

# АЛГОРИТМ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПЕРЕМЕННОЙ КОНФИГУРАЦИИ НА ОСНОВЕ ЯВНО-НЕЯВНЫХ СХЕМ<sup>1</sup>

Е.А. Новиков

Институт вычислительного моделирования СО РАН, Россия

[novikov@icm.krasn.ru](mailto:novikov@icm.krasn.ru)

*Abstract:* - An  $L$ -stable (4,2)-method of 4th order of accuracy and an explicit Runge-Kutta scheme of 4th order of accuracy are constructed. A numerical formula of order one is developed that is based on the stages of the explicit method and its stability interval is extended to 50. An integration algorithm of variable order and step is constructed that is based on the stages of the three schemes. The most effective numerical scheme is chosen for each step by means of stability control inequality. The results are given that confirm the effectiveness of the algorithm.

*Key-Words:* - stiff problems, explicit and implicit methods, stability and accuracy control

## 1. Введение

Во многих важных приложениях возникает проблема численного решения жестких задач. Основные тенденции при построении численных методов связаны с расширением их возможностей для решения систем все более высокой размерности. В современных методах решения жестких задач при вычислении стадий применяется  $LU$ -разложение некоторой матрицы. В случае достаточно большой размерности быстродействие алгоритма интегрирования фактически полностью определяется временем декомпозиции этой матрицы. Для повышения эффективности расчетов в ряде алгоритмов используется замораживание матрицы Якоби, то есть применение одной матрицы на нескольких шагах интегрирования [1]. Наиболее успешно этот подход применяется в многошаговых методах [2]. Не вызывает эта проблема особых трудностей и при построении алгоритмов интегрирования на основе других численных схем, если в них стадии вычисляются с участием матрицы Якоби в некотором итерационном процессе. В этом случае она не влияет на порядок точности численной схемы, а определяет только сходимость итераций.

В алгоритмах интегрирования на основе известных безытерационных методов, к которым относятся методы типа Розенброка [3] и их различные модификации [1], проблема замораживания более трудная. Следует отметить, что с точки зрения реализации безытерационные методы существенно проще алгоритмов на основе численных формул, в которых стадии вычисляются с применением итераций. Однако в методах вида [3] матрица Якоби влияет на порядок точности численной схемы, и поэтому возникают трудности с ее замораживанием. В [4] доказано, что максимальный порядок точности методов типа Розенброка равен двум, если в алгоритме интегрирования одна матрица Якоби применяется на нескольких шагах интегрирования. Там же построен алгоритм с замораживанием матрицы Якоби на основе  $L$ -устойчивой численной формулы второго порядка.

Некоторым аналогом замораживания матрицы Якоби является применение в расчетах алгоритмов интегрирования на основе явных и  $L$ -устойчивых методов с автоматическим выбором численной схемы. В этом случае эффективность алгоритма может быть повышена за счет расчета переходного участка, соответствующего максимальному собственному числу матрицы Якоби, явным методом [5]. В качестве критерия выбора эффективной численной формулы естественно применять неравенство для контроля устойчивости [6–7]. Применение таких комбинированных алгоритмов полностью не снимает проблему замораживания матрицы Якоби, потому что явным методом можно просчитать, вообще говоря, только переходный режим, соответствующий максимальному собственному числу матрицы Якоби.

Здесь на основе явных методов типа Рунге-Кутты первого и четвертого порядков, а также  $L$ -устойчивого (4,2)-метода четвертого порядка точности построен алгоритм переменной структуры. Приведены результаты расчетов задачи проникновения помеченных радиоактивной меткой антител в пораженную опухолью ткань живого организма.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 11-01-00106 и 11-01-00224)

## 2. Исследование (4,2)-метода

Рассмотрим задачу Коши вида

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

где  $y$  и  $f$  – вещественные  $N$ -мерные вектор-функции,  $t$  – независимая переменная. Для решения задачи (1) рассмотрим численную формулу [8]

