



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 146 за 2019 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Белов А.А., Булатов П.Е.,
Калиткин Н.Н.

Сравнительный анализ
алгоритмов автоматического
выбора шага для жёстких
задач Коши

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Белов А.А., Булатов П.Е., Калиткин Н.Н. Сравнительный анализ алгоритмов автоматического выбора шага для жёстких задач Коши // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 146. 34 с. <http://doi.org/10.20948/prepr-2019-146>
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-146>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
ИМ. М.В. КЕЛДЫША

А. А. Белов, П. Е. Булатов, Н. Н. Калиткин

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АЛГОРИТМОВ
АВТОМАТИЧЕСКОГО ВЫБОРА ШАГА
ДЛЯ ЖЁСТКИХ ЗАДАЧ КОШИ

Москва, 2019

А. А. Белов, П. Е. Булатов, Н. Н. Калиткин. Сравнительный анализ алгоритмов автоматического выбора шага для жёстких задач Коши

Для решения жёстких задач Коши широко применяются алгоритмы автоматического выбора шага. Наиболее популярными являются пакеты Гира и Дормана-Принса. Эти методы хорошо зарекомендовали себя на мягких задачах, но на жёстких задачах могут давать сбои. Кроме того, они не дают гарантированной оценки погрешности. Известны примеры, когда фактическая погрешность на много порядков превышает заданную пользователем. В данной работе найдены новые примеры задач, в которых стандартные алгоритмы теряют надёжность.

Ключевые слова: жёсткие задачи Коши, метод Гира, метод Дормана-Принса, задача химической кинетики, задача Аренсторфа

A. A. Belov, P. E. Bulatov, N. N. Kalitkin. Comparative analysis of automatic step selection algorithms for stiff Cauchy problems

Automatic step selection algorithms are widely used to solve stiff Cauchy problems. The Gear and Dormand-Prince packages are the most popular ones. These methods are well established being used in soft problems but they can malfunction in stiff ones. Moreover, they do not provide guaranteed error estimation. The cases are known where the real error exceeds the user defined one by many orders of magnitude. In that work the new problem examples are found in which standard algorithms lose robustness.

Keywords: stiff Cauchy problems, Gear method, Dormand-Prince method, chemical kinetics, Arenstorf problem

Работа поддержана грантом РФФИ №18-01-00175.

1 Введение

Многие прикладные задачи сводятся к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{u}}{dt} &= \mathbf{F}(\mathbf{u}, t), \\ \mathbf{u}(t_0) &= \mathbf{u}_0.\end{aligned}\tag{1}$$

Здесь \mathbf{u} – вектор неизвестных функций, \mathbf{F} – вектор правых частей. Для решения задач Коши существуют различные численные методы. Из них наименьшей трудоёмкостью обладают явные схемы, например, явные схемы Рунге-Кутты (Explicit Runge-Kutta, ERK) [1]. Для схем с числом стадий s от 1 до 4 порядок точности равен s . При большем числе стадий он оказывается меньше s . Это явление называется порогами Бутчера. Приведем схемы Рунге-Кутты с числом стадий от 1 до 4 и оптимальными коэффициентами [1].

- Одностадийная схема ERK1 (схема Эйлера)

$$\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + h\mathbf{w}_1;\tag{2}$$

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{U}).\tag{3}$$

- Двухстадийная схема ERK2

$$\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + h\left(\frac{1}{4}\mathbf{w}_1 + \frac{3}{4}\mathbf{w}_2\right);\tag{4}$$

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{U}), \quad \mathbf{w}_2 = \mathbf{F}\left(\mathbf{U} + \frac{2}{3}h\mathbf{w}_1\right).\tag{5}$$

- Трехстадийная схема ERK3

$$\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + h\left(\frac{2}{9}\mathbf{w}_1 + \frac{3}{9}\mathbf{w}_2 + \frac{4}{9}\mathbf{w}_3\right);\tag{6}$$

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{U}), \quad \mathbf{w}_2 = \mathbf{F}\left(\mathbf{U} + \frac{1}{2}h\mathbf{w}_1\right), \quad \mathbf{w}_3 = \mathbf{F}\left(\mathbf{U} + \frac{3}{4}h\mathbf{w}_2\right).\tag{7}$$

- Четырехстадийная схема ERK4

$$\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + h\left(\frac{1}{6}\mathbf{w}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{w}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{w}_3 + \frac{1}{6}\mathbf{w}_4\right);\tag{8}$$

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{U}), \quad \mathbf{w}_2 = \mathbf{F}\left(\mathbf{U} + \frac{1}{2}h\mathbf{w}_1\right),\tag{9}$$

$$\mathbf{w}_3 = \mathbf{F}\left(\mathbf{U} + \frac{1}{2}h\mathbf{w}_2\right), \quad \mathbf{w}_4 = \mathbf{F}\left(\mathbf{U} + h\mathbf{w}_3\right).$$

Задача (1) называется *жесткой*, если в ней характерные времена процессов имеют большую разномасштабность. При этом в решении возникают участки очень быстрого изменения, называемые *пограничными слоями*, и плавные *регулярные* участки. Жёсткие задачи Коши сложны для численного решения. Если вести расчёты с постоянным шагом, то его величина должна быть меньше характерного времени самого быстрого процесса в системе. При этом для плавных участков решения такой шаг будет избыточно мелким. Общее число шагов будет очень большим, что делает решение такой задачи слишком трудоёмким. Примером жёсткой задачи Коши является задача химической кинетики (см., например, [2] и [3]).

Для решения жёстких задач Коши широко применяются алгоритмы автоматического выбора шага. Наиболее популярными являются пакеты Гира и Дормана-Принса, описанные в [4]. Метод Гира основан на локальном сгущении сеток, а метод Дормана-Принса использует вложенные схемы. Эти методы хорошо зарекомендовали себя и на мягких задачах либо задачах невысокой жёсткости дают хорошую точность уже при малом числе шагов. Однако на более сложных жёстких задачах они могут давать сбои. Например, известны случаи [4], когда стандартные пакеты измельчают шаг там, где это не нужно. Кроме того, они не дают гарантированной оценки погрешности, то есть фактическая погрешность может значительно отличаться от заданной.

Задача Коши называется плохо обусловленной, если её решение сильно зависит от начальных условий. Такие задачи необязательно должны быть жёсткими, но при их численном решении быстро накапливаются ошибки машинного округления. Для решения таких задач обычно применяют схемы высоких порядков точности, минимизирующие накопление ошибок. Примером плохо обусловленной задачи Коши является траекторная задача Арэнсторфа.

Работоспособность метода обычно проверяется на задаче с известным точным решением. При этом численное решение непосредственно сравнивается с точным и вычисляется величина фактической погрешности. Большое количество тестовых задач приведено в [4]. В данной работе в качестве теста взяты две задачи: задача кинетики химических реакций, которая считается особенно сложной, и задача Арэнсторфа. Точные решения этих задач неизвестны. Поэтому проверить работу стандартных пакетов можно только сравнивая результаты с другим численным расчётом, надёжность которого не вызывает сомнений. Ранее подобные сравнительные тесты на прикладных задачах не проводились, так как не существовали достаточно надёжные методы. В качестве такого «контрольного» метода в данной работе используются расчёты на геометрически-адаптивных сетках, предложенных совсем недавно в [5]–[8]. Наиболее совершенный вариант этого метода построен в [9].

2 Геометрически-адаптивные сетки

2.1 Параметризация через длину дуги

Введём параметризацию через длину дуги интегральной кривой в пространстве переменных t, u_1, \dots, u_J [1], [10]. В этом аргументе вектор правых частей имеет единичную длину, и шаг по времени в узких пограничных слоях измельчается. Поэтому переход к длине дуги – это простейший алгоритм автоматического выбора шага по наклону интегральной кривой. В работах [11]–[13] показано, что в этом аргументе также применим метод Ричардсона. Кроме того, доказано [14], что параметризация через длину дуги является наилучшей с точки зрения обусловленности системы.

Чтобы осуществить переход к длине дуги, формально добавим к компонентам вектора \mathbf{u} нулевую компоненту $u_0 = t$, увеличив порядок системы на 1. Поскольку время и концентрации имеют разный физический смысл и разные размерности, необходимо перейти к обезразмеренным переменным

$$U_0 = \frac{t}{\nu_0}; \quad U_j = \frac{u_j}{\nu_j}, \quad j = \overline{1, J}. \quad (10)$$

Здесь ν_j , $j = \overline{0, J}$ – размерные множители (**веса**), определяемые характерной величиной каждой компоненты. Такое обезразмеривание зачастую сильно облегчает её численное решение. Например, в случае с задачей химической кинетики вводятся два таких веса. Вес ν_0 равен полному времени расчёта, вес ν – сумме начальных концентраций всех частиц.

Тогда выражение для элемента длины дуги интегральной кривой принимает вид

$$dl^2 = \sum_{j=0}^J dU_j^2 = \sum_{j=0}^J \frac{du_j^2}{\nu_j^2} = \frac{dt^2}{\nu_0^2} + \sum_{j=1}^J \frac{du_j^2}{\nu_j^2}, \quad (11)$$

$$dl = \frac{dt}{\nu_0} \sqrt{1 + \nu_0^2 \sum_{j=1}^J \frac{f_j^2}{\nu_j^2}}. \quad (12)$$

Подставляя (10) и (12) в (1), получаем задачу, параметризованную через длину дуги

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{U}}{dl} &= \mathbf{F}(\mathbf{U}); \\ \mathbf{U}(0) &= \mathbf{U}_0; \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$F_0 = \frac{1}{\rho}, \quad F_j = \frac{\nu_0 f_j}{\nu_j \rho}, \quad j = \overline{1, J}, \quad \rho = \sqrt{1 + \nu_0^2 \sum_{j=1}^J \frac{f_j^2}{\nu_j^2}}. \quad (14)$$

Легко проверить, что новый вектор правых частей имеет единичную длину

$$\sum_{j=0}^J F_j^2(\mathbf{U}) = 1. \quad (15)$$

В дальнейшем заглавной буквой U мы будем обозначать вектор значений решения, включающий в себя нулевую компоненту (время), а строчной u – без этой компоненты.

2.2 Выбор шага по кривизне

В работе [15] показано, что для задач высокой жёсткости одного лишь перехода к длине дуги недостаточно. Шаг необходимо уменьшать не только в пограничных слоях, но и в областях большой кривизны решения. Эти области были названы *переходными зонами*.

В работах [6]–[8] была предложена следующая явная формула шага в аргументе «длина дуги»:

$$h_n = \frac{h_*}{1 + (L^2 (\kappa_n, \kappa_n))^{1/4}}. \quad (16)$$

Здесь κ – вектор кривизны (его размерность равна $J+1$), h_* – шаг по длине дуги на прямолинейном участке интегральной кривой, L – полная длина дуги. Множитель L^2 добавлен из соображений размерности. Показатель степени $1/4$ подбирался в [5]–[8] и в по тестовым расчётам модельных задач.

Формула (16) уменьшает шаг в переходных зонах, а в регулярных областях с малой кривизной шаг становится равным константе h_* .

2.3 Вычисление кривизны

Поскольку кривизна есть вторая производная решения по длине дуги l , её можно рассматривать как первую производную от единичного вектора правых частей по длине дуги. В общем случае можно использовать следующую формулу [5], [16]:

$$\kappa = \frac{d\mathbf{F}}{dl} \approx \frac{\mathbf{F}(\hat{\mathbf{U}}) - \mathbf{F}(\mathbf{U})}{h}. \quad (17)$$

Здесь $\hat{\mathbf{U}}$ – решение в текущий момент времени, \mathbf{U} – решение в предыдущий момент (то есть кривизна вычисляется дифференцированием назад). Эта формула пригодна для любой схемы и имеет первый порядок точности: её можно приписать середине интервала, так что это значение сдвинуто на полшага относительно нужного нам $\hat{\kappa}$.

