

§10. Жесткие ОДУ

В завершение разговора об ОДУ нельзя не сказать несколько слов о классе задач, называемых *жесткими*, для решения которых обычные методы (типа Рунге-Кутты) неприменимы. Исторически интерес к жестким системам возник в середине XX в. при изучении уравнений химической кинетики с одновременным присутствием очень медленно и очень быстро протекающих химических реакций. Тогда неожиданно оказалось, что считавшиеся исключительно надежными методы Рунге-Кутты стали давать сбой при расчете этих задач.

Рассмотрим постановку жестких задач на классическом примере:

$$\frac{dy}{dt} = -A[y - \cos(t)] \quad (88)$$

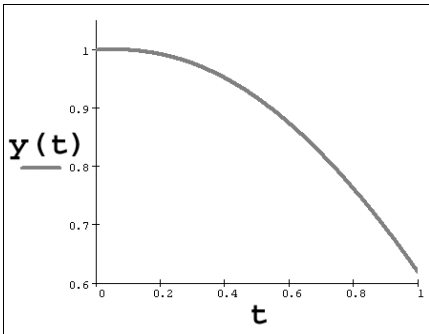


Рис. 30. Решение (88) при $A=10$ алгоритмом Рунге-Кутты

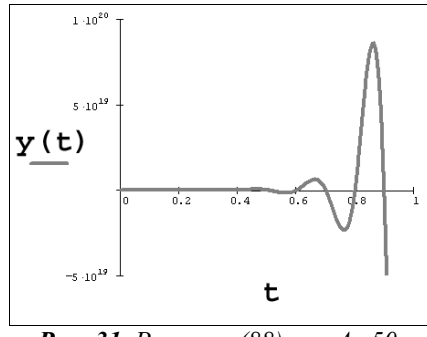


Рис. 31. Решение (88) при $A=50$ алгоритмом Рунге-Кутты

Решение этого уравнения для $A=10$ показано на рис. 30. Если изменить его на $A=50$ (рис. 31), то решение неожиданно меняется до неузнаваемости. Характерная «разболтка» решения говорит о неустойчивости алгоритма. Первое, что можно сделать – это увеличить количество шагов в методе Рунге-Кутты. В рассматриваемом случае действительно можно подобрать такое

значение шага, которое будет обеспечивать устойчивость решения.

Таким образом, во-первых, мы выяснили, что одни и те же уравнения с разными параметрами могут быть как жесткими, так и нежесткими. Во-вторых, чем жестче уравнение, тем больше шагов в обычных численных методах требуется для его устойчивого решения. С классическим примером ОДУ с рис. 30-31 все получилось хорошо, т.к. оно не очень жесткое, и небольшое увеличение числа шагов устраняет все проблемы. Для решения обычными методами более жестких уравнений требуются миллионы, миллиарды и даже большее число шагов.

Строгого общепринятого математического определения жестких ОДУ нет. Принято считать, что жесткие системы – это те уравнения, решение которых получить намного проще с помощью определенных неявных методов, чем с помощью явных методов. Некоторые ученые замечают, что в последние годы методы Рунге-Кутты, считавшиеся ранее незыблемыми, стали уступать свое главенствующее положение среди алгоритмов решения ОДУ универсальным методам, способным решать жесткие задачи.

С самого начала исследования жестких ОДУ было замечено, что они лучше поддаются решению неявными методами. В частности, можно применять различные неявные вариации многошаговых алгоритмов, например, неявные *схемы Адамса*.

Вообще говоря, в случае жестких ОДУ предъявляются обычно следующие требования к численному методу: согласованность (схема должна аппроксимировать ОДУ); соответствие специальным требованиям устойчивости; необходимость пройти ряд вычислительных тестовых задач.

Для реализации приведенной схемы Адамса (или любой другой неявной схемы) на каждом шаге по времени придется решать приведенную систему нелинейных алгебраических уравнений. В последнее время появились алгоритмы, в которых система

нелинейных уравнений не решается. Приведем основные идеи довольно популярного *алгоритма Розенброка*, реализованного в ряде математических пакетов. Он основан на приведении жестких дифференциальных уравнений:

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t) \quad (89)$$

к разностной форме типа:

$$(I - \alpha \Delta A - \beta \Delta^2 A^2) \cdot \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta} = f(y_i + \gamma \cdot \Delta \cdot f(y_i)) \quad (90)$$

Здесь Δ – шаг интегрирования, α , β , γ – некоторые (априори неизвестные) параметры, а

$$A = \frac{\partial f(y_i)}{\partial y} \quad (91)$$

Если рассматривается не одно уравнение (89), а система N уравнений (с неизвестным вектором y), то A является матрицей размера $N \times N$, составленной из частных производных (якобианом).