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^4 p_i k_i, \quad D_n = E - ahf'_n, \quad (2)$$

$$D_n k_1 = hf'(y_n), \quad D_n k_2 = k_1,$$

$$D_n k_3 = hf(y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2) + \alpha_{32}k_2, \quad D_n k_4 = k_3 + \alpha_{42}k_2,$$

где  $h$  – шаг интегрирования,  $a, p_i, \beta_{ij}$  и  $\alpha_{ij}$  – числовые коэффициенты,  $k_i, 1 \leq i \leq 4$ , – стадии метода,  $E$  – единичная матрица,  $f'_n = \partial f / \partial y$  – матрица Якоби задачи (1). Подставим разложения  $k_i$  в виде рядов Тейлора в первую формулу (2). Полагая  $y_n = y(t_n)$  и сравнивая полученное представление с рядом Тейлора для точного решения, запишем условия четвертого порядка точности

$$\begin{aligned} 1) & p_1 + p_2 + (1 + \alpha_{32})p_3 + (1 + \alpha_{32} + \alpha_{42})p_4 = 1, \\ 2) & ap_1 + 2ap_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32})p_3 + (2a + \beta_{31} + \beta_{32} + 4a\alpha_{32} + 3a\alpha_{42})p_4 = 0.5, \\ 3) & a^2 p_1 + 3a^2 p_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32})p_3 + (3a^2 + 3a\beta_{31} + 4a\beta_{32} + 10a^2\alpha_{32} + 6a^2\alpha_{42})p_4 = 1/6, \\ 4) & a^3 p_1 + 4a^3 p_2 + (a^3 + 3a^2\beta_{31} + 6a^2\beta_{32} + 10a^3\alpha_{32})p_3 + (4a^3 + 6a^2\beta_{31} + 10a^2\beta_{32} + \\ & + 20a^3\alpha_{32} + 10a^3\alpha_{42})p_4 = 1/24, \quad 5) (\beta_{31} + \beta_{32})^2(p_3 + p_4) = 1/3, \\ 6) & a(\beta_{31} + \beta_{32})(\beta_{31} + 2\beta_{32})(p_3 + p_4) = 1/8, \\ 7) & a(\beta_{31} + \beta_{32})^2(0.5p_3 + p_4) = 1/24, \quad 8) (\beta_{31} + \beta_{32})^3(p_3 + p_4) = 1/4. \end{aligned} \quad (3)$$

Применяя метод (2) для решения задачи  $y' = \lambda y, y(0) = y_0, t \geq 0$ , имеем условие  $L$ -устойчивости численной формулы (2) вида  $a(a - p_1) + (\beta_{31} - a)p_3 = 0$ . Исследуя совместность этого соотношения и (3), запишем

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{76a^2 - 29a + 3}{27a^2}, \quad p_2 = \frac{146a^2 + 89a - 12}{27a^2}, \quad p_3 = \frac{32a - 4}{27a}, \\ p_4 &= \frac{4 - 16a}{27a}, \quad \beta_{31} = \frac{48a - 9}{32a}, \quad \beta_{32} = \frac{9 - 24a}{32a}, \\ \alpha_{32} &= \frac{-54a^2 + 57a - 12}{8a - 32a^2}, \quad \alpha_{42} = \frac{-864a^3 + 828a^2 - 288a + 36}{a(4 - 16a)^2}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $a$  определяется из необходимого условия  $L$ -устойчивости  $24a^4 - 96a^3 + 72a^2 - 16a + 1 = 0$ . Данное уравнение имеет четыре вещественных корня  $a_1 = 0,106438792142666$ ,  $a_2 = 0,22042841025921$ ,  $a_3 = 0,57281606248213$  и  $a_4 = 3,10031673511599$ . Для расчетов рекомендуется  $a = 0,57281606248213$ , потому что в этом случае схема (2) дополнительно является  $A$ -устойчивой.