Первый шаг на сетке вычисляется по величине кривизны

$$\kappa_0 \approx \frac{\mathbf{F}(\mathbf{U}_1) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_0)}{h_*}. \quad (18)$$

В [5], [16] предложены специализированные формулы кривизны для схем ERK2 и ERK4, использующие промежуточные стадии этих схем и имеющие более высокую точность. Формулы для схем ERK3 и ERK4 имеют второй порядок точности, а формула для ERK2 – первый, но меньшую невязку, чем (17). Приведём эти формулы.

- Двухстадийная схема ERK2

$$\hat{\kappa} = \frac{2}{h} \left(\mathbf{F}(\hat{\mathbf{U}}) - \mathbf{w}_1 \right). \quad (19)$$

- Трёхстадийная схема ERK3

$$\hat{\kappa} = \frac{1}{h} \left(4\mathbf{F}(\hat{\mathbf{U}}) - \frac{8}{3}\mathbf{w}_3 - 2\mathbf{w}_2 + \frac{2}{3}\mathbf{w}_1 \right). \quad (20)$$

- Четырёхстадийная схема ERK4

$$\hat{\kappa} = \frac{1}{h} \left(3\mathbf{F}(\hat{\mathbf{U}}) - 2\mathbf{w}_3 - 2\mathbf{w}_2 + \mathbf{w}_1 \right). \quad (21)$$

Здесь $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3$ – это стадии соответствующих схем (5)–(9).

Эти формулы относятся к явным схемам. Для неявных вектор κ вычисляется через матрицу Якоби от правых частей.

2.4 Контроль точности

Одновременно с нахождением решения необходимо вычислять апостериорную асимптотически точную оценку погрешности по методу Ричардсона. Для этого в [6]–[8] была предложена процедура сгущения сеток, которую можно применять с геометрически-адаптивными сетками. Сгущение происходит в два этапа.

На первом этапе строится последовательность сеток, на каждой из которых шаг выбирается по формуле (16) и при очередном сгущении h_* уменьшается в 2 раза. Чётные узлы новой сетки находятся близко к соответствующим узлам старой сетки, но всё же не совпадают с ними. Поэтому на данном этапе сгущения применить метод Ричардсона не удаётся.

Первый этап сгущения проводится до тех пор, пока соответствующие узлы соседних сеток не станут достаточно близки друг к другу. Близость

узлов определяется, например, относительным среднеквадратичным уклоном узлов:

$$\Delta = \frac{1}{L} \sqrt{\frac{1}{S} \sum_{n=0}^S (l_n - \hat{l}_{2n})^2} < \delta. \quad (22)$$

Здесь l_n – узлы предыдущей сетки, \hat{l}_{2n} – узлы более подробной сетки, а предел суммирования равен $S = \min \{ [\hat{N}/2], N \}$. Величина δ является настроечным параметром. В [6], [7] было рекомендовано значение $\delta = 10^{-1} \div 10^{-2}$.

Второй этап начинается с последней сетки первого этапа и заключается в том, что для получения новой сетки каждый шаг h_n предыдущей сетки делится на две части в соотношении $\sqrt[4]{h_{n+1}/h_{n-1}}$. Первый и последний шаги грубой сетки делятся в соотношении $\sqrt{h_{n+1}/h_n}$, поэтому можно применять метод Ричардсона и вычислять асимптотически точную оценку погрешности [17]

$$\mathbf{R} = \frac{\hat{\mathbf{U}}_{2N} - \mathbf{U}_N}{2^p - 1}. \quad (23)$$

Здесь $\hat{\mathbf{U}}_{2N}$ и \mathbf{U}_N – решения на сетках $2N$ и N соответственно, p – порядок точности используемой схемы.

Чтобы погрешность относилась к расчётному моменту времени, а не к расчётной длине дуги, следует использовать так называемую *приведённую оценку* [18]

$$r_j(t) = R_j(l) - f_j(\mathbf{u})R_0(l), \quad 1 \leq j \leq J. \quad (24)$$

Для нахождения относительной погрешности величина (24) нормируется на вес ν_j , после чего вычисляется их среднеквадратичная норма.

3 Сравнение решений

В данной работе стандартные пакеты Гира и Дормана-Принса сравниваются с методом геометрически-адаптивного выбора шага на жёстких и плохо обусловленных задачах Коши. Задача решается двумя способами: при помощи геометрически-адаптивных сеток с применением явных схем Рунге-Кутты и при помощи стандартного пакета Гира или Дормана-Принса. Решение по стандартным пакетам осуществляется двумя способами: в аргументе «время» и в аргументе «длина дуги».

При решении задачи с геометрически-адаптивным выбором шага контролируется сходимость решения по методу Ричардсона. Сгущение сеток прекращается тогда, когда погрешность достигает ошибок машинного округления. Поэтому это решение можно считать точным.

Для расчётов на геометрически-адаптивных сетках использовались явные схемы Рунге-Кутты третьего (6), (7) и четвёртого порядка (8), (9). Отметим один существенный нюанс. Если использовать схему достаточно высокого порядка точности на достаточно мягкой задаче, то может не получиться регулярного участка сходимости с теоретическим порядком точности. Это обусловлено тем, что погрешность выходит на фон ошибок машинного округления ещё на нерегулярном этапе, минуя этап регулярной сходимости. В таком случае нужно выбирать схему меньшего порядка точности.

3.1 Процедура сравнения

Полученные по стандартным пакетам решения сравниваются с решением, полученным на геометрически-адаптивных сетках. Мерой различия служит их среднеквадратичная разность по всем узлам решения, полученного по стандартному пакету

$$D_j = \sqrt{\frac{1}{M+1} \sum_{m=0}^M (U_j - \tilde{U}_j)^2}. \quad (25)$$

Здесь U_j и \tilde{U}_j – j -е компоненты решений, полученных геометрически-адаптивным методом и по стандартным пакетам соответственно, M – число шагов в решении, полученном по стандартным пакетам. Отметим, что, как правило, $M \ll N$, где N – число шагов в «точном» решении, полученном геометрически-адаптивным методом. Величины U_j и \tilde{U}_j нормированы на веса ν_j , поэтому мера различия решений безразмерна.

Узлы геометрически-адаптивных сеток и узлы сеток, выданных стандартными пакетами, отличаются. Поэтому в (25) следует использовать интерполяцию U_j , в которую подставляются узлы сеток, выданных стандартными пакетами.

3.2 Способы интерполяции

Рассмотрены два способа интерполяции: кусочно-линейный и по Эрмиту с сохранением непрерывности первой производной [19].

Кусочно-линейная интерполяция. Данный метод строит непрерывную кусочно-гладкую функцию, соединяя прямыми отрезками точки, известные по заданным сеточным значениям функции. На отрезке между двумя соседними точками L_{n+1} и L_n , в которых заданы сеточные значения, интерполированная функция будет иметь вид

$$\mathbf{U}(l) = \frac{\mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{U}_n}{L_{n+1} - L_n} (l - L_n) + \mathbf{U}_n, \quad l \in [L_n, L_{n+1}]. \quad (26)$$

Эрмитова интерполяция. Данный метод интерполирует сеточную функцию с сохранением гладкости во всех точках. На такой интерполяции можно ожидать более высокой точности. Чтобы построить эрмитову интерполяцию между двумя соседними точками L_{n+1} и L_n , нужно знать в этих двух точках значения решения \mathbf{U} и его первой производной \mathbf{F} (то есть правой части):

$$\mathbf{U}(l) = \mathbf{a} + \mathbf{b}\xi + \left(\xi^2 - \frac{1}{4}\right)(\mathbf{c} + \mathbf{d}\xi), \quad l \in [L_n, L_{n+1}], \quad (27)$$

где

$$\mathbf{a} = \frac{1}{2}(\mathbf{U}_{n+1} + \mathbf{U}_n); \quad (28)$$

$$\mathbf{b} = (\mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{U}_n); \quad (29)$$

$$\mathbf{c} = \frac{1}{2}(\mathbf{U}_{n+1} + \mathbf{U}_n); \quad (30)$$

$$\mathbf{d} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{F}_n)(L_{n+1} - L_n); \quad (31)$$

$$\mathbf{b} = (\mathbf{F}_{n+1} + \mathbf{F}_n)(L_{n+1} - L_n) + 2(\mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{U}_n); \quad (32)$$

$$\xi = \frac{l - \frac{1}{2}(L_{n+1} + L_n)}{L_{n+1} - L_n}. \quad (33)$$

3.3 Обратная интерполяция длины дуги

Если решение по стандартному пакету вычислялось в аргументе «длина дуги», дополнительные действия не требуются. Если же оно вычислялось в аргументе «время», нужно предварительно найти соответствующее узлу значение длины дуги. Для этого проинтерполируем сеточную функцию $l(t)$, известную нам из «точного» решения, и вычислим её значение в узле \tilde{t}_m сетки, выданной стандартным пакетом. Так как функция $t(l)$ монотонно возрастает, то она является обратимой, и производная $l(t)$ как обратной к ней функции равна

$$\frac{dl}{dt}(t) = \frac{1}{\nu_0 F_0(\mathbf{U}(t))}, \quad (34)$$

где ν_0 – вес по времени, если он используется.

3.4 Погрешность интерполяции

После нахождения «точного» решения вычисляется оценка погрешности интерполяции. Возьмём некоторый внутренний узел n и построим интерполяцию повторно по всем узлам, кроме n . Найдём значение этой интерполяции в узле n и вычислим отличие от исходного значения $(\mathbf{U}_j)_n$ в этом

узле. Среднеквадратичная норма этой разности по всем внутренним узлам и берется в качестве оценки погрешности интерполяции:

$$D_j^{Int} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} ((U_j)_n - U_j(L_n))^2}, \quad (35)$$

где $U_j(L_n)$ – интерполянта между узлами L_{n-1} и L_{n+1} , взятая в точке L_n ; $(U_j)_n$ – сеточное значение в узле L_n . Величины U_j нормированы на веса ν_j , поэтому погрешность интерполяции безразмерна.

Данная оценка позволяет оценить погрешность, которую вносит в «точное» решение интерполяция.

3.5 Процедура расчётов

Вычисления производились в среде MATLAB R2016b с использованием встроенных реализаций пакетов Гира и Дормана-Принса (функции MATLAB `ode15s` и `ode45` соответственно). Эти реализации широко применяются для практических расчётов, поэтому и используются в данной работе. Для каждого пакета проводилась серия расчётов с уменьшением заданной относительной точности `RelTol`. При заданных значениях `RelTol` меньше $2.22045 \cdot 10^{-14}$ эти функции автоматически увеличивают `RelTol` до $2.22045 \cdot 10^{-14}$, тем самым делая невозможными расчёты при меньших значениях.

Во всех случаях различие результатов расчётов с использованием кусочно-линейной и эрмитовой интерполяции было незначительным. Это обусловлено тем, что шаги в «точном» решении очень малы. Поэтому погрешность интерполяции в промежутках между узлами достаточно мала. Напомним, что погрешность линейной интерполяции есть $O(h^2)$, а эрмитовой – $O(h^4)$.

4 Кинетика химических реакций

4.1 Горение водорода в кислороде

Постановка задачи. Рассмотрим задачу химической кинетики для процесса горения водорода в кислороде. Учитываются 25 элементарных реакций с участием 9 видов частиц (O , H , O_2 , H_2 , OH , HO_2 , H_2O , O_3 , H_2O_2). Это наиболее полный список реакций, найденных нами в химической литературе. Эти реакции приведены в таблице 1. Большинство реакций являются двухчастичными, некоторые – трёхчастичными. Вероятность столкновения четырёх и более частиц пренебрежимо мала, причём даже для

плотных газов. Поэтому такие реакции не рассматриваются. Температура считается постоянной и равной 6000 К или 2000 К.

