Явно-неявный алгоритм интегрирования жестких задач второго порядка точности

Е.А. Новиков
Институт вычислительного моделирования СО РАН
e-mail: novikov@icm.krasn.ru

При моделировании кинетики химических реакций, расчете электронных схем, моделировании критических ситуаций в больших электрических сетях и других важных приложениях возникает проблема численного решения жестких систем. Основные тенденции при построении численных методов связаны с расширением их возможностей для решения задач высокой размерности. Математические постановки практических задач постоянно уточняются, что приводит как к росту размерности, так и к усложнению правой части системы дифференциальных уравнений. Во многих случаях расчеты требуется проводить с так называемой инженерной точностью — порядка 1% и ниже. Это связано с тем, что измерение констант, входящих в правую часть системы дифференциальных уравнений, часто проводится достаточно грубо. Иногда такая точность расчетов является удовлетворительной с точки зрения поставленной цели. Известно, что порядок аппроксимации численной схемы следует сочетать с требуемой точностью расчетов.

Современные методы решения жестких задач, как правило, используют вычисление и обращение матрицы Якоби системы дифференциальных уравнений. В случае большой размерности системы эффективность численных методов 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. Некоторым аналогом замораживания является применение в расчетах алгоритмов интегрирования на основе явных и L-устойчивых методов с автоматическим выбором численной схемы. Здесь построены явная двухстадийная схема типа Рунге-Кутты и L-устойчивый (2,1)-метод второго порядка точности. На основе стадий явного метода построена численная формула первого порядка с расширенным до 8 интервалом устойчивости. Разработан алгоритм интегрирования переменного порядка и шага, в котором выбор наиболее эффективной численной схемы осуществляется на каждом шаге с применением неравенства для контроля устойчивости. Приведены результаты расчетов, подтверждающие эффективность построенного алгоритма.