Для контроля точности вычислений метода (2) четвертого порядка будем применять метод третьего порядка вида  $y_{n+1,1} = y_n + b_1 k_1 + b_2 k_2 + b_3 k_3 + b_4 k_4$ , где  $D_n k_5 = k_4$ , а  $k_i, 1 \leq i \leq 3$ , определены в (2). Нетрудно видеть, что требования третьего порядка имеют вид

$$\begin{aligned} b_1 + b_2 + (1 + \alpha_{32})b_3 + (1 + \alpha_{32} + \alpha_{42})b_4 &= 1, \\ ab_1 + 2ab_2 + (a + \beta_{31} + \beta_{32} + 3a\alpha_{32})b_3 + (3a + \beta_{31} + \beta_{32} + 5a\alpha_{32} + 4a\alpha_{42})b_4 &= 1/26 \\ a^2 b_1 + 3a^2 b_2 + (a^2 + 2a\beta_{31} + 3a\beta_{32} + 6a^2\alpha_{32})b_3 + (6a^2 + 4a\beta_{31} + 5a\beta_{32} + 15a^2\alpha_{32} + 10a^2\alpha_{42})b_4 &= 1/66 \\ (\beta_{31} + \beta_{32})^2(b_3 + b_4) &= 1/3, \end{aligned}$$

где коэффициенты  $a, \beta_{31}, \beta_{32}, \alpha_{32}$  и  $\alpha_{42}$  заданы в (4). Данная система линейна относительно параметров  $b_i, 1 \leq i \leq 4$ . При применении коэффициентов (4), имеем  $b_1 = 1,203100567018353$ ,  $b_2 = -6,552116304144386 \cdot 10^{-1}$ ,  $b_3 = 7,115271884598151 \cdot 10^{-1}$ ,  $b_4 = -1,189345958672225 \cdot 10^{-1}$ . Теперь оценку ошибки  $\varepsilon_n$  можно вычислить по формуле  $\varepsilon_n = \|y_{n+1} - y_{n+1,1}\|$ , а при выборе шага проверять неравенство  $\varepsilon_n \leq \varepsilon$ , где  $\|\cdot\|$  – некоторая норма в  $R^N$ ,  $\varepsilon$  – точность расчетов.

Оценку максимального собственного числа  $v_{n,0} = h|\lambda_{n,\max}|$  матрицы Якоби системы (1), необходимую для перехода на явную формулу, оценим через ее норму по формуле

$$v_{n,0} = \|\partial f / \partial y\| = \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N \left| \partial f_i / \partial y_j \right|.$$

### 3. Контроль точности и устойчивости метода Мерсона

Одним из эффективных явных методов четвертого порядка точности является метод Мерсона [9]

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + k_1 / 6 + 2k_4 / 3 + k_5 / 6, \\ k_1 &= hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + k_1 / 3), \quad k_3 = hf(y_n + k_1 / 6 + k_2 / 6), \\ k_4 &= hf(y_n + k_1 / 8 + 3k_3 / 8), \quad k_5 = hf(y_n + k_1 / 2 - 3k_3 / 2 + 2k_4). \end{aligned} \quad (5)$$

Пятое вычисление функции  $f$  не дает увеличение порядка до пятого, но позволяет расширить интервал устойчивости до 3.5 и оценить величину локальной ошибки  $\delta_{n,4}$  с помощью  $k_i$  по формуле  $\delta_{n,4} = (2k_1 - 9k_3 + 8k_4 - k_5) / 30$ . Для контроля точности будем применять неравенство  $\|\delta_{n,4}\| \leq 5\varepsilon^{5/4}$ . Оно получено с учетом накопления глобальной ошибки из локальных погрешностей [7]. Несмотря на то, что обоснование неравенства проведено на линейном уравнении, оно с достаточно высокой надежностью использовалось для решения нелинейных задач.