Эта задача приводит к системе ОДУ

$$\begin{aligned} \frac{du_j}{dt} = f_j(\mathbf{u}, T), \quad f_j(\mathbf{u}, T) = \sum_{i,l,q=1}^J (\pm K_{jil}(T) u_i u_l \pm K_{jilq}(T) u_i u_l u_q); \\ u_j(t_0) = u_j^0; \quad \mathbf{u} = (u_1 \dots u_J)^T; \quad 1 \leq j, i, l, q \leq J. \end{aligned} \quad (36)$$

Здесь $u_j \geq 0$ – концентрации, J – число компонент, включая все промежуточные. $K(T)$ – это константы скоростей элементарных реакций. Они могут протекать как в прямом, так и в обратном направлении. Под **прямой реакцией** будем понимать экзотермическую (то есть протекающую в направлении выделения тепла), а под **обратной** – эндотермическую (в которой тепло поглощается). Выделяемая или поглощаемая энергия E называется **энергией реакции**. Правые части (36) являются полиномиальными: квадратичными для двухчастичных реакций либо кубическими для трёхчастичных. Знак «+» перед очередным слагаемым ставится, если оно приводит к наработке j -й компоненты, иначе ставится знак «-». Поэтому правые части можно до расчёта разделить на положительную и отрицательную:

$$\begin{aligned} \frac{du_j}{dt} = f_j(\mathbf{u}) = \psi_j(\mathbf{u}) - u_j \varphi_j(\mathbf{u}), \\ u_j \geq 0, \varphi_j(\mathbf{u}) \geq 0, \psi_j(\mathbf{u}) \geq 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Здесь $u_j, \varphi_j(\mathbf{u}), \psi_j(\mathbf{u})$ – неотрицательные функции. В [20] разработан алгоритм, позволяющий автоматически записывать правые части по заданной системе реакций. Начальные условия соответствуют «гремучей смеси» (2 части H_2 на 1 часть O_2) при атмосферном давлении.

Сложность численного решения задачи химической кинетики заключается в большом количестве компонент и в огромной расномасштабности скоростей реакций (до 10 порядков), то есть задача является жёсткой. Жёсткость задачи определяется температурой T . Любопытно, что при снижении температуры жёсткость задачи возрастает, поскольку увеличивается различие скоростей прямых и обратных реакций.

Константы скоростей. Теоретические исследования [18] приводят к следующему виду констант скоростей. Для прямых реакций зависимость K от температуры слабая (корневая):

$$K_a(T) = C \sqrt{(\pi E/4) + T}. \quad (38)$$

Для обратных реакций добавляется множитель Аррениуса, вклад которого является определяющим:

$$K_b(T) = K_a(T) \exp(-E/T) \approx C \sqrt{(\pi E/4) + T} \exp(-E/T). \quad (39)$$

Таблица 1: Таблица реакций горения водорода в кислороде.

Реакция	E , эВ	$\lg C$	Реакция	E , эВ	$\lg C$
$OH + H \rightleftharpoons H_2 + O$	0.087	12.61	$OH + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	3.074	13.07
$O + OH \rightleftharpoons O_2 + H$	0.725	13.86	$OH + H_2O_2 \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	1.272	12.40
$O + HO_2 \rightleftharpoons OH + O_2$	2.401	13.29	$2HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	1.802	11.83
$O + H_2O_2 \rightleftharpoons OH + HO_2$	0.599	12.51	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	1.802	15.37
$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	2.488	13.45	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	5.067	15.79
$H + HO_2 \rightleftharpoons 2OH$	1.676	13.59	$2O + M \rightleftharpoons O_2 + M$	5.119	14.46
$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O$	2.349	12.73	$O + H + M \rightleftharpoons OH + M$	4.394	15.31
$OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	0.586	12.97	$O_2 + O + M \rightleftharpoons O_3 + M$	1.055	14.87
$H + H_2O_2 \rightleftharpoons H_2 + HO_2$	0.686	12.31	$OH + O_3 \rightleftharpoons O_2 + HO_2$	1.663	11.32
$H + H_2O_2 \rightleftharpoons H_2O + OH$	2.948	11.76	$O_3 + O \rightleftharpoons 2O_2$	4.064	12.39
$2H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	4.481	14.82	$O_3 + H \rightleftharpoons OH + O_2$	3.339	12.56
$2OH \rightleftharpoons H_2O + O$	0.673	12.77	$O_3 + HO_2 \rightleftharpoons 2O_2 + OH$	1.346	9.69
			$O + H_2O \rightleftharpoons H_2 + O_2$	0.139	-0.30

Формулы (38), (39) справедливы при температурах до 3–5 тыс. К, пока молекулы не ионизованы. Формулы содержат только один подгоночный коэффициент C , определяемый из экспериментов. Именно эти формулы для констант скоростей $K(T)$ использованы в данной работе.

Решение. Результаты расчётов при умеренной температуре $T = 2000$ К представлены на рисунке 1.

На рисунке 1 изображены концентрации различных видов частиц в зависимости от времени на самой подробной сетке. Видно, что наиболее значимыми компонентами являются O_2 , H_2 , O , H и H_2O , а также OH . Концентрации остальных компонент не превышают 3% от полной концентрации смеси. При данной температуре основным продуктом горения является вода. Её концентрация монотонно нарастает, а концентрации молекулярных кислорода и водорода монотонно убывают. Концентрации остальных частиц, равные нулю в начальный момент времени, сначала увеличиваются, а потом начинают быстро стремиться к нулю.

Результаты расчётов при высокой температуре $T = 6000$ К представлены на рисунке 2. Видно, что при такой температуре концентрации выходят на стационар гораздо быстрее, то есть скорость протекания процесса больше. Отличительной чертой высокой температуры является преобладание процессов диссоциации, в связи с чем нарабатывается не вода, а атомарные водород и кислород. Их концентрации монотонно возрастают. Также значительны концентрации O_2 , H_2 , OH и H_2O . Остальные частицы практически полностью диссоциируют при такой температуре.

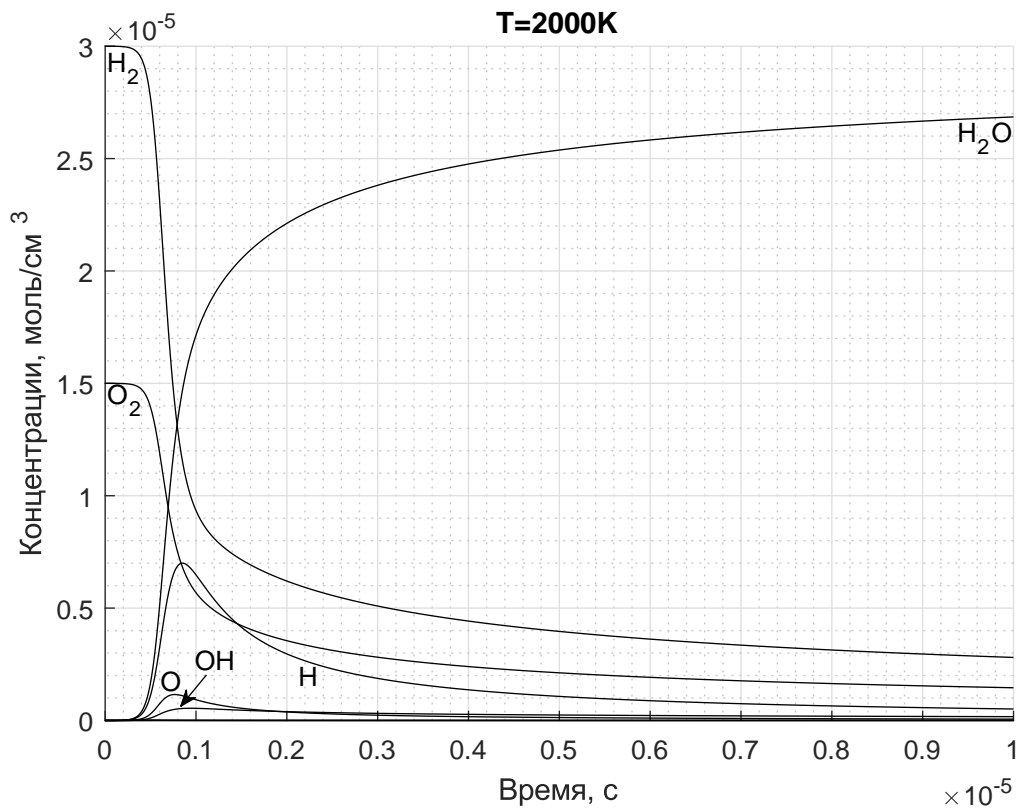


Рис. 1: Горение водорода в кислороде, $T = 2000$ К. Концентрации важнейших компонент.

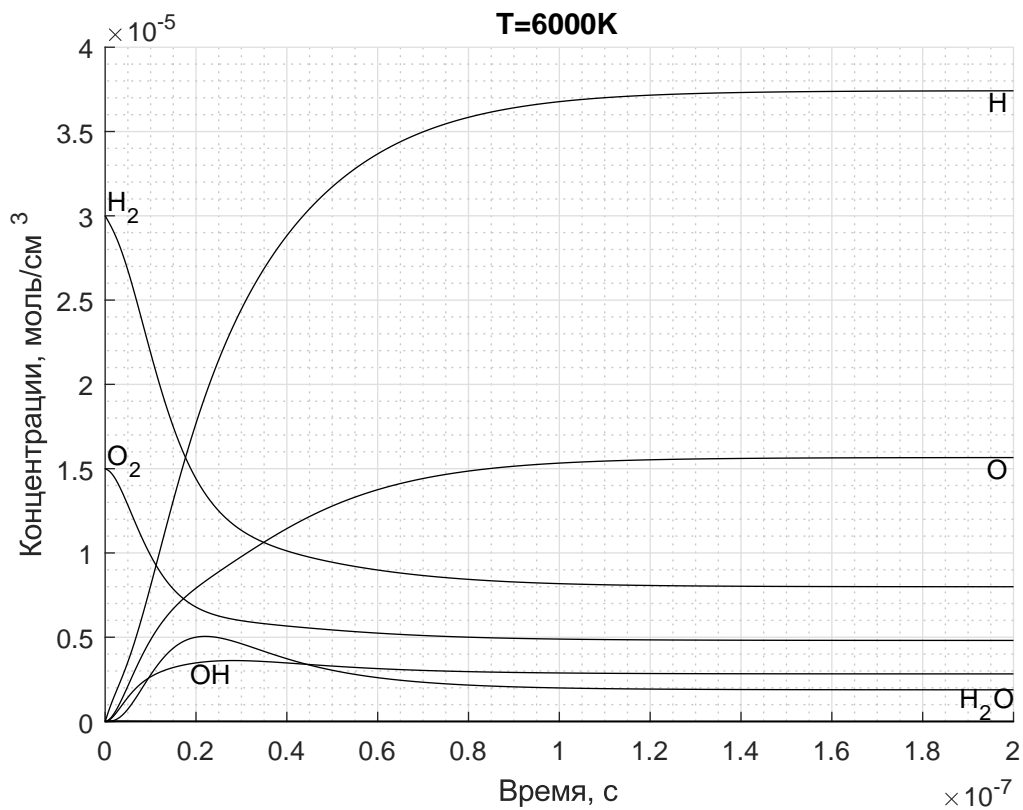


Рис. 2: Горение водорода в кислороде, $T = 2000$ К. Концентрации важнейших компонент.

4.2 Результаты расчётов

Геометрически-адаптивные сетки. Приведём графики зависимости погрешности по Ричардсону на втором этапе от числа шагов для задачи химической кинетики (рис. 3 и 4). Масштаб графиков двойной логарифмический. При температуре 2000 К использовалась схема ERK4, а при 6000 К – ERK3 (схема ERK4 при этой температуре давала слишком быстрый выход на ошибки округления).

Видно, что в двойном логарифмическом масштабе ошибка убывает линейно с наклоном, равным теоретическому порядку точности (4 для ERK4 и 3 для ERK3). Это означает, что имеет место сходимость численного решения к точному при стремлении шага к нулю. Когда ричардсоновская ошибка сравнивается с ошибками машинного округления, она перестаёт уменьшаться. В проведённых расчётах характерная величина ошибок округления составляет $\sim 10^{-15}$. Дальнейшее сгущение сеток не имеет смысла. Перед этапом регулярной сходимости (линейного убывания) может быть нерегулярный этап, на котором шаг слишком велик, чтобы метод Ричардсона надёжно работал.

