчивости явных методов; в четвертом рассматриваются вопросы реализации на ЭВМ явных методов с контролем точности и устойчивости численных схем. Данная глава является реферативной и приведена для наглядности.

**Глава 2** посвящена построению алгоритмов интегрирования с контролем точности вычислений. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность построенных алгоритмов. В первом параграфе получены соотношения, связывающие коэффициенты явных методов типа Рунге-Кутта и коэффициенты полинома устойчивости, приведены представления приближенного и точного решений в виде рядов Тейлора; во втором на основе двухстадийной численной формулы построен метод второго порядка точности с неравенством для контроля точности вычислений; в третьем на основе трехстадийной схемы построен метод третьего порядка с неравенством для контроля точности вычислений; в четвертом изучается пятистадийный метод Мерсона четвертого порядка точности; в пятом приведены результаты расчетов тестовых примеров, показывающие надежность неравенства для контроля точности вычислений.

Для численного решения задачи Коши

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (2)$$

применяются явные методы типа Рунге-Кутты следующего вида, соответственно

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m p_{mi} k_i, \quad k_i = hf(t_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad (3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m p_{mi} k_i, \quad k_i = hf(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad (4)$$

где  $p_{mi}, \alpha_i, \beta_{ij}, 1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq i-1$ , – коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (3) и (4),  $h$  – шаг интегрирования,  $k_i, 1 \leq i \leq m$ , – стадии метода. Для упрощения выкладок все исследования проводились для методов (4). Однако все построенные численные схемы можно использовать для решения неавтономных систем. Для этого достаточно в (3) подставить  $\alpha_i, 1 \leq i \leq m$ , определенные следующим образом,

$$\alpha_1 = 0, \quad \alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}, \quad 2 \leq i \leq m.$$

Во втором параграфе построен двухстадийный метод

$$y_{n+1} = y_n + 0.5(k_1 + k_2), \quad k_1 = hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + k_1), \quad (5)$$

неравенство для контроля точности которого имеет вид

$$0.5 \|k_2 - k_1\| \leq \varepsilon, \quad (6)$$

где  $\|\cdot\|$  – некоторая норма в  $R^N$ ,  $\varepsilon$  – требуемая точность вычислений.

В третьем параграфе разработан метод третьего порядка

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{2}{3}k_2 + \frac{1}{6}k_3 \\ k_1 &= hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + \frac{1}{2}k_1), \\ k_3 &= hf(y_n - k_1 + 2k_2), \end{aligned} \quad (7)$$

неравенство для контроля точности которого имеет вид

$$\frac{1}{6} \|k_1 - 2k_2 + k_3\| \leq \varepsilon. \quad (8)$$

В четвертом параграфе для пятистадийного метода Мерсона

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{2}{3}k_4 + \frac{1}{6}k_5, \\k_1 &= hf(y_n), \\k_2 &= hf\left(y_n + \frac{1}{3}k_1\right), \\k_3 &= hf\left(y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{6}k_2\right), \\k_4 &= hf\left(y_n + \frac{1}{8}k_1 + \frac{3}{8}k_3\right), \\k_5 &= hf\left(y_n + \frac{1}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3 + 2k_4\right).\end{aligned}\tag{9}$$

построено неравенство для контроля точности

$$\frac{1}{30} \left| 2k_1 - 9k_3 + 8k_4 - k_5 \right| \leq 5\varepsilon^{5/4}.\tag{10}$$

Для каждого из построенных методов сформулированы алгоритмы интегрирования переменного шага.

В пятом параграфе проведено тестирование построенных алгоритмов интегрирования на семи жестких задачах из области химической кинетики. Из результатов расчетов можно сделать следующие выводы.

1. Фактическая точность вычислений для всех методов не хуже задаваемой точности. Это естественно в случае применения явных методов для решения жестких задач. Практически на всем интервале интегрирования шаг ограничен не точностью вычислений, а устойчивостью численной формулы. Поэтому шаг интегрирования выбирается меньше максимально возможного шага.
2. Вычислительные затраты практически не зависят от задаваемой точности. Более того, для ряда задач повышение точности расчетов приводит к уменьшению вычислительных затрат. Это является следствием того, что при высокой точности расчетов влияние неустойчивости численной формулы уменьшается.
3. При решении всех задач достаточно много шагов интегрирования сопровождаются повторными вычислениями решения (возвратами). Это является следствием противоречия между точностью вычислений и устойчивостью численной схемы. Избежать возвратов можно за счет дополнительного (кроме точности вычислений) контроля устойчивости метода.