Если осуществить разложение решения в ряд Тейлора в точке y_i , и подставить его в (90), то после несложных преобразований, можно вычислить конкретные значения параметров α , β и γ , которые превращают уравнение (90) в верное равенство. А именно:

$$\alpha = 1.077, \quad \beta = -0.372, \quad \gamma = -0.577. \quad (92)$$

Таким образом, алгоритм Розенброка основан на следующих действиях, выполняемых на каждом i -м шаге интегрирования:

1. Вычисляется матрица производных (91) в точке y_i .
2. Следующая точка y_{i+1} находится из матричного уравнения (90) с коэффициентами (92).

Исходя из этого, алгоритм Розенброка является *одношаговым* и *безытерационным*. Однако, как видно из формулы алгоритма,

пересчет каждого шага требует, во-первых, численного определения производных функции f_y . Не забывайте, что, в случае системы ОДУ, $y(t)$ – это вектор, и вычислять придется якобиан – функциональную матрицу частных производных. Во-вторых, подразумевается решение системы линейных уравнений (поскольку искомые компоненты вектора y_{i+1} входят в матричное уравнение в линейной комбинации).

Пример: химическая кинетика

В завершение разговора о жестких ОДУ приведем еще один классический пример. Рассмотрим систему трех ОДУ:

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= -A_1 u_1 + A_2 u_2 u_3, \\ \frac{du_2}{dt} &= A_1 u_1 - A_2 u_2 u_3 - A_3 u_2, \\ \frac{du_3}{dt} &= A_3 u_2. \end{aligned} \quad (93)$$

Система ОДУ (93) представляет модель химического взаимодействия трех веществ: вещество "1" медленно превращается в "2", "1" → "2" (со скоростью $A_1=0.1$), вещество "2" превращается очень быстро в вещество "3": "2" → "3" ($A_3=10^3$). И, наконец, вещество "2" при каталитическом воздействии вещества "3", превращается в "1" (со средней скоростью $A_2=10^2$): "2"+"3" → "1"+"3".

Решение системы (93) методом Розенброка показано на рис. 32-33. Факт, на который стоит обратить внимание – значительное различие в порядке величины получающегося решения, что очень характерно для жестких систем. Как видно из рис. 32, концентрация второго реагента существенно (в тысячи раз) превышает концентрацию остальных.

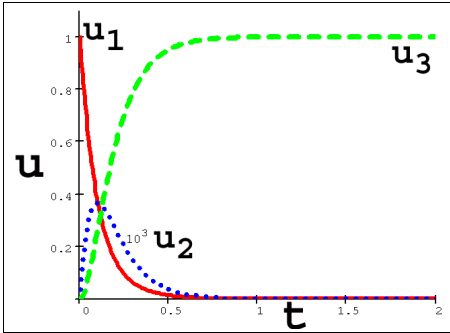


Рис. 32 Растрываемые графики решения жесткой системы (93)

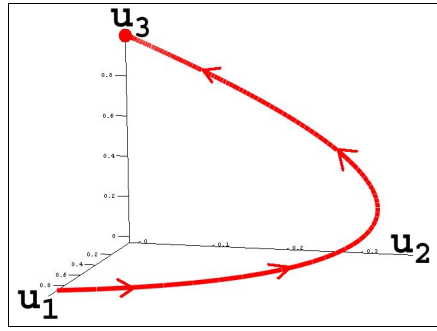


Рис. 33. Решение системы (93) в фазовом пространстве

В, принципе можно было бы снизить жесткость системы «вручную», применяя масштабирование неизвестных. Для этого нужно искусственно уменьшить искомую функцию u_2 , к примеру, в тысячу раз, разделив все слагаемые в системе ОДУ, содержащие u_2 , на 1000. Решение масштабированной системы легко получается методом Рунге–Кутты.

Вернемся к анализу системы ОДУ (93). Бросается в глаза сильно различающийся порядок коэффициентов при разных слагаемых. Именно степень этого различия чаще всего и определяет жесткость системы ОДУ. Соответствующей характеристикой служит якобиан: чем он сингулярнее, тем жестче система уравнений. В приведенном примере определитель якобиана и вовсе равен нулю при любых значениях u .

Важно заметить, что до сих пор мы имели дело с примером не очень жесткой системы. Если вместо скоростей химических реакций 0.1, 10^3 и 10^2 взять другие числа, например, 0.05, 10^4 и 10^7 , соответственно (что весьма характерно для прикладных задач химической кинетики), то система будет еще более жесткой, однако метод Розенброка справляется с ней с легкостью.