Теперь построим неравенство для контроля устойчивости. Применяя к разности  $k_3 - k_2$  формулу Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа первого порядка, имеем  $k_3 - k_2 = h[\partial f(\mu_n) / \partial y](k_2 - k_1) / 6$ , где вектор  $\mu_n$  вычислен в некоторой окрестности решения  $y(t_n)$ . Учитывая, что  $k_2 - k_1 = h^2 f_n' f_n' / 3 + O(h^3)$ , для контроля устойчивости (5) можно использовать неравенство

$$v_{n,4} = 6 \max_{1 \leq i \leq N} |(k_3 - k_2)_i / (k_2 - k_1)_i| \leq 3.5,$$

где числу 3.5 равна длина интервала устойчивости. Отметим, что по мнимой оси область устойчивости также ограничена числом 3.5 (рис. 1). Введем обозначения  $\varepsilon_{n,4} = \delta_{n,4} / 5$ . Тогда для контроля точности схемы (5) можно применять неравенство  $\varepsilon_{n,4} \leq \varepsilon^{5/4}$ , а для контроля устойчивости следующее –  $v_{n,4} \leq 3.5$ .

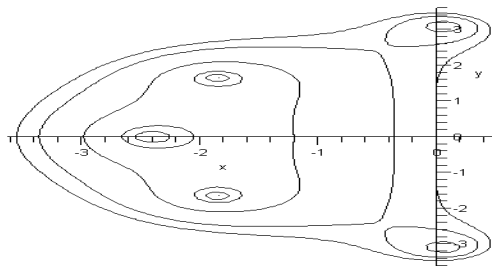


Рис. 1. Область устойчивости метода (5)

Так как оценка максимального собственного числа  $v_{n,4} = h|\lambda_{n,\max}|$  является грубой, то контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг  $h_{n+1}$  вычисляется следующим образом. Новый шаг  $h^{ac}$  по точности определим по формуле  $h^{ac} = q_1 h_n$ , где  $h_n$  есть последний успешный шаг, а  $q_1$ , учитывая соотношение  $\varepsilon_{n,4} = O(h_n^5)$ , задается уравнением  $q_1^5 \varepsilon_{n,4} \leq \varepsilon$ . Шаг  $h^{st}$  по устойчивости зададим формулой  $h^{st} = q_2 h_n$ , где  $q_2$ , учитывая соотношение  $v_{n,4} = O(h_n)$ , определяется из равенства  $q_2 v_{n,4} = 3.5$ . Тогда прогнозируемый шаг  $h_{n+1}$  вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})]. \quad (6)$$

Данная формула стабилизирует шаг на участке установления решения.

### 4. Метод первого порядка

Теперь на основе стадий (5) построим формулу интегрирования более грубую в смысле точности, но с максимальным интервалом устойчивости. Для этого запишем (5) с неопределенными коэффициентами  $p_i$ ,  $1 \leq i \leq 5$ , то есть перепишем (5) в виде

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + \dots + p_5 k_5. \quad (7)$$

Применяя (7) для решения задачи  $y' = \lambda y$ ,  $y(0) = y_0$ ,  $t \geq 0$ ,  $\text{Re}(\lambda) \leq 0$ , получим

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= Q_{5,1}(z) y_n, \quad z = \lambda h, \\ Q_{5,1}(z) &= 1 + \left( \sum_{i=1}^5 p_i \right) z + (2p_2 + 2p_3 + 3p_4 + 6p_5) z^2 / 6 + \\ &+ (4p_3 + 9p_4 + 36p_5) z^3 / 72 + (p_4 + 8p_5) z^4 / 48 + p_5 z^5 / 24. \end{aligned} \quad (8)$$