4. Самым эффективным при всех задаваемых точностях оказался алгоритм на основе двухстадийной численной схемы. Это естественно, потому что у него на одно вычисление правой части дифференциальной задачи приходится самый большой отрезок интервала устойчивости.

Таким образом, эффективность расчетов можно повысить за счет контроля устойчивости.

**Глава 3** посвящена построению алгоритмов интегрирования с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы. Приведены результаты расчетов, подтверждающие повышение эффективности за счет дополнительного (кроме точности) контроля устойчивости.

В первом параграфе получена оценка максимального собственного числа  $\nu_{n,2} = h\lambda_{n \max}$  матрицы Якоби для метода (5). Неравенство для контроля устойчивости имеет вид

$$\nu_{n,2} = 2 \max_{1 \leq i \leq N} (|k_3^i - k_2^i| / |k_2^i - k_1^i|) \leq 2, \quad (11)$$

где числом 2 ограничен интервал устойчивости схемы (5), а  $k_3 = hf(y_{n+1})$  есть вспомогательная стадия, необходимая для оценки максимального собственного числа. Вычисление  $k_3$  к дополнительным вычислительным затратам не приводит, потому что  $k_3$  совпадает со стадией  $k_1$  для следующего шага.

Во втором параграфе получена оценка максимального собственного числа  $\nu_{n,3} = h\lambda_{n \max}$  матрицы Якоби для метода (7). Неравенство для контроля устойчивости имеет вид

$$\nu_{n,3} = 0.5 \max_{1 \leq i \leq N} (|k_1^i - 2k_2^i + k_3^i| / |k_2^i - k_1^i|) \leq 2.5. \quad (12)$$

В третьем параграфе получена оценка максимального собственного числа  $\nu_{n,4} = h\lambda_{n \max}$  матрицы Якоби для метода (9). Неравенство для контроля устойчивости имеет вид

$$\nu_{n,4} = 6 \max_{1 \leq i \leq N} (|k_3^i - k_2^i| / |k_2^i - k_1^i|) \leq 3.5. \quad (13)$$

Для всех методов сформулирован алгоритм интегрирования с контролем точности вычислений и устойчивости численной формулы. Прогнозируемый шаг  $h_{n+1}$  вычисляется по следующей формуле

$$h_{n+1} = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})], \quad (14)$$



$h_n$  – последний успешный шаг интегрирования,  $h^{ac}$  – прогнозируемый шаг по точности,  $h^{st}$  – прогнозируемый шаг по устойчивости. Из формулы (14) следует, что контроль устойчивости применяется как ограничитель на рост шага, что позволяет сгладить последствия грубости оценок собственных чисел матрицы Якоби. Если шаг по устойчивости меньше последнего успешного, то он уменьшен не будет, потому что причиной этого может быть грубость оценки максимального собственного числа. Однако шаг не будет и увеличен, потому что не исключена возможность неустойчивости численной схемы. Если шаг по устойчивости должен быть уменьшен, то в качестве следующего шага будет применяться последний успешный шаг  $h_n$ . В результате для выбора шага и предлагается формула (14). Данная формула позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Собственно говоря, именно наличие данного участка существенно ограничивает возможности применения явных методов для решения жестких задач.

В четвертом параграфе приведены результаты расчетов тестовых примеров. Из анализа расчетов можно сделать следующие выводы. Число шагов для методов с контролем устойчивости и без контроля устойчивости примерно одинаковое. Число возвратов для методов с контролем устойчивости значительно меньше. Отметим, что возвраты непременно связаны с дополнительными вычислительными затратами. Поэтому затраты, которые выражаются в количестве вычислений функции  $f$ , для методов с контролем устойчивости ниже методов без контроля устойчивости. Повышение эффективности за счет контроля устойчивости примерно в 1.5 раза.

Заметим, что фактическая точность в конце интервала интегрирования значительно выше задаваемой точности. Это естественно, потому что старые ошибки подавляются за счет контроля устойчивости численной формулы, а новые невелики за счет малости производных решения. Поэтому эффективность алгоритма интегрирования может быть повышена за счет применения методов низкого порядка точности, но с более широкой областью устойчивости.

**Глава 4** посвящена вопросам построения алгоритмов интегрирования переменного порядка и шага. Выбор эффективной численной схемы осуществляется на каждом шаге с помощью неравенства для контроля точности и устойчивости.