Программа Гира. Приведём результаты вычислений при температуре $T = 6000$ К. Погрешности расчётов в аргументе t приведены на рис. 5. По оси абсцисс отложена величина, обратная RelTol . Круглыми маркерами изображено отклонение решения по стандартному пакету от решения на геометрически-адаптивных сетках, квадратными – число узлов, полученное в сетке стандартного пакета, ромбиками – уровень ошибок интерполяции. Прямая линия соответствует заданной относительной точности.

Видно, что погрешность интерполяции на много порядков меньше, чем различия решений. Аналогичный результат получен во всех последующих расчётах. Таким образом, результатам интерполяции можно доверять, а искажением, которое она вносит в различие решений, полученных разными методами, – пренебречь.

Видно, что при уменьшении RelTol погрешность программы Гира и выдаваемое ею число шагов быстро выходят на некоторое предельное значение и далее перестают меняться.

Видно, что фактическая погрешность не лучше 10^{-2} и совершенно не соответствует заданным значениям RelTol . Число узлов составляет лишь около 50, то есть трудоёмкость очень низкая. В данном примере удаётся получить точность, достаточную для практики. Однако проводить расчёты по методам, не позволяющим дать хотя бы ориентировочное представление о точности, опасно.

Рассмотрим расчёт в аргументе «длина дуги» (рис. 6). Качественное поведение аналогично рис. 5, но количественные результаты заметно лучше. Видно, что отклонение уменьшается при уменьшении RelTol , пока не до-

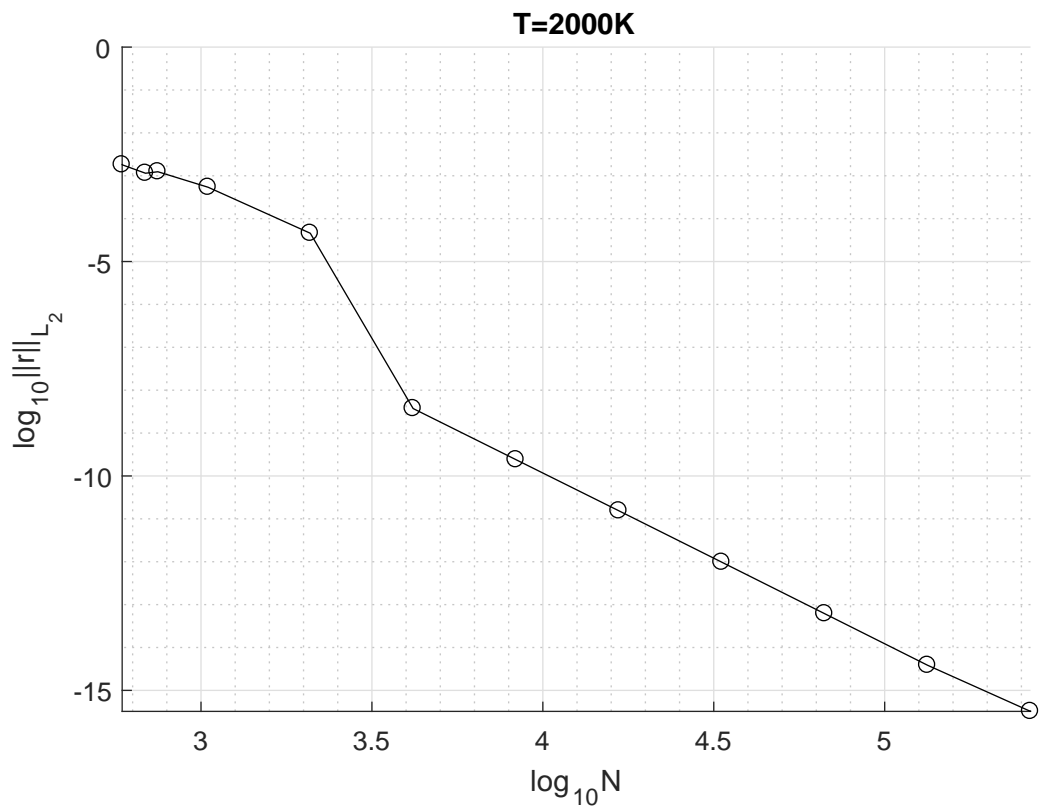


Рис. 3: Горение водорода в кислороде, $T = 2000$ К. Погрешность расчёта на геометрически-адаптивных сетках.

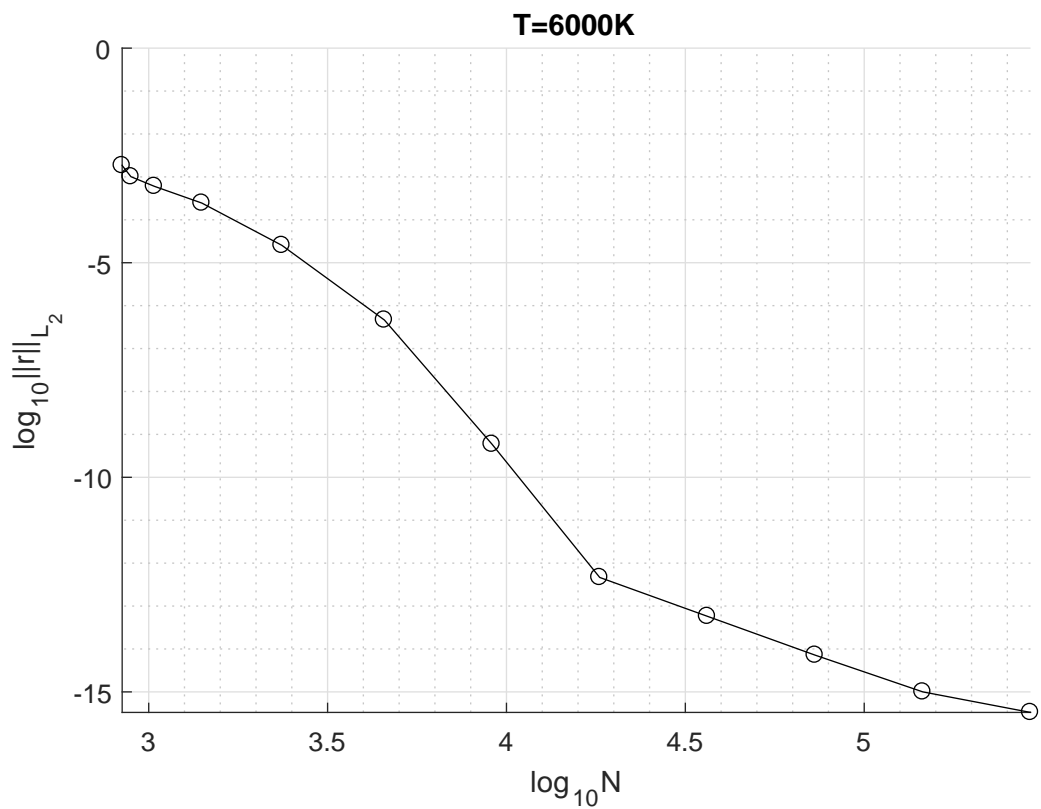


Рис. 4: Горение водорода в кислороде, $T = 6000$ К. Погрешность расчёта на геометрически-адаптивных сетках.

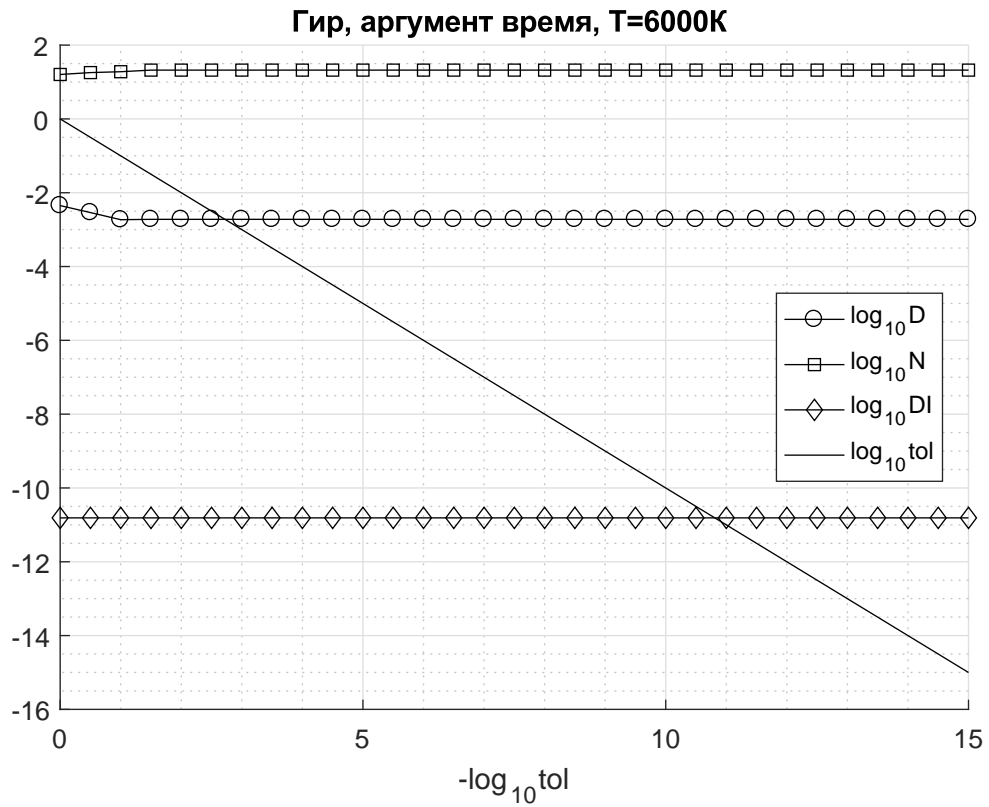


Рис. 5: Горение водорода в кислороде, $T = 6000$ К. Погрешность расчетов по программе Гира в аргументе «время».

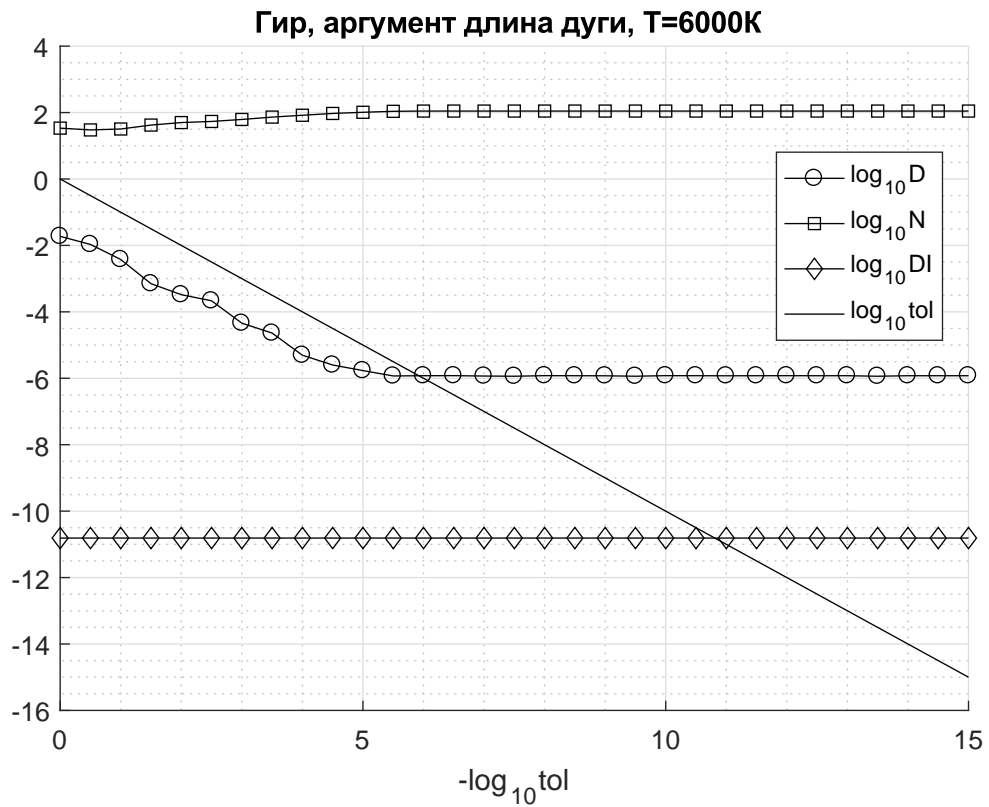


Рис. 6: Горение водорода в кислороде, $T = 6000$ К. Погрешность расчетов по программе Гира в аргументе «длина дуги».