Область устойчивости (7) ограничена кривой  $|Q_{5,1}(z)|=1$  в комплексной плоскости  $z=\lambda h$ . Выберем коэффициенты  $p_i, 1 \leq i \leq 5$ , так, чтобы схема (7) имела первый порядок точности и максимальный интервал устойчивости. Первое условие будет выполнено, если  $p_1 + \dots + p_5 = 1$ . В результате задача построения численной схемы с максимальным интервалом устойчивости сводится к построению полинома вида

$$Q_{5,1}(z) = 1 + z + \sum_{i=2}^5 c_i z^i, \quad (9)$$

для которого неравенство  $|Q_{5,1}(z)| \leq 1$  выполняется на максимальном интервале  $[\gamma, 0]$ . Приравнявая затем коэффициенты при одинаковых степенях  $z$  в (8) и (9), получим линейную систему уравнений относительно  $p_i, 1 \leq i \leq 5$ , то есть

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5 &= 1, & p_2/3 + p_3/3 + p_4/2 + p_5 &= c_2, \\ p_3/18 + p_4/8 + p_5/2 &= c_3, & p_4/48 + p_5/6 &= c_4, & p_5/24 &= c_5. \end{aligned}$$

Разрешая данную систему, получим коэффициенты метода первого порядка точности с максимальным интервалом устойчивости, то есть

$$\begin{aligned} p_1 &= 1 - 3c_2 + 24c_4 - 48c_5, & p_2 &= 3c_2 - 18c_3 + 36c_4, \\ p_3 &= 18c_3 - 108c_4 + 216c_5, & p_4 &= 48c_4 - 192c_5, & p_5 &= 24c_5. \end{aligned} \quad (10)$$

Для получения коэффициентов (9) рассмотрим одновременно многочлен Чебышева  $T_5(x)$  пятой степени  $T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$ , для которого выполнено неравенство  $|T_5(x)| \leq 1$  при  $x \in [-1, 1]$ . Проведем замену переменных, полагая  $x = 1 - 2z/\gamma$ . Получим

$$T_5(z) = 1 - 50z/\gamma + 400z^2/\gamma^2 - 1120z^3/\gamma^3 + 1280z^4/\gamma^4 - 512z^5/\gamma^5, \quad (11)$$

при этом отрезок  $[\gamma, 0]$  отображается на отрезок  $[-1, 1]$ . Потребуем совпадения коэффициентов (9) и (11) при одинаковых степенях  $z$ . Тогда получим, что коэффициенты  $p_i, 1 \leq i \leq 5$ , схемы (7) и коэффициенты многочлена (9) связаны соотношениями (10), где

$$\gamma = -50, \quad c_2 = 400/\gamma^2, \quad c_3 = -1120/\gamma^3, \quad c_4 = 1280/\gamma^4, \quad c_5 = -512/\gamma^5. \quad (12)$$

Подставляя (12) в (10), получим коэффициенты

$$\begin{aligned} p_1 &= 5.248365568 \cdot 10^{-1}, & p_2 &= 3.260928 \cdot 10^{-1}, & p_3 &= 1.395154944 \cdot 10^{-1}, \\ p_4 &= 9.5158272 \cdot 10^{-3}, & p_5 &= 3.93216 \cdot 10^{-5}, \end{aligned} \quad (13)$$

при которых схема (7) имеет первый порядок точности, а ее интервал устойчивости расширен до 50 по действительной оси. Функция устойчивости схемы (7), (13) совпадает с (11) при  $\gamma = -50$  и имеет вид  $Q_{5,1}(z) = 1 + z + 0,16z^2 + 0,0089z^3 + 0,0002048z^4 + 0,00000z^5$ . Область устойчивости метода приведена на рис. 2.