В первом параграфе построен алгоритм интегрирования на основе численных формул первого и второго порядков точности. Метод первого порядка имеет вид

$$y_{n+1} = y_n + \frac{7}{8}k_1 + \frac{1}{8}k_2, \quad k_1 = hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + k_1). \quad (15)$$

Для контроля точности метода (15) применяется неравенство  $3\|k_2 - k_1\|/8 \leq \varepsilon$ . Область устойчивости метода первого порядка расширена

до 8 по вещественной оси. Если шаг ограничен требованием устойчивости, то переход с (5) на (15) может приводить к повышению эффективности расчетов в 4 раза. Переключение со схемы (5) на (15) происходит в случае нарушения неравенства  $v_{n,2} \leq 2$ . При расчетах по методу первого порядка контролируется неравенство  $v_{n,1} \leq 8$ , где числом 8 ограничен интервал устойчивости метода (15),  $v_{n,1} = 8 \max_{1 \leq i \leq N} (|k_3^i - k_2^i| / |k_2^i - k_1^i|)$ . Шаг интегрирования выбирается по формуле (14). Обратное переключение со схемы (15) на (5) происходит в случае выполнения неравенства  $v_{n,1} \leq 2$ .

Во втором параграфе построен алгоритм интегрирования на основе численных формул первого и третьего порядков точности. Метод первого порядка имеет вид

$$y_{n+1} = y_n + \frac{517}{729}k_1 + \frac{208}{729}k_2 + \frac{4}{729}k_3,$$

$$k_1 = hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + \frac{1}{2}k_1),$$

$$k_3 = hf(y_n - k_1 + 2k_2),$$
(16)

Для контроля точности метода (16) применяется неравенство  $19 \|k_2 - k_1\| / 27 \leq \varepsilon$ . Область устойчивости метода первого порядка расширена до 18 по вещественной оси. Если шаг ограничен требованием устойчивости, то переход с (7) на (16) может приводить к повышению эффективности расчетов в примерно в 7 раз. Переключение со схемы (7) на (16) происходит в случае нарушения неравенства  $v_{n,3} \leq 2.5$ . При расчетах по методу первого порядка контролируется неравенство  $v_{n,3} \leq 18$ , где числом 18 ограничен интервал устойчивости метода (16). Шаг интегрирования выбирается по формуле (14). Обратное переключение со схемы (16) на (7) происходит в случае выполнения неравенства  $v_{n,3} \leq 2.5$ .

В третьем параграфе построен алгоритм интегрирования на основе численных формул первого и четвертого порядков точности. Метод первого порядка имеет вид

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^5 p_i k_i,$$
(17)

где стадии  $k_i, 1 \leq i \leq m$ , определены формулами (9),  $p_1 = 5.248365568 \cdot 10^{-1}$ ,  $p_2 = 3.260928 \cdot 10^{-1}$ ,  $p_3 = 1.395154944 \cdot 10^{-1}$ ,  $p_4 = 9.5158272 \cdot 10^{-3}$ ,  $p_5 = 3.93216 \cdot 10^{-5}$ . Для контроля точности метода (17) применяется неравенство  $\|k_2 - k_1\| \leq \varepsilon$ . Область устойчивости метода первого порядка расширена до 50 по вещественной оси. Если шаг ограничен требованием устойчивости, то переход с (9) на (17) может приводить к повышению эффективности расчетов в примерно в 14 раз. Переключение со схемы (9) на

(17) происходит в случае нарушения неравенства  $v_{n,4} \leq 3.5$ . При расчетах по методу первого порядка контролируется неравенство  $v_{n,4} \leq 50$ , где числом 50 ограничен интервал устойчивости метода (17). Шаг интегрирования выбирается по формуле (14). Обратное переключение со схемы (17) на (9) происходит в случае выполнения неравенства  $v_{n,4} \leq 50$ .

В четвертом параграфе приведены результаты численного эксперимента. Вычислительные затраты приведены в табл. 1-3. В табл. 1 – 3 используются обозначения:

RK2 – метод второго порядка с контролем точности вычислений;  
 RK2ST – метод второго порядка с контролем точности и устойчивости;  
 RK2PP – алгоритм переменного порядка и шага;

RK3 – метод третьего порядка с контролем точности вычислений;  
 RK3ST – метод третьего порядка с контролем точности и устойчивости;  
 RK3PP – алгоритм переменного порядка и шага;

RK4 – метод четвертого порядка с контролем точности вычислений;  
 RK4ST – метод четвертого порядка с контролем точности и устойчивости;  
 RK4PP – алгоритм переменного порядка и шага;

Заметим, что программа RK4 совпадает с известным методом Мерсона, программная реализация которого MERSON входит во все известные библиотеки мира. Из анализа табл. 1 – 3 можно сделать вывод о том, что применение алгоритмов переменного порядка и шага для решения задач умеренной жесткости приводит к существенному повышению эффективности и, в частности, эффективнее программы MERSON примерно в 15 раз (см. строки 7 и 9 табл. 1-3).