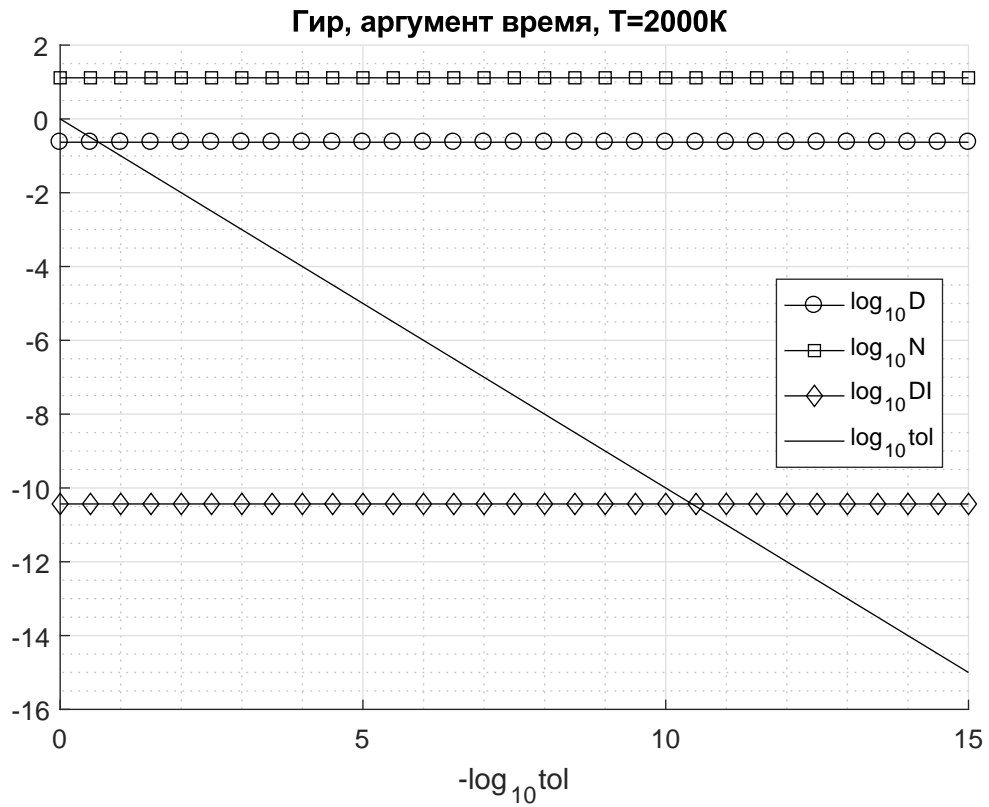


Рис. 7: Горение водорода в кислороде, $T = 2000$ К. Погрешность расчетов по программе Гира в аргументе «время».

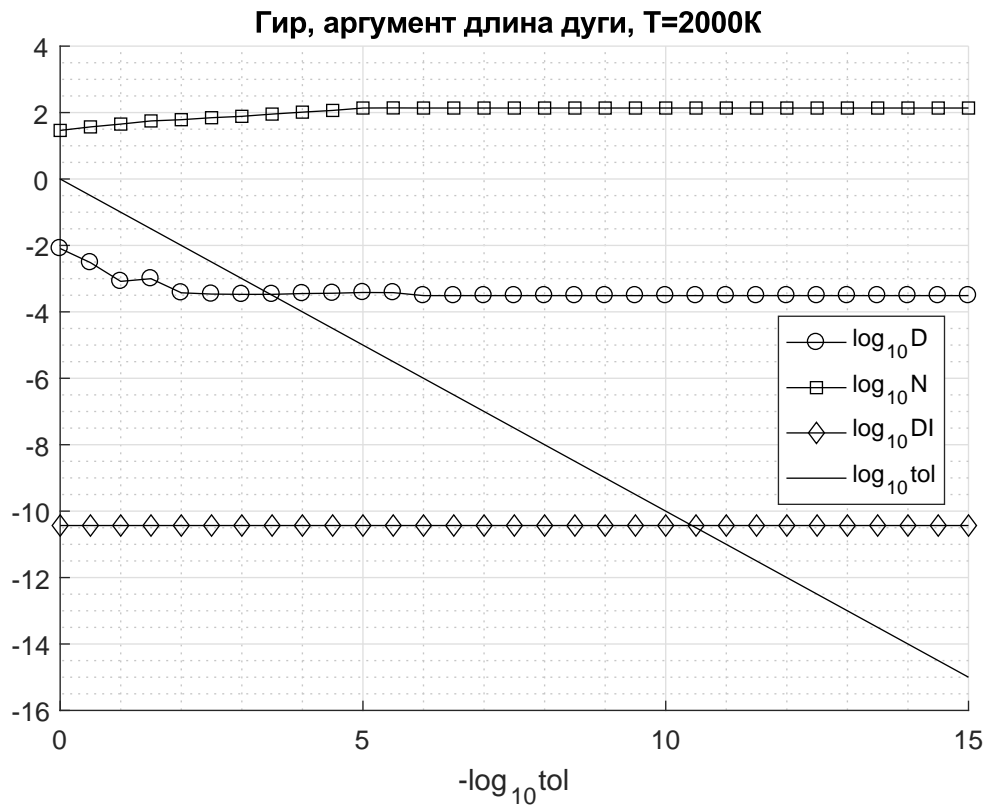


Рис. 8: Горение водорода в кислороде, $T = 2000$ К. Погрешность расчетов по программе Гира в аргументе «длина дуги».

стигнет значения 10^{-6} . При дальнейшем уменьшении `RelTol` отклонение и число узлов практически не меняются. Фактическая точность стандартных пакетов не превышает 10^{-6} , но для практических расчётов этого более чем достаточно. Число узлов, при котором достигается сходимость, составляет около 110. Это в два раза больше, чем в предыдущем случае, но всё равно немного.

Рассмотрим аналогичные результаты для расчётов по программе Гира при температуре $T = 2000$ К. На рис. 7 приведены результаты расчётов в аргументе «время», а на рис. 8 – в аргументе «длина дуги».

Здесь все результаты качественно похожи на приведённые выше, но количественно они хуже, так как задача становится более жёсткой. Погрешность в аргументе «время» составляет более 0.1, что может быть неудовлетворительно для практических расчётов. Точность в аргументе «длина дуги» оказывается не лучше чем $3 \cdot 10^{-4}$, но для практических расчётов этого, как правило, достаточно.

Программа Дормана-Принса. Рассмотрим теперь результаты расчётов по программе Дормана-Принса в аргументе «длина дуги». На рис. 9 приведены результаты расчётов при температуре $T = 6000$ К, а на рис. 10 – при температуре $T = 2000$ К. В аргументе «время» эта программа не сработала.

Программа Дормана-Принса в целом даёт результаты, аналогичные результатам по программе Гира. Она делает подробную сетку около 3000 узлов, что существенно больше, чем в программе Гира. Однако сравнивать трудоёмкости этих программ только по числу шагов затруднительно, так как один шаг программы Гира намного дороже, чем один шаг программы Дормана-Принса. Видно, что при 6000 К и 2000 К результаты почти одинаковы. Более того, в обоих случаях фактическая точность Дормана-Принса достаточно быстро достигает 10^{-6} , чего не получилось в случае программы Гира при температуре 2000 К.

Итак, программа Дормана-Принса при использовании параметризации через длину дуги подходит для прикладных расчётов, требующих высокой точности. Программа Гира оказывается более надёжной, хотя и менее точной. Однако подчеркнём, что сделать вывод о фактической количественной точности мы смогли только после сравнения численного решения с решением, полученным другим методом с заведомо достаточной точностью.

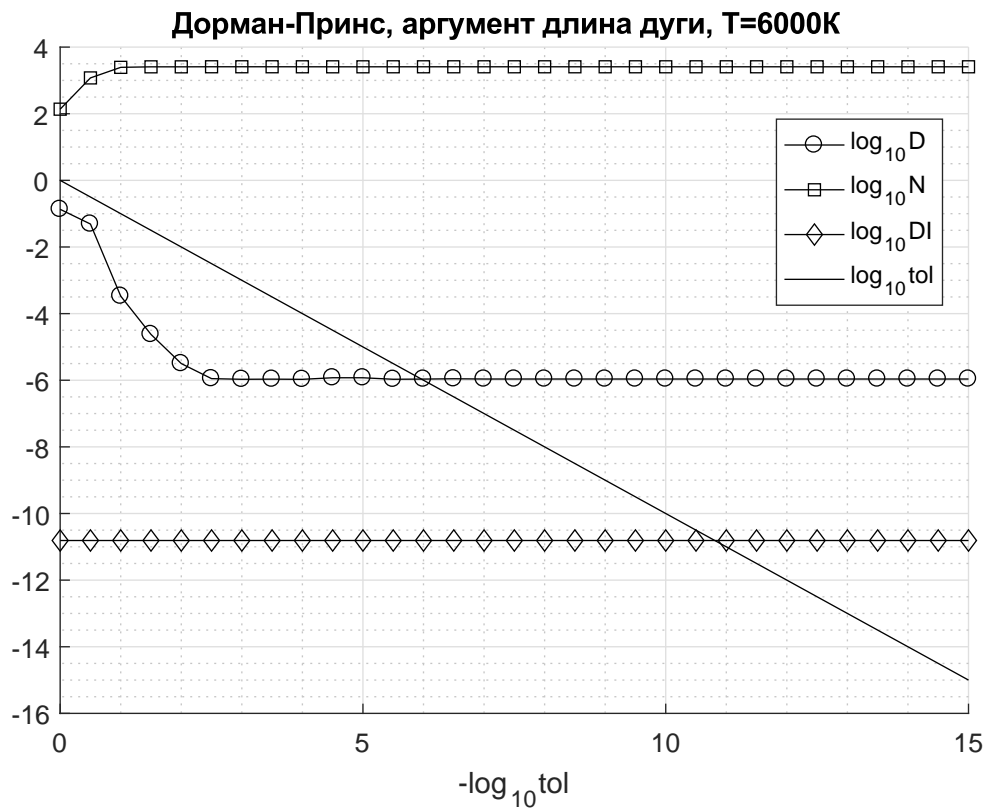


Рис. 9: Горение водорода в кислороде, $T = 6000$ К. Погрешность расчетов по программе Дормана-Принса в аргументе «длина дуги».