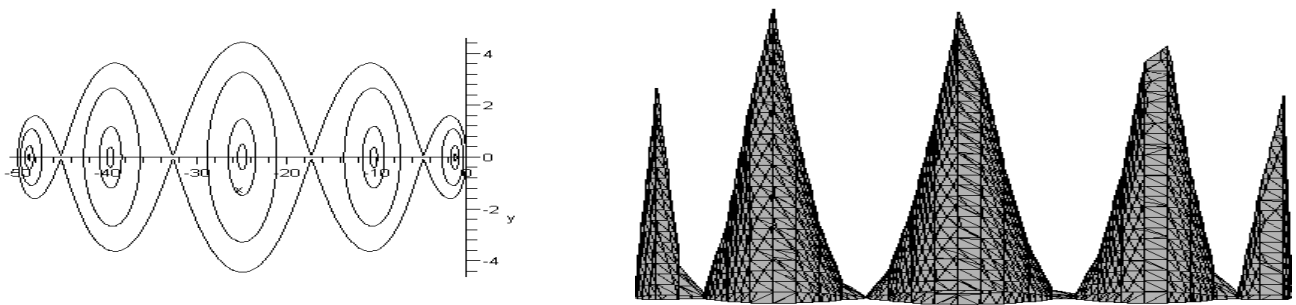


Рис. 2. Область устойчивости метода (7), (13)

Теперь построим неравенство для контроля точности и устойчивости схемы (7), (13). Для этого разложим стадии  $k_i, 1 \leq i \leq 5$ , в ряды Тейлора по степеням  $h$  и подставим в формулу (7), получим  $y_{n+1} = y_n + hf_n + c_2 h^2 f_n' + O(h^3)$ . В случае использования коэффициентов (13) имеем  $c_2 = 0,16$ . Пусть  $y_n = y(t_n)$ . Тогда, сравнивая ряды для точного и приближенного решений до членов с  $h^2$ , получим, что локальная ошибка  $\delta_{n,1}$  схемы (7) первого порядка точности имеет вид  $\delta_{n,1} = (0,5 - c_2) h^2 f_n' + O(h^3)$ . Формулу первого порядка предполагается применять на участке установления, где ошибки за счет неточности (7) невелики. Поэтому для контроля точности вычислений можно использовать оценку локальной ошибки.

Введем обозначения

$$A'_n = |(3 - 6c_2)| \cdot \|k_2 - k_1\|/2, \quad A''_n = |(1 - 2c_2)| \cdot \|hf(y_{n+1}) - k_1\|/2. \quad (14)$$

Учитывая, что имеет место

$$k_2 - k_1 = h^2 f'_n f_n / 3 + O(h^3), \quad hf(y_{n+1}) - k_1 = h^2 f'_n f_n + O(h^3), \quad (15)$$

для контроля точности вычислений применяется неравенство  $A_n' \leq \varepsilon$ , а при выборе шага дополнительно контролируется  $A_n'' \leq \varepsilon$ . При практической реализации алгоритма во второй формуле (14) используется постоянная  $0,5|3-6c_2|$  вместо  $0,5|1-2c_2|$ . Более жесткий контроль при выборе величины шага, чем при контроле точности вычислений, позволяет избежать некоторых повторных вычислений решения (возвратов) вследствие нарушения первого неравенства  $A_n' \leq \varepsilon$ . Так как длина интервала устойчивости схемы (7), (13) равна 50, то для контроля устойчивости можно применять неравенство  $v_{n,4} \leq 50$ .

## 5. Алгоритм интегрирования

На основе построенных явных методов первого и четвертого порядков точности легко сформулировать алгоритм переменного порядка и шага [10]. Расчеты всегда начинаются методом четвертого порядка как более точным. Переход на схему первого порядка осуществляется при нарушении неравенства  $v_{n,4} \leq 3,5$ . Обратный переход на метод четвертого порядка происходит в случае выполнения неравенства  $v_{n,4} \leq 3,5$ . При расчетах по методу первого порядка наряду с точностью контролируется устойчивость, а прогнозируемый шаг выбирается по аналогии с методом четвертого порядка по формуле типа (6).