Таблица 1

Суммарные затраты с точностью  $\varepsilon = 10^{-2}$

Метод	Число шагов	Число возвратов	Число вычислений функции $f$
RK2	3 922 747	1 272 100	
RK2ST	4 101 759	1 894	8 205 814
RK2PP	1 104 327	2 726	2 211 387
RK3	3 049 717	807 768	10 764 687
RK3ST	3 115 679	8 638	9 364 313
RK3PP	458 596	1864	1 377 692
RK4	2 160 775	809 885	14 051 457
RK4ST	2 361 823	13 197	12 180 374
RK4PP	170948	742	855 935

Таблица 2

Суммарные затраты с точностью  $\varepsilon = 10^{-4}$ 

Метод	Число шагов	Число возвратов	Число вычислений функции $f$
RK2	3 925 209	1 276 748	9 127 209
RK2ST	4 104 091	3 075	8 211 336
RK2PP	1 053 099	3 753	2 109 958
RK3	3 050 308	807 164	10 765 252
RK3ST	3 115 834	11 344	9 370 190
RK3PP	466 671	2 687	1 402 782
RK4	2 161 031	814 393	14 062 734
RK4ST	2 387 296	16 059	12 159 808
RK4PP	171 302	892	857 536

Таблица 3

Суммарные затраты с точностью  $\varepsilon = 10^{-6}$ 

Метод	Число шагов	Число возвратов	Число вычислений функции $f$
RK2	3 947 998	1 277 186	9 173 189
RK2ST	4 128 568	6 312	8 263 473
RK2PP	1 148 263	5 723	2 302 256
RK3	3 052 669	807 618	10 773 243
RK3ST	3 117 083	18 812	9 388 873
RK3PP	483 414	9 165	1 459 692
RK4	3 010 085	809 729	14 045 063
RK4ST	2 480 079	22 151	12 489 006
RK4PP	182 630	2 891	917 576

В главе 5 описан разработанный комплекс программ RK\_ODE для численного моделирования задач, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений средней жесткости. Структурная схема комплекса приведена на рис. 1.

На рис. 1. используются следующие обозначения:

**RK\_ODE** – управляющая программа;

**RK2PP** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного порядка и шага на основе явной двухстадийной схемы типа Рунге-Кутты;

**RK2ST1** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного шага на основе явной двухстадийной схемы типа Рунге-Кутты первого порядка точности;

**RK2ST** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного шага на основе явной двухстадийной схемы типа Рунге-Кутты второго порядка точности;

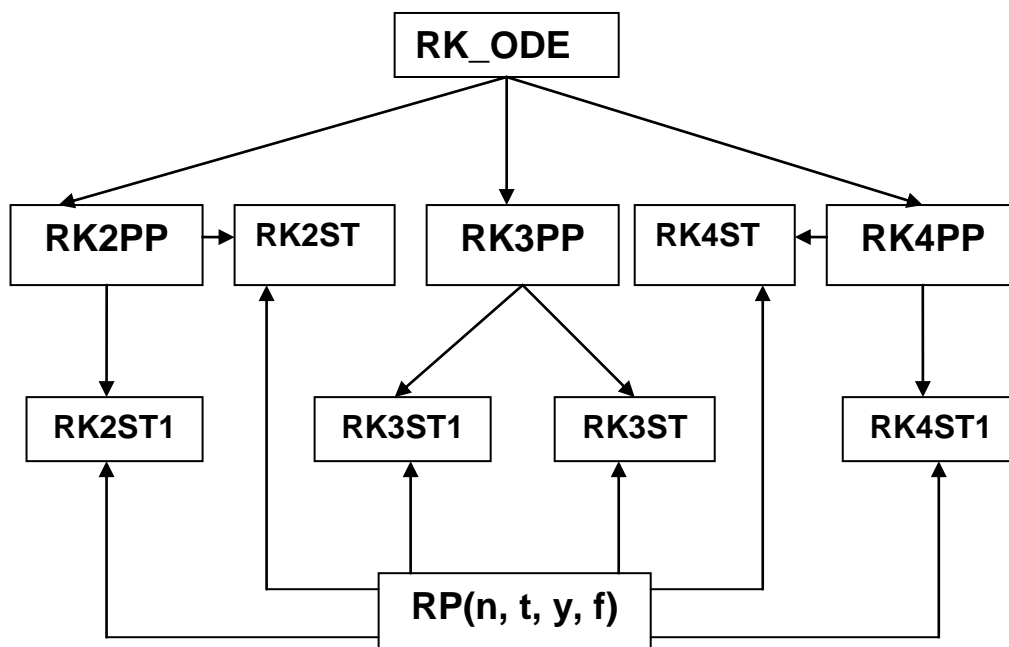


Рис. 1. Структурная схема комплекса программ RK\_ODE

**RK3PP** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного порядка и шага на основе явной трехстадийной схемы типа Рунге-Кутты;