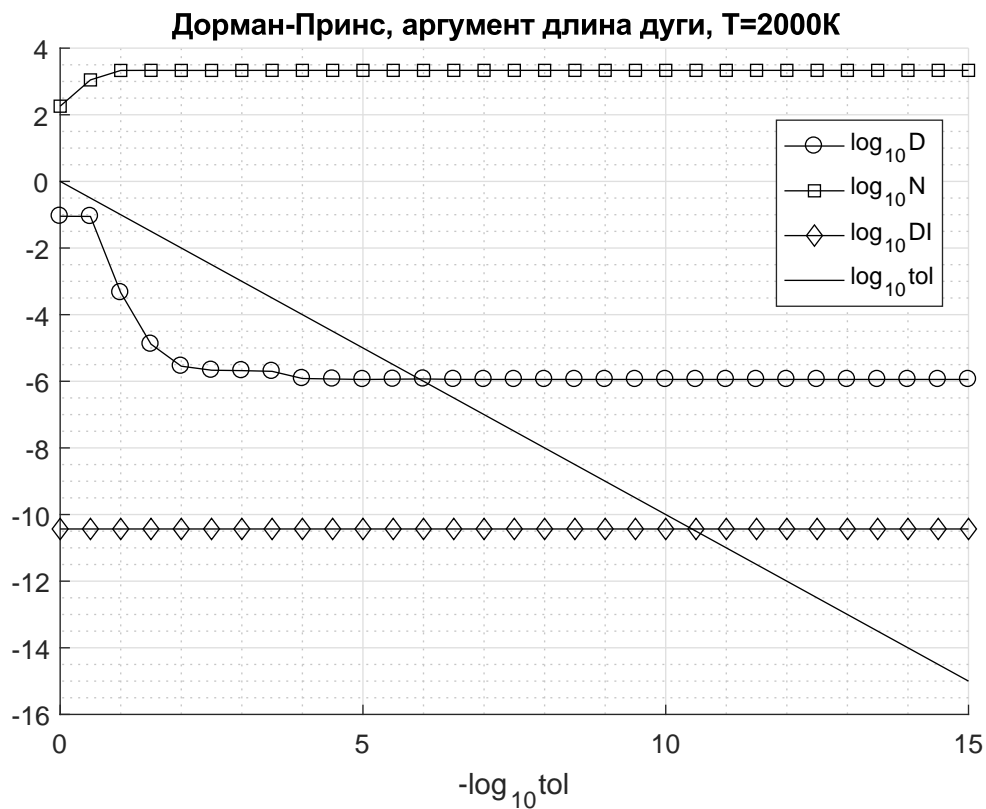


Рис. 10: Горение водорода в кислороде, $T = 2000$ К. Погрешность расчетов по программе Дормана-Принса в аргументе «длина дуги».

5 Задача Аренсторфа

5.1 Постановка задачи

Постановка задачи. Задача Аренсторфа – это ограниченная задача трёх тел, возникающая в небесной механике. Рассматриваются два тела массой μ и $1 - \mu$, участвующие в совместном круговом движении в некоторой плоскости, и движущееся вблизи них в той же плоскости третье тело пренебрежимо малой массы. Приведём постановку этой задачи [4]:

$$\begin{aligned}u_1'' &= u_1 + 2u_2' - \mu' \frac{u_1 + \mu}{D_1} - \mu \frac{u_1 - \mu}{D_2}; \\u_2'' &= u_2 - 2u_1' - \mu' \frac{u_2}{D_1} - \mu \frac{u_2}{D_2}; \\D_1 &= \left((u_1 + \mu)^2 + u_2^2 \right)^{\frac{3}{2}}; \\D_2 &= \left((u_1 - \mu')^2 + u_2^2 \right)^{\frac{3}{2}}; \\ \mu &= 0.012277471; \\ \mu' &= 1 - \mu; \\u_1(0) &= 0.994; \quad u_1'(0) = 0; \quad u_2(0) = 0; \\u_2'(0) &= -2.001585106379083; \\t_{end} &= 17.06521656015796.\end{aligned}\tag{40}$$

В постановке (40) все величины обезразмеренные. Начальные условия подбираются так, чтобы траектории были замкнутыми с периодом t_{end} .

Задача Аренсторфа имеет малую жёсткость, но очень плохую обусловленность, как и другие траекторные задачи небесной механики. Известно, например, что если изменить начальную скорость на 1 мм/с, то после прохождения полного периода скорость изменится на 1 км/с.

Сначала рассмотрим решение, соответствующее одному полному обороту. Траектория Аренсторфа в этом случае приведена на рисунке 11.

5.2 Один оборот

Геометрически-адаптивные сетки. Как отмечалось ранее, задача Аренсторфа является плохо обусловленной. Значительное накопление ошибок машинного округления имеет место даже при использовании геометрически-адаптивных сеток. Расчёт на геометрически-адаптивных сетках проводился по схеме ERK4. Наилучшая точность, которую удалось обеспечить, составила 10^{-11} . Погрешность расчёта в двойном логарифмическом масштабе приведена на рис. 12.

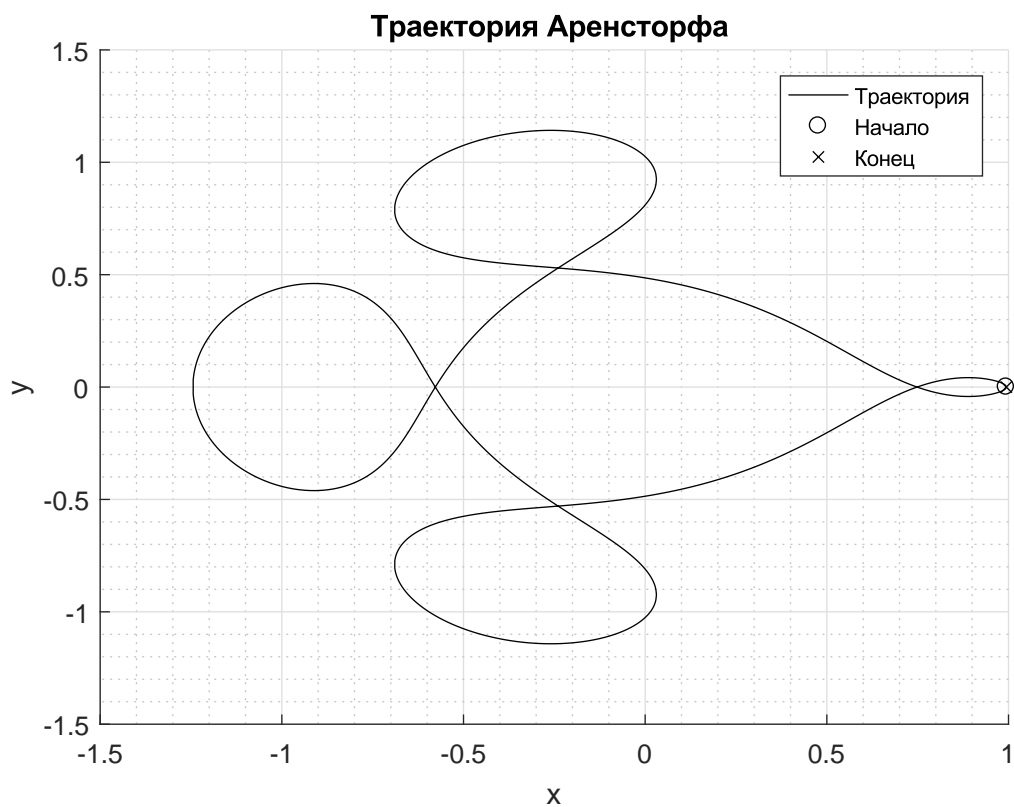


Рис. 11: Задача Аренсторфа, один оборот. Траектория (движение идет против часовой стрелки).

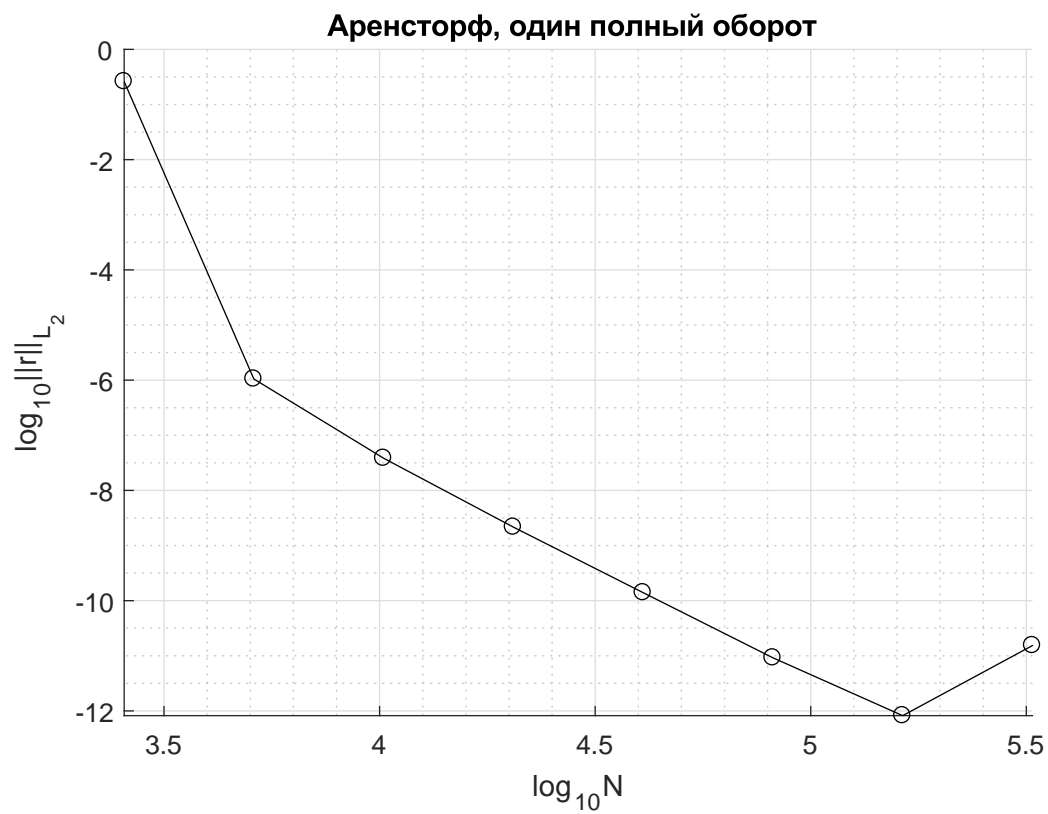


Рис. 12: Задача Аренсторфа, один оборот. Погрешность расчета на геометрически-адаптивных сетках.

Программа Гира. На рис. 13 приведён график погрешности для аргумента «время», а на рис. 14 – для аргумента «длина дуги». Обозначения соответствуют рис. 5 – 10.

В аргументе «время» погрешность не является монотонно убывающей: имеют место участки её увеличения («всплески»). Причина заключается в следующем. Задача плохо обусловлена, поэтому от шага к шагу довольно быстро накапливается ошибка. При уменьшении $RelTol$ перестраивается вся сетка (предыдущие узлы не используются в новом расчёте). Поэтому накопление мгновенной ошибки идёт иначе. Поэтому нельзя гарантировать, что от сетки к сетке норма ошибки будет убывать монотонно. В аргументе «длина дуги» обусловленность улучшается, поэтому данный эффект не сказывается.

Из сравнения графиков видно, что применение аргумента «длина дуги» в мягких, но плохо обусловленных задачах повышает надёжность, но не даёт улучшения точности. Более того, точность в аргументе «длина дуги» для достаточно малых $RelTol$ даже немного хуже, чем в аргументе «время». По-видимому, причина в том, что программы Гира и Дормана-Принса содержат большое количество «кухонных» настроечных параметров. Их обычно подбирают эвристически по расчётам тестовых задач, причём в аргументе «время» (аргумент «длина дуги», к сожалению, малоизвестен). Такой выбор параметров нельзя считать универсальным. Поведение решения в аргументах t и l различно. Поэтому даже если значения параметров удачны для аргумента t , то они могут вовсе не быть таковыми в аргументе l . Это также показывает (хотя и косвенно) невысокую надёжность программ Гира и Дормана-Принса.

Как видно из графиков, фактическая точность не превышает 10^{-2} . При этом ни для какого значения $RelTol$ фактическая ошибка не соответствует заявленной. Для практических расчётов такой точности может быть достаточно.

Программа Дормана-Принса. Аналогичные расчёты проведены и для программы Дормана-Принса. На рис. 15 приведён график для аргумента «время», а на рис. 16 – для аргумента «длина дуги».

Программа Дормана-Принса на задаче Аренсторфа даёт точность до 10^{-4} , что существенно лучше, чем для программы Гира при том же числе шагов. Тем не менее, фактическая погрешность всё равно далека от заявленной.

Также следует отметить, что в аргументе «длина дуги» точность на целый порядок хуже, чем в аргументе «время», в то время как у программы Гира это различие было незначительным. Интерпретация этого факта дана выше. Схема Дормана-Принса явная, поэтому она оказывается менее надёжной, чем программа Гира.