В случае использования схемы (2) формулировка алгоритма интегрирования также не вызывает трудностей. Нарушение неравенства  $v_{n,4} \leq 50$  вызывает переход на схему (2). Передача управления явным методом происходит в случае выполнения неравенства  $v_{n,0} \leq 50$ , в котором оценка  $v_{n,0}$  вычислена через норму матрицы Якоби. Норма  $\|\xi\|$  в неравенствах для контроля точности задается формулой  $\|\xi\| = \max_{1 \leq i \leq N} \{\xi_i / (|y_n^i| + r)\}$ , где  $i$  – номер компоненты,  $r$  – положительный параметр. Если по  $i$ -й компоненте решения выполняется неравенство  $\|y_n^i\| < r$ , то контролируется абсолютная ошибка  $r\varepsilon$ , в противном случае – относительная ошибка  $\varepsilon$ . Ниже построенный алгоритм переменного порядка и шага, а также с автоматическим выбором явной или  $L$ -устойчивой численной схемы будем называть RKMK4.

## 6. Результаты расчетов

Модель описывается системой двух уравнений в частных производных с начальными и граничными условиями. Это задача проникновения помеченных радиоактивной меткой антител в пораженную опухолью ткань живого организма [11]. Рассматривается система уравнений реакции-диффузии

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - kuv, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -kuv, \quad (16)$$

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 (16) предполагалось, что кинетика реакции описывается законом действующих масс, причем реагент  $A$  подвижен, тогда как реагент  $B$  неподвижен. Изучается полубесконечная пластина, внутри которой равномерно распределен субстрат  $B$ . Реагент  $A$ , попадая на поверхность пластины, начинает в нее проникать. Для моделирования проникновения уравнения (16) 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. Для численного решения переменная  $x$  преобразуется так, чтобы полубесконечная пластина преобразовалась в конечную пластину. Такое преобразование обеспечивает специальное семейство преобразований Мебиуса  $\zeta = x/(x+c)$ ,  $c > 0$ . Это замена переменных преобразует область  $S_T$  в прямоугольник  $\{(\zeta, t): 0 < \zeta < 1, 0 < t < T\}$ . Через переменную  $\zeta$  задача (16) переписывается в виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{(\zeta - 1)^4}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2} + \frac{2(\zeta - 1)^3}{c^2} \frac{\partial u}{\partial \zeta} - kuv, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -kuv \quad (17)$$

с начальными  $u(\zeta, 0) = 0$ ,  $v(\zeta, 0) = v_0$ ,  $\zeta > 0$  и граничными  $u(0, t) = \Phi(t)$ ,  $\partial u(1, t) / \partial \zeta = 0$ ,  $0 < t < T$  условиями. Последнее граничное условие получено из соотношения  $\partial u(\infty, t) / \partial x = 0$ . Дискретизация производных по пространственным переменным с использованием метода прямых приводит к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Для дискретизации применяется равномерная сетка  $\{\zeta_j\}$ ,  $\zeta_j = j \cdot \Delta \zeta$ ,  $\Delta \zeta = 1/N$ ,  $1 \leq j \leq N$ . Через  $u_j$  и  $v_j$  обозначены аппроксимации  $u(\zeta_j, t)$  и  $v(\zeta_j, t)$ , соответственно. Очевидно, что  $u_j$  и  $v_j$  являются функциями от  $t$ . Дискретизации производных первого и второго порядков по пространственной переменной соответственно имеют вид

$$\frac{\partial u_j}{\partial \zeta} = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta\zeta}, \quad \frac{\partial^2 u_j}{\partial \zeta^2} = \frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{(\Delta\zeta)^2}, \quad 1 \leq j \leq N.$$

Значения  $u_0$  и  $u_{N+1}$  получены из граничных условий, они имеют вид  $u_0 = \Phi(t)$  и  $u_{N+1} = u_N$ . Полагая  $y = (u_1, v_1, u_2, v_2, \dots, u_N, v_N)^T$  и  $T=20$ , эта задача имеет вид

$$y' = f(t, y), \quad y(0) = g, \quad y \in R^{2N}, \quad 0 \leq t \leq 20, \quad (18)$$

