

Задание №10

Жесткие системы обыкновенных дифференциальных уравнений

Постановка задачи

В 50-х годах при решении задач Коши для систем, описывающих кинетику реагирующих друг с другом химических веществ, вычислители столкнулись с крайне неприятным явлением. Расчеты проводились с помощью хорошо отработанных программ, в которых использовались методы Рунге-Кутты и надежные алгоритмы автоматического выбора шага. Эти алгоритмы очень быстро вырабатывали шаг численного интегрирования, столь малый, что часто не было никакой возможности рассчитать процесс на требуемом для приложений отрезке времени, даже используя наиболее мощные компьютеры той эпохи.

Визуальный анализ правых частей, казалось, не давал оснований для каких-то опасений. Типичная система уравнений химической кинетики выглядела (технические подробности опустим) примерно так:

$$\dot{X}_i = \sum A_i^{(j)} X_j + \sum A_i^{(jk)} X_j X_k,$$

где $A_i^{(j)}$, $A_i^{(jk)}$ — константы, характеризующие скорости протекания тех или иных реакций. Бросалась в глаза, правда, существенная разница в их значениях; они отличались друг от друга часто на много порядков. В то же время исключить какие-то «малые» члены из системы, оставив только самые большие, ориентируясь лишь на значения A , было нельзя. Существенно различными были и концентрации разных веществ X_i , причем они могли очень сильно изменяться с течением времени.

Затратив значительное машинное время, удалось получить начальные отрезки траекторий и провести анализ ситуации. Он выявил следующую характерную картину. В начале процесса происходит сильное изменение $X(t)$ и выбираемый программой шаг численного интегрирования вполне разумен: он очень мал, но так и должно быть для аккуратного интегрирования столь быстро меняющихся функций. Через небольшое время t характер траектории резко меняется, она становится гладкой, медленно меняющейся, но программа этого «не замечает» и выбирает такой же малый шаг. Попытки «подсказать» программе выбор существенно большего шага, согласованного с гладкостью решения, немедленно приводили к вычислительной катастрофе.

Как известно, при оценке вычислительной сложности задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений существенны два фактора: строение поля траекторий в окрестности интегрируемой траектории и свойства матрицы системы. Анализ поля направлений таких систем, получивших название «жестких», показал, что траектория $X(t)$ состоит из короткого участка быстрого ее изменения (так называемого «пограничного слоя») и длительного участка очень медленной ее эволюции (иногда его называют «квазистационарным режимом»). Основные трудности связаны именно с расчетом последнего. Пограничный слой интегрируется очень малым шагом, но он настолько краток, что число шагов интегрирования вполне приемлемо. Затем система переходит к квазистационарному режиму, но попытка использовать достаточно большой шаг интегрирования немедленно приводит к смещению численного решения в направлении, практически перпендикулярном настоящему решению.

Таким образом, обычные методы интегрирования ОДУ для таких систем малоприменимы. Были разработаны специальные неявные методы интегрирования, два из которых вам и предлагается реализовать.

Метод Розенброка

Метод пригоден для решения автономных систем (у которых правая часть явно не зависит от времени) вида

$$\dot{X} = f(X).$$

Система приводится к разностной форме

$$(E - \alpha h J - \beta h^2 J^2) \cdot \frac{X_{i+1} - X_i}{h} = f(X_i + \gamma h f(X_i)),$$

где матрица J — якобиан

$$J = \frac{\partial f}{\partial X}(X_i),$$

а E — единичная матрица.

Коэффициенты можно определить, разложив решение в ряд Тейлора в точке X_i и выяснив, при каких значениях разностная форма превратится в равенство. Для данного случая приближенные значения коэффициентов равны $\alpha = 1.077$, $\beta = -0.372$, $\gamma = -0.577$.

Далее на каждом шаге вычисляется якобиан, а затем решается система линейных алгебраических уравнений для получения следующего шага.

Предикторно-корректорный метод

В общем случае предикторно-корректорный метод сводится к решению системы с неявной схемой обычным методом Ньютона, причем в качестве первого приближения для решения используется результат, полученный с помощью какой-либо явной схемы. Количество итераций для метода Ньютона в таком случае можно брать фиксированным (и достаточно малым — в пределах 10), поскольку начальное приближение оказывается достаточно неплохим.

Задание

Требуется реализовать метод Розенброка и предикторно-корректорный метод, использующий экстраполяционный и интерполяционный метод Адамса некоторого одинакового порядка. Технические требования — такие же, как в предыдущем задании, результаты интегрирования требуется вывести в файлы *rosen.dat* и *precor.dat* соответственно.