**RK3ST1** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного шага на основе явной трехстадийной схемы типа Рунге-Кутты первого порядка точности;

**RK3ST** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного шага на основе явной трехстадийной схемы типа Рунге-Кутты третьего порядка точности;

**RK4PP** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного порядка и шага на основе явной пятистадийной схемы типа Рунге-Кутты;

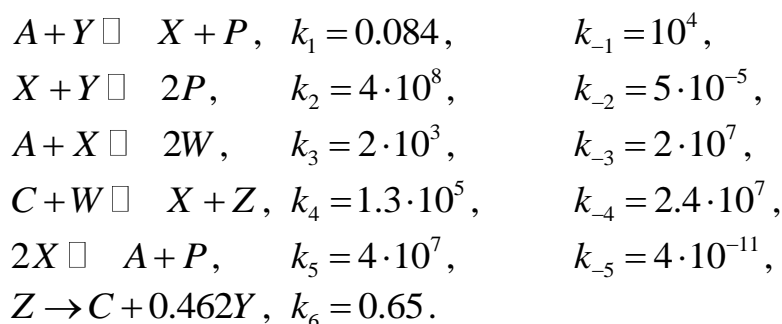
**RK4ST1** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного шага на основе явной трехстадийной схемы типа Рунге-Кутты первого порядка точности;

**RK4ST** – программная реализация алгоритма интегрирования переменного шага на основе явной пятистадийной схемы типа Рунге-Кутты четвертого порядка точности;

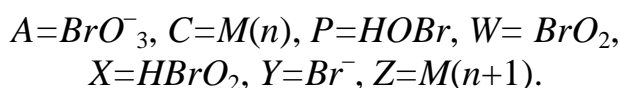
**RP(n, t, y, f)** – подпрограмма для вычисления правой части системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1) – задается пользователем для каждой конкретной задачи.

Отметим, что программы RK2PP, RK3PP и RK4PP сами по себе являются комплексами программ, в каждый из которых включено по пять алгоритмов переменного шага (расчеты методом первого порядка без контроля устойчивости; методом первого порядка с контролем устойчивости; методом высокого порядка без контроля устойчивости; методом высокого порядка с контролем устойчивости; расчеты алгоритмом переменного порядка и шага).

Во втором параграфе приведены результаты численного моделирования двух задач. Первая задача – модифицированный орегонатор, дающий сложный предельный цикл. Модель модифицированного орегонатора имеет вид



где  $k_i, -5 \leq i \leq 6$ , – константы скоростей прямых (с положительными индексами) и обратных (с отрицательными индексами) стадий. В данной реакции участвуют 7 частиц, имеющие следующие обозначения:



В этих обозначениях  $M(n)$  – ион металла катализатора,  $M(n+1)$  – окисленная форма этого иона. Обозначим концентрации реагентов следующим образом:  $c_1 = [BrO_3^-]$ ,  $c_2 = [Br^-]$ ,  $c_3 = [M(n)]$ ,  $c_4 = [HBrO_2]$ ,  $c_5 = [HOBr]$ ,  $c_6 = [BrO_2]$ ,  $c_7 = [M(n+1)]$ . Данная реакция протекает в изотермическом реакторе постоянного объема с обменом вещества, то есть ей соответствует система из семи дифференциальных уравнений вида

$$C' = AV^T + \frac{1}{\theta}(C_p - C),$$

где  $C = (c_1, c_2, \dots, c_7)^T$  – вектор концентраций реагентов,  $A$  – стехиометрическая матрица,  $V = (v_1, v_2, \dots, v_6)^T$  – вектор скоростей стадий,  $C_p = (c_{p1}, c_{p2}, \dots, c_{p7})^T$  – вектор концентраций реагентов на входе в реактор,  $\theta$  – время пребывания смеси в реакторе,  $\theta = r/u$ ,  $r$  – объем реактора,  $u$  – объемная скорость течения смеси через реактор.