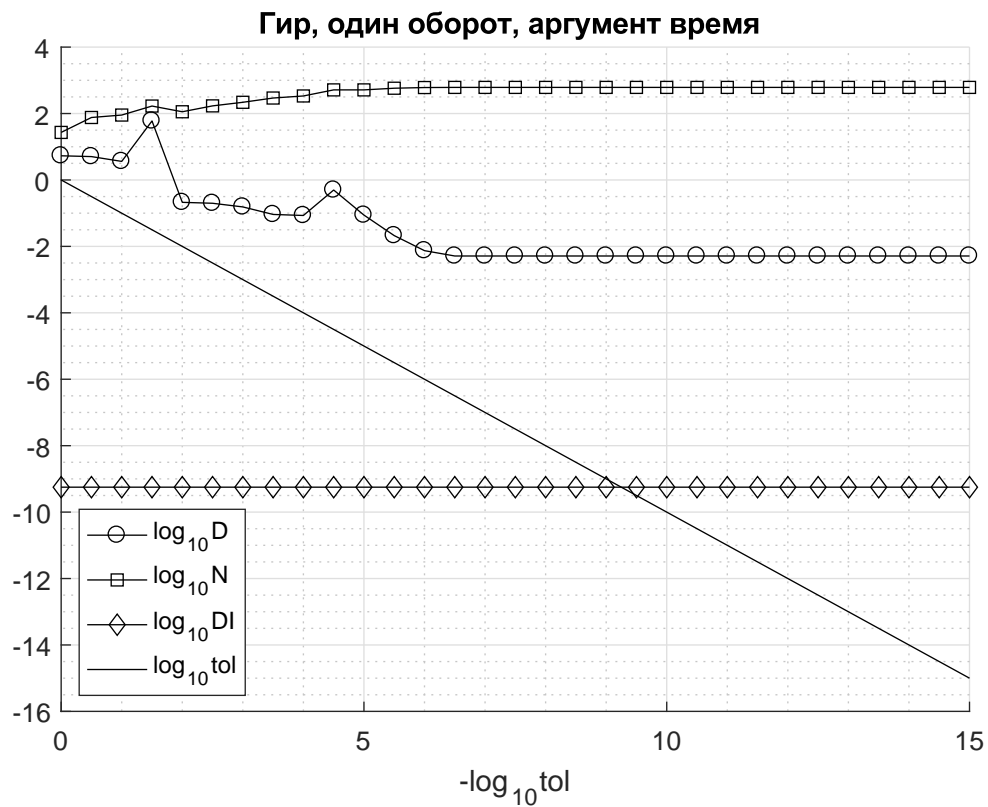


Рис. 13: Задача Аренсторфа, один оборот. Погрешность расчета по программе Гира в аргументе «время».

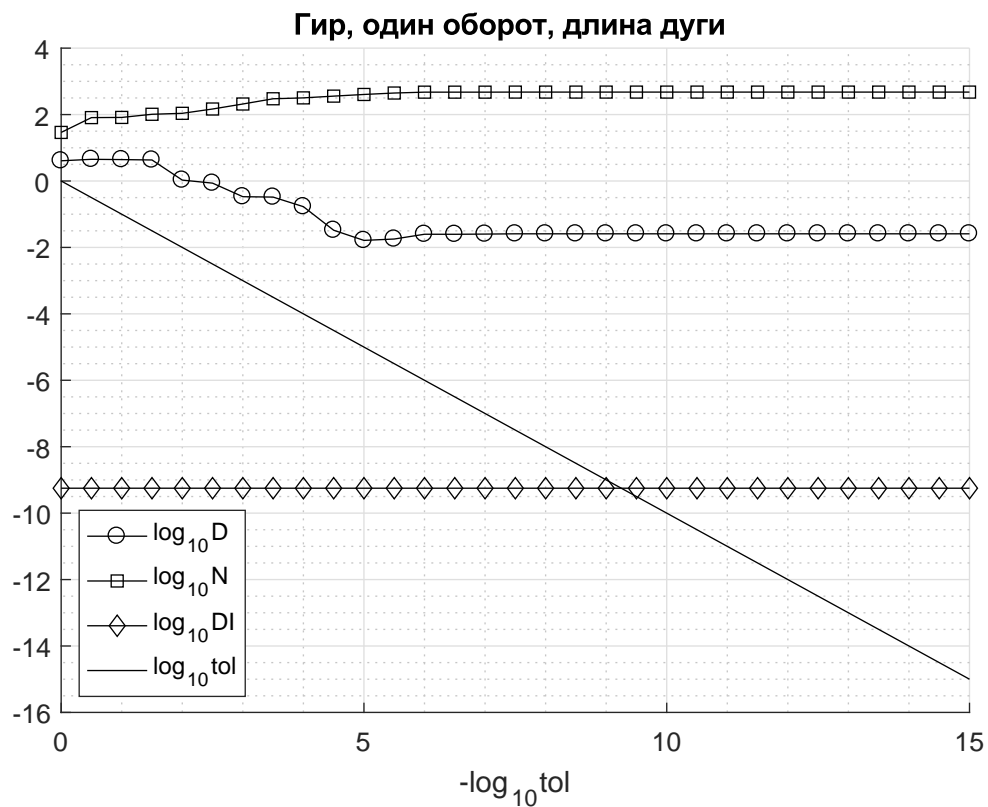


Рис. 14: Задача Аренсторфа, один оборот. Погрешность расчета по программе Гира в аргументе «длина дуги».

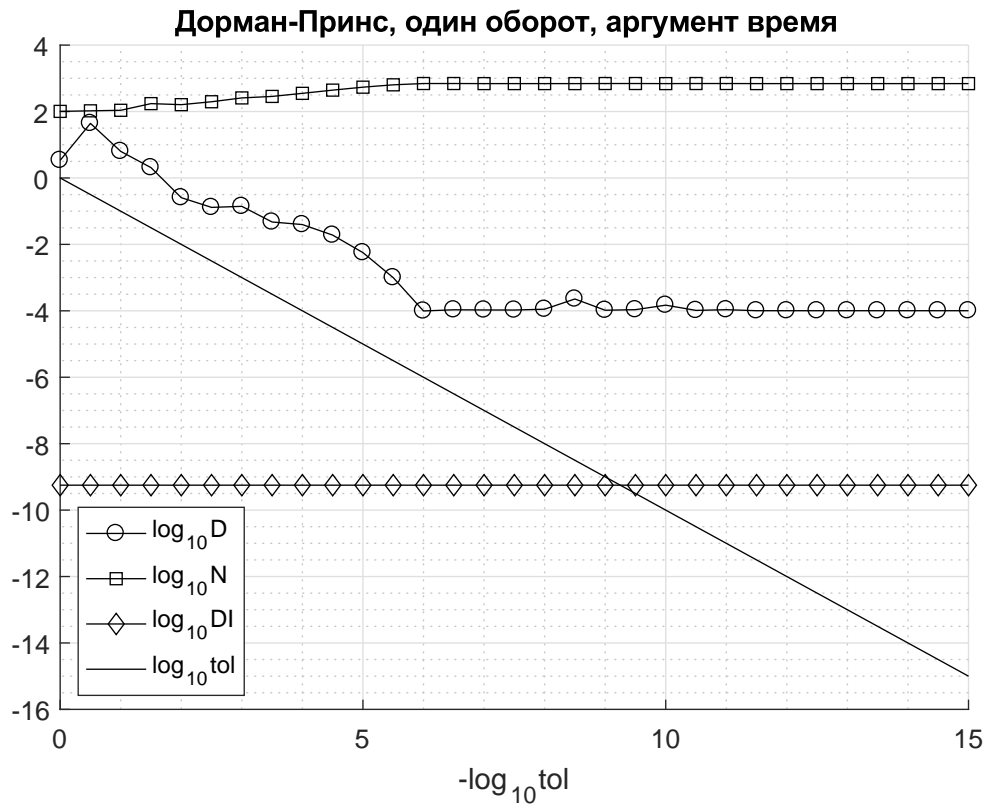


Рис. 15: Задача Аренсторфа, один оборот. Погрешность расчета по программе Дормана-Принса в аргументе «время».

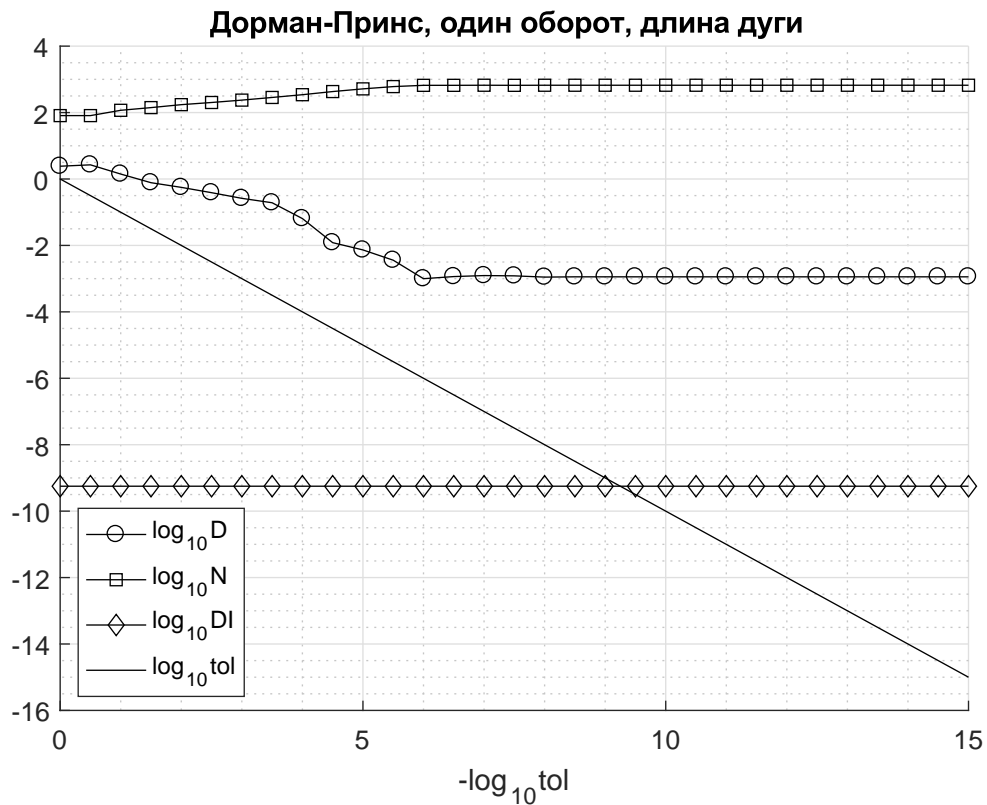


Рис. 16: Задача Аренсторфа, один оборот. Погрешность расчета по программе Дормана-Принса в аргументе «длина дуги».

5.3 Три оборота

Геометрически-адаптивные сетки. Рассмотрим результаты расчётов задачи Аренсторфа с тремя полными оборотами. Второй и третий обороты повторяют первый. Поэтому вид решения такой же, как на рис. 11. При расчёте на геометрически-адаптивных сетках использовалась схема ERK4. На рис. 17 изображён график погрешности в двойном логарифмическом масштабе.

В этих расчётах ошибки округления настолько велики, что достичь регулярной сходимости не удаётся. Фактическая точность составила 10^{-7} , что существенно хуже, чем в рассмотренных выше ситуациях. Чтобы надёжно получать выход на регулярное убывание погрешности, нужно использовать схемы более низкого порядка точности.

На рис. 18 приведён график удаления от начальной точки. По этому графику можно судить о замкнутости траектории. На данном рисунке чётко прослеживаются три периода, соответствующие трём полным оборотам. Видно также, что на всех оборотах траектория получается замкнутой и результаты расчётов являются физическими.

Программа Ги́ра. На рис. 19 приведён график решения для аргумента «время», а на рис. 20 – для аргумента «длина дуги интегральной кривой». RelTol равно $2 \cdot 10^{-14}$ – это наименьшая возможная величина.

В обоих случаях очевидно, что траектория незамкнута. Уже при трёх полных оборотах результаты расчётов становятся нефизическими. Любопытно, что в аргументе «длина дуги» расхождение начальной и конечной точек оборота сильнее.