где  $N$  – параметр, а функция  $f$  определяется формулами

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

где  $g = (0, v_0, 0, v_0, \dots, 0, v_0)^T$ ,  $\alpha_j = 2(j \cdot \Delta\zeta - 1)^3 c^2$ ,  $\beta_j = (j \cdot \Delta\zeta - 1)^4 c^2$ ,  $\Delta\zeta = 1/N$ ,  $1 \leq j \leq N$ ,  $y_{-1}(t) = \Phi(t)$ ,  $y_{2N+1} = y_{2N-1}$ . 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  $t=5$ . Согласно [11] подходящими значениями для параметров  $k$ ,  $v_0$  и  $c$  являются  $k=100$ ,  $v_0=1$  и  $c=4$ . Расчеты проводились при  $N=400$ , то есть система (18) состоит из 800 уравнений. Задача о нахождении разрыва функции  $\Phi(t)$  при  $t=5$  возлагалась на алгоритм управления шагом. Из результатов расчетов следует сокращение числа декомпозиций матрицы Якоби примерно в полтора раза по сравнению с вычислениями  $L$ -устойчивым методом (2), что является следствием расчета некоторых переходных участков по явной численной формуле.

## 7. Заключение

В RKMK4 с помощью признака можно задавать различные режимы расчета:

- 1) явным методом первого или четвертого порядка с контролем или без контроля устойчивости;
- 2) алгоритмом интегрирования переменного порядка и шага на основе явных методов,
- 3)  $L$ -устойчивым методом с аналитической или численной матрицей Якоби;
- 4) с автоматическим выбором явной или  $L$ -устойчивой численной схемы.

Это позволяет применять RKMK4 для решения как жестких, так и нежестких задач. При расчетах с автоматическим выбором численной схемы вопрос о том, является ли задача жесткой или нет, перекладывается на алгоритм интегрирования.

### Литература:

- [1] Э. Хайрер, Г. Ваннер, *Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи*, М.: Мир, 1999.
- [2] G.D. Byrne, A.C. Hindmarsh, ODE solvers: a review of current and coming attractions, *J. of Comput. Physics*, №70, 1987, pp. 1–62.
- [3] H.H. Rosenbrock, Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations, *Computer*, №5, 1963, pp. 329–330.
- [4] В.А. Новиков, Е.А. Новиков, Л.А. Юматова, Замораживание матрицы Якоби в методе типа Розенброка второго порядка точности, *Журнал вычислительной матем. и матем. физики*, т. 27, №3, 1987, с. 385–390.
- [5] Е.А. Новиков, Построение алгоритма интегрирования жестких систем дифференциальных уравнений на неоднородных схемах, *Докл. АН СССР*, т. 278, №2, 1984, с. 272–275.
- [6] В.А. Новиков, Е.А. Новиков, Повышение эффективности алгоритмов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений за счет контроля устойчивости, *Журнал вычислительной матем. и матем. физики*, т. 25, №7, 1985, с. 1023–1030.
- [7] Е.А. Новиков, *Явные методы для жестких систем*, Новосибирск: Наука, 1997.
- [8] Е.А. Новиков, Ю.А. Шитов, Ю.И. Шокин, Одношаговые безытерационные методы решения жестких систем, *Докл. АН СССР*, т. 301, №6, 1988, с. 1310–1314.
- [9] R.H. Merson, An operational methods for integration processes, *Proc. of Symp. on Data Processing. Weapons Research Establishment, Salisbury, Australia*, 1957, p. 331.
- [10] А.Е. Новиков, Е.А. Новиков, Численное решение жестких задач с небольшой точностью, *Математическое моделирование*, т. 22, №1, 2010, с. 46–56.
- [11] F. Mazzia, F. Iavernaro, Test Set for Initial Value Problem Solvers, *Department of Mathematics, University of Bari*, August 2003, Available at <http://www.dm.uniba.it/testset>.