Соответствующая система дифференциальных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned}c_1' &= -v_1 - v_3 + v_5 + (c_{p1} - c_1)/\theta, \\c_2' &= -v_1 - v_2 + 0.462v_6 + (c_{p2} - c_2)/\theta, \\c_3' &= -v_4 + v_6 + (c_{p3} - c_3)/\theta, \\c_4' &= v_1 - v_2 - v_3 + v_4 - 2v_5 + (c_{p4} - c_4)/\theta, \\c_5' &= v_1 + 2v_2 + v_5 + (c_{p5} - c_5)/\theta, \\c_6' &= 2v_3 - v_4 + (c_{p6} - c_6)/\theta, \\c_7' &= v_4 - v_6 + (c_{p7} - c_7)/\theta,\end{aligned}$$

где скорости  $v_1, v_2, \dots, v_6$  стадий определяются по формулам

$$\begin{aligned}v_1 &= k_1c_1c_2 - k_{-1}c_4c_5, \quad v_2 = k_2c_2c_4 - k_{-2}c_5^2, \quad v_3 = k_3c_1c_4 - k_{-3}c_6^2, \\v_4 &= k_4c_3c_6 - k_{-4}c_4c_7, \quad v_5 = k_5c_4^2 - k_{-5}c_1c_5, \quad v_6 = k_6c_7.\end{aligned}$$

Концентрации реагентов на входе в реактор принимают значения

$$c_{p1}=0.14, \quad c_{p2}=0.151 \cdot 10^{-5}, \quad c_{p3}=0.125 \cdot 10^{-3}, \quad c_{p4}=c_{p5}=c_{p6}=c_{p7}=0,$$

причем  $\Theta=125.5$ . Начальные значения концентраций реагентов следующие:

$$\begin{aligned}c_1 &= 0.1387, \quad c_2 = 0.1534 \cdot 10^{-6}, \quad c_3 = 0.1176 \cdot 10^{-3}, \quad c_4 = 0.3165 \cdot 10^{-7}, \\c_5 &= 0.1956 \cdot 10^{-3}, \quad c_6 = 0.5814 \cdot 10^{-6}, \quad c_7 = 0.631 \cdot 10^{-5}.\end{aligned}$$

На данной задаче RK\_ODE эффективнее MERSON примерно в 11 раз.

Зависимость концентрации  $[Br^-]$  от времени

приведена на рис. 2.

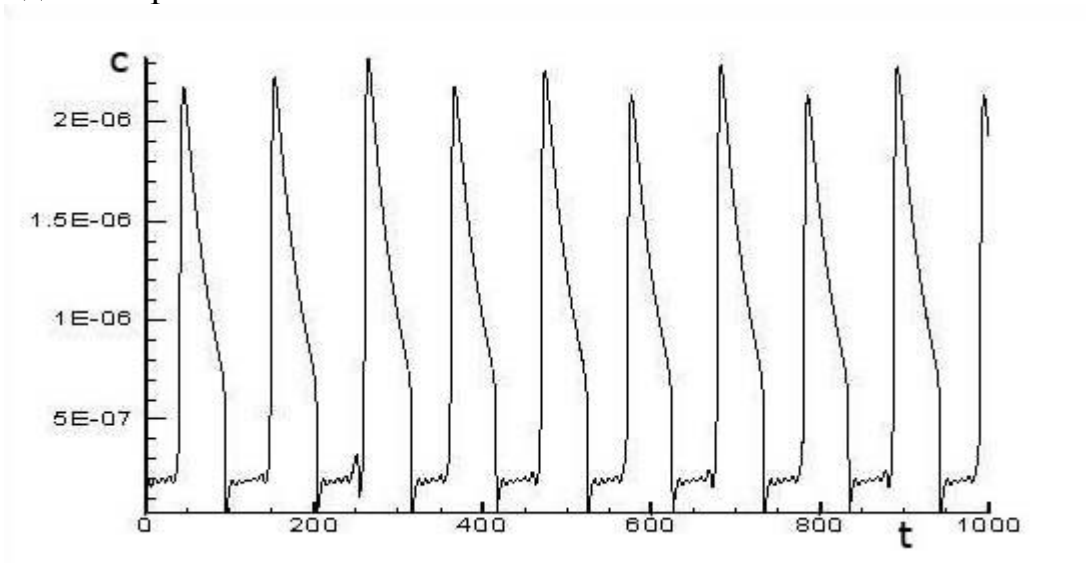


Рис. 2. Зависимость концентрации  $[Br^-]$  от времени

Вторая задача связана с проникновением помеченных радиоактивной меткой антител в пораженную опухолью ткань живого организма. Рассматривается система одномерных уравнений реакции–диффузии

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - kuv, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -kuv, \quad (18)$$

которые возникают из химической реакции  $A+B \rightarrow C$  с константой скорости реакции  $k$ , где  $A$  – антитело с радиоактивной меткой, реагирующее с субстратом  $B$  – тканью, пораженной опухолью. Концентрации  $A$  и  $B$  обозначены через  $u$  и  $v$  соответственно. При выводе уравнений (18) предполагалось, что кинетика реакции описывается законом действующих масс, причем реагент  $A$  подвижен, тогда как реагент  $B$  неподвижен.

Изучается полубесконечная пластина, внутри которой субстрат  $B$  равномерно распределен. Реагент  $A$ , попадая на поверхность пластины, начинает проникать в нее. Для моделирования проникновения уравнения (18) рассматриваются в полосе  $S_T = \{(x,t): 0 < x < \infty, 0 < t < T\}$  с начальными  $u(x, 0) = 0$ ,  $v(x, 0) = v_0$ ,  $x > 0$ , и граничными  $u(0, t) = \phi(t)$ ,  $0 < t < T$ , условиями, где  $v_0$  константа. После некоторых преобразований данная задача методом прямых сводится к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad y(0) = g, \quad y \in R^{2N}, \quad 0 \leq t \leq 20, \quad (19)$$

где  $N$  – задаваемый пользователем параметр. Функция  $f$  определяется формулами

$$f_{2j-1} = \alpha_j \frac{y_{2j+1} - y_{2j-3}}{2\Delta\zeta} + \beta_j \frac{y_{2j-3} - 2y_{2j-1} + y_{2j+1}}{(\Delta\zeta)^2} - ky_{2j-1}y_{2j},$$

$$f_{2j} = -ky_{2j}y_{2j-1},$$

где

$$\alpha_j = 2(j\Delta\zeta - 1)^3 c^2, \quad \beta_j = (j\Delta\zeta - 1)^4 c^2, \quad 1 \leq j \leq N, \quad \Delta\zeta = 1/N,$$

$$y_{-1}(t) = \phi(t), \quad y_{2N+1} = y_{2N-1}, \quad g \in R^{2N}, \quad g = (0, v_0, 0, v_0, \dots, 0, v_0)^T.$$

Функция  $\phi(t) = 2$  при  $0 < t \leq 5$  и  $\phi(t) = 0$  при  $5 < t \leq 20$ , то есть  $\phi(t)$  имеет разрыв первого рода в точке  $t=5$ . В качестве параметров  $k$ ,  $v_0$  и  $c$  использовались  $k=100$ ,  $v_0=1$  и  $c=4$ . Расчеты проводились при  $N=200$ , то есть система (19) состоит из 400 уравнений. Задача о нахождении разрыва функции  $\phi(t)$  при  $t=5$  возлагалась на алгоритм управления шагом. Решение задачи (19) приведено на рис. 3.

Интегрирование задачи (19) с точностью  $\varepsilon = 10^{-2}$  проводилось на промежутке  $[0, 20]$  с начальным шагом  $10^{-5}$ . Суммарные вычислительные затраты приведены в табл. 4. Расчеты проводились с применением



управляющей программы RK\_ODE. Для наглядности в табл. 4 приведены идентификаторы входящих в RK\_ODE методов.

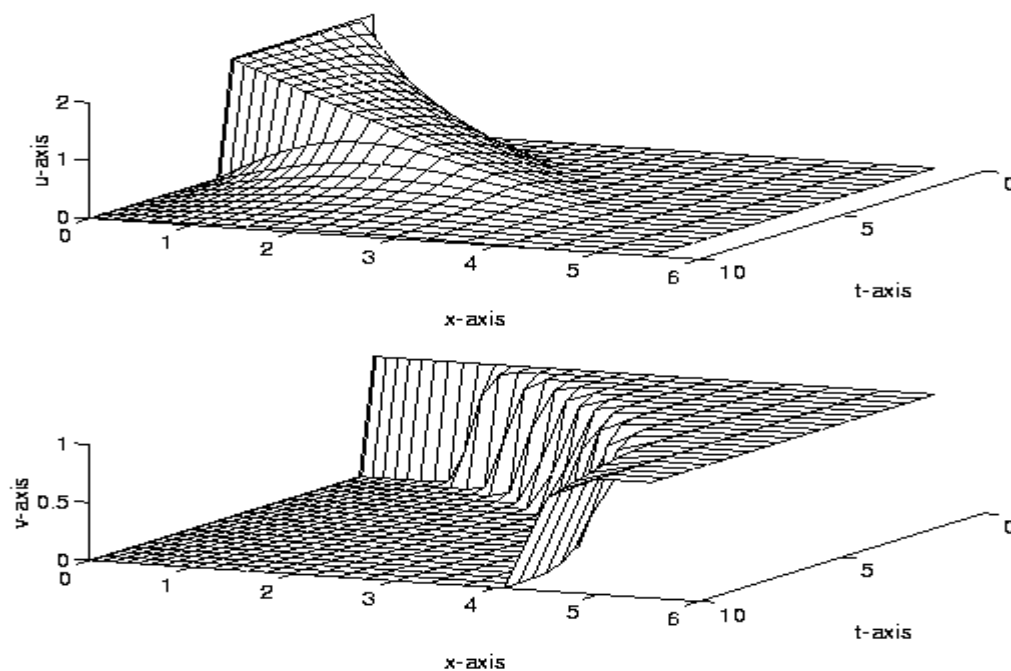


Рис. 3. Решение задачи (19)

Таблица 4

Суммарные вычислительные затраты

Ме тод	Число шагов	Число возвратов	Число вычислений функции $f$
2 RK	89 629	29 069	208 328
2ST RK	88 868	951	178 688
2PP RK	24 659	34	49 353
3 RK	69 806	18 205	245 828
3ST RK	58 381	2 299	179 741
3PP RK	11 894	43	35 726
4 RK	49 312	18 118	319 033
4ST RK	48 532	1 076	246 965
RK	4 951	19	24 791

4PP			
-----	--	--	--

Напомним, что алгоритм RK4 совпадает с программой MERSON, в которой реализован метод Мерсона. Из анализа таблицы 4 можно сделать вывод о том, что разработанный комплекс программ эффективнее известного метода Мерсона почти в 13 раз. Фактическая точность расчетов не хуже задаваемой точности.

В приложении приведены тестовые примеры.

## **Основные результаты.**

На основе явных методов типа Рунге-Кутта с контролем точности и устойчивости созданы новые эффективные алгоритмы переменного порядка и шага для решения задач умеренной жесткости. Разработан комплекс программ RK\_ODE, с помощью которого произведено моделирование двух практических задач.

1. Разработаны новые явные двухстадийный и трехстадийный методы типа Рунге-Кутта с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы, сформулированы алгоритмы переменного шага.
2. Для двух, трех и пятистадийного методов достроены численные схемы первого порядка точности с расширенными областями устойчивости и сформулированы алгоритмы интегрирования переменного порядка и шага, в которых на каждом шаге эффективный метод выбирается исходя из критерия устойчивости.
3. Проведенные тестовые испытания на семи жестких тестовых примерах из химической кинетики подтвердили надежность и эффективность неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной формулы, а также более чем десятикратное повышение эффективности вычислений на основе алгоритма переменного порядка по сравнению с расчетами по фиксированной численной схеме.
4. Создан комплекс программ RK\_ODE, в состав которого включены программные реализации разработанных алгоритмов интегрирования.
5. Выполнено численное моделирование модифицированного орегонатора, дающего сложный предельный цикл, и моделирование проникновения помеченных радиоактивной меткой антител в пораженную опухолью ткань живого организма.

Публикации по теме диссертации в журналах из списка ВАК:

1. Кнауб Л.В., Лаевский Ю.М., Новиков Е.А. Алгоритм интегрирования переменного порядка и шага на основе явного двухстадийного метода Рунге-Кутты // Новосибирск: СибЖВМ, т.10, №2, 2007. – с. 177 – 185.
2. Кнауб Л.В., Новиков Е.А. Алгоритм интегрирования на основе явного трехстадийного метода Рунге-Кутта // Вестник КрасГАУ, №3, 2009. – с. 49–54.
3. Кнауб Л.В., Новиков Е.А. Численное моделирование орегонатора двухстадийным методом типа Рунге-Кутта // Вестник КрасГАУ, №4, 2009. – с.16–21.
4. Кнауб Л.В., Новиков Е.А. Применение явного трехстадийного метода типа Рунге-Кутта для численного моделирования задач химической кинетики // Вестник СибГАУ, №1(22), часть 1, 2009. – с. 77–80.
5. Кнауб Л.В., Новиков Е.А. Алгоритм интегрирования с контролем точности и устойчивости явного трехстадийного метода типа Рунге-Кутта // Системы управления и информационные технологии, №1(35), 2009. – с. 20–24.

Публикации в других изданиях:

6. Кнауб Л.В., Новиков Е.А. Контроль устойчивости явного двухстадийного метода типа Рунге-Кутта // Труды международной конференции “Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании”, т.2, Павлодар, 2006. – с. 71-76.
7. Кнауб Л.В., Новиков Е.А. Алгоритм интегрирования на основе явного двухстадийного метода типа Рунге-Кутта // Вестник КрасГАУ: Ресурсосберегающие технологии в с/х, №4, 2007. – с. 146–150.