На рис. 21 приведён график погрешности в аргументе «время», а на рис. 22 – аналогичный график в аргументе «длина дуги».

Видно, что отклонение решения по программе Ги́ра от решения на геометрически-адаптивных сетках составляет не менее 0.1 в аргументе «время» и не менее 2 – в аргументе «длина дуги». Погрешность на геометрически-адаптивных сетках составляет $10^{-7} \div 10^{-6}$. Погрешность интерполяции на геометрически-адаптивных сетках составляет 10^{-9} . Это хуже, чем в случае с одним оборотом, но всё равно пренебрежимо мало.

Программа Дормана-Принса. На рис. 23 приведён график решения для аргумента «время», а на рис. 24 – для аргумента «длина дуги». RelTol также равно $2 \cdot 10^{-14}$.

Здесь траектории также незамкнуты, хотя данная программа разрабатывалась для решения задач небесной механики. На рис. 25 приведён график погрешности в аргументе «время», а на рис. 26 – в аргументе «длина дуги». Величины погрешностей оказываются не менее 0.1.

Работа поддержана грантом РФФИ №18-01-00175.

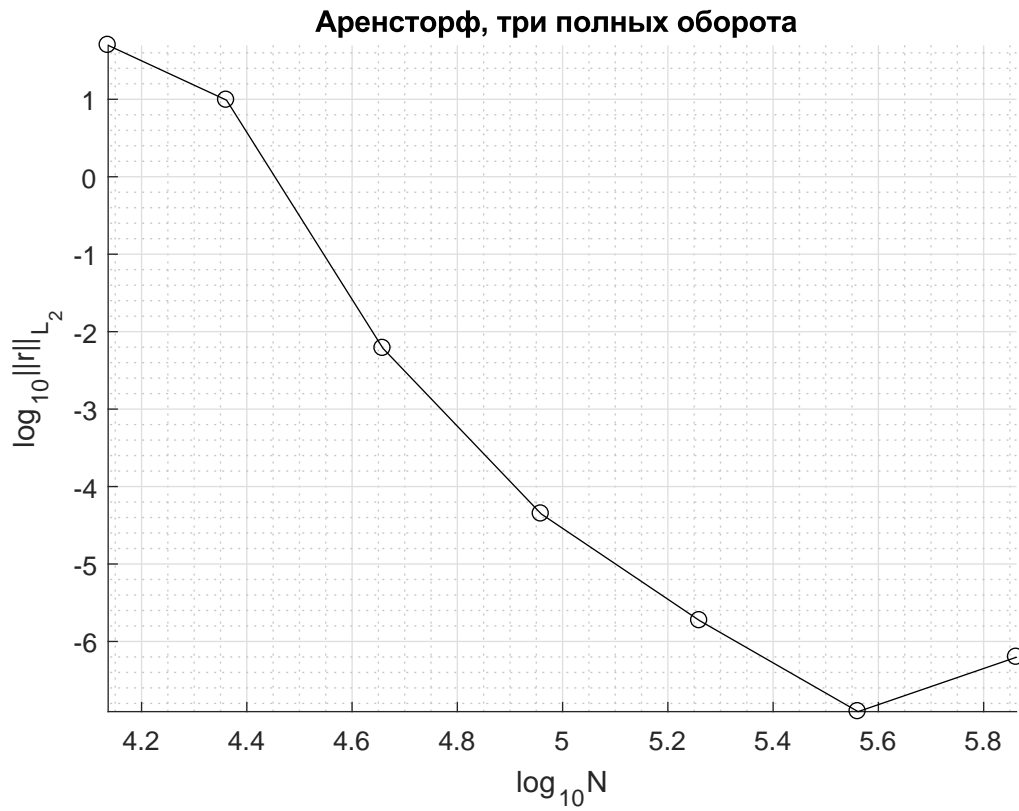


Рис. 17: Задача Аренсторфа, три оборота. Погрешность расчёта на геометрически-адаптивных сетках.

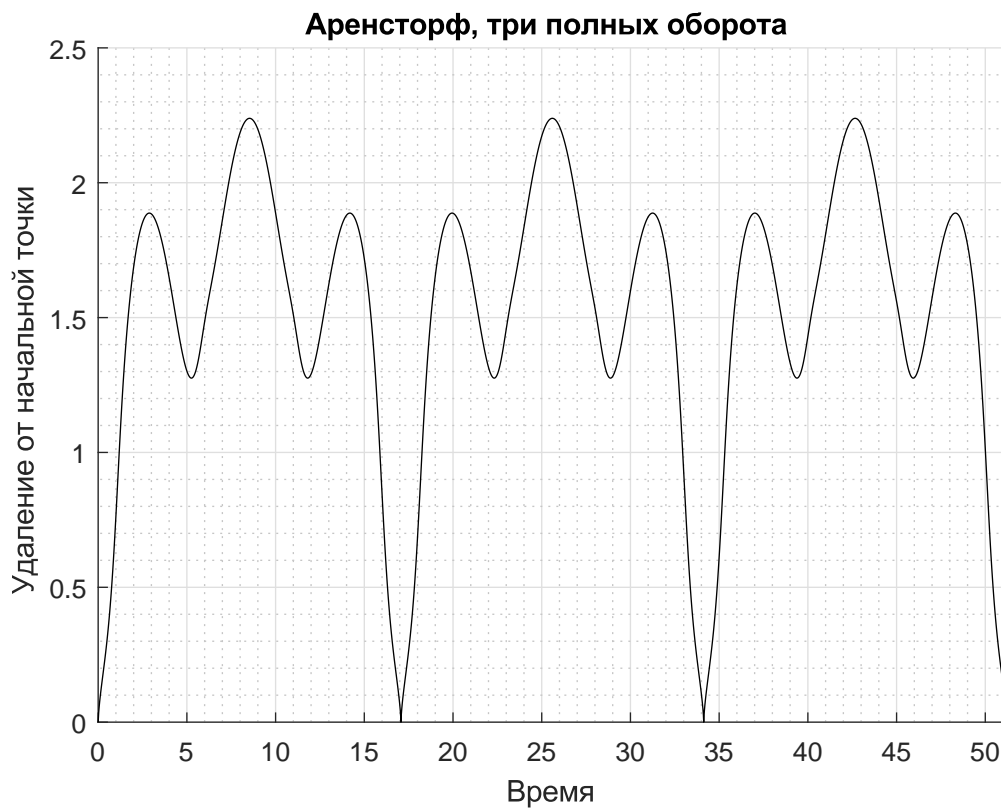


Рис. 18: Задача Аренсторфа, три оборота. Удаление от начальной точки при расчёте на геометрически-адаптивных сетках.

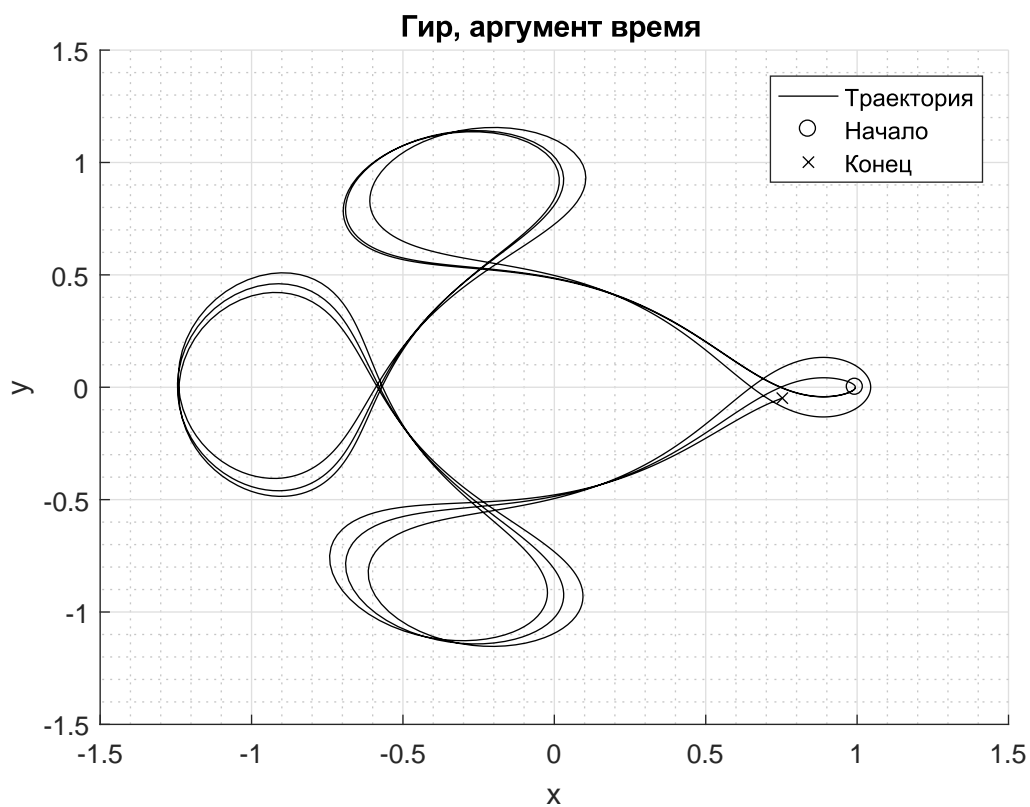


Рис. 19: Задача Арнсторфа, три оборота. Траектория. Расчёт по программе Гира в аргументе «время».

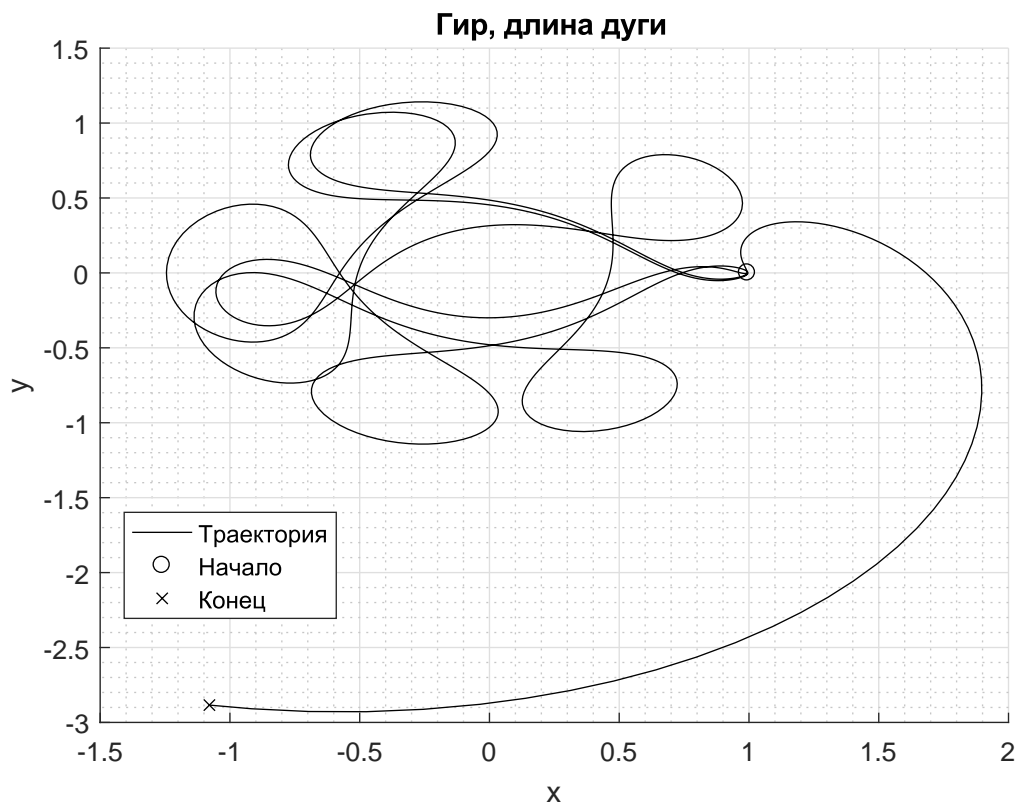


Рис. 20: Задача Арнсторфа, три оборота. Траектория. Расчёт по программе Гира в аргументе «длина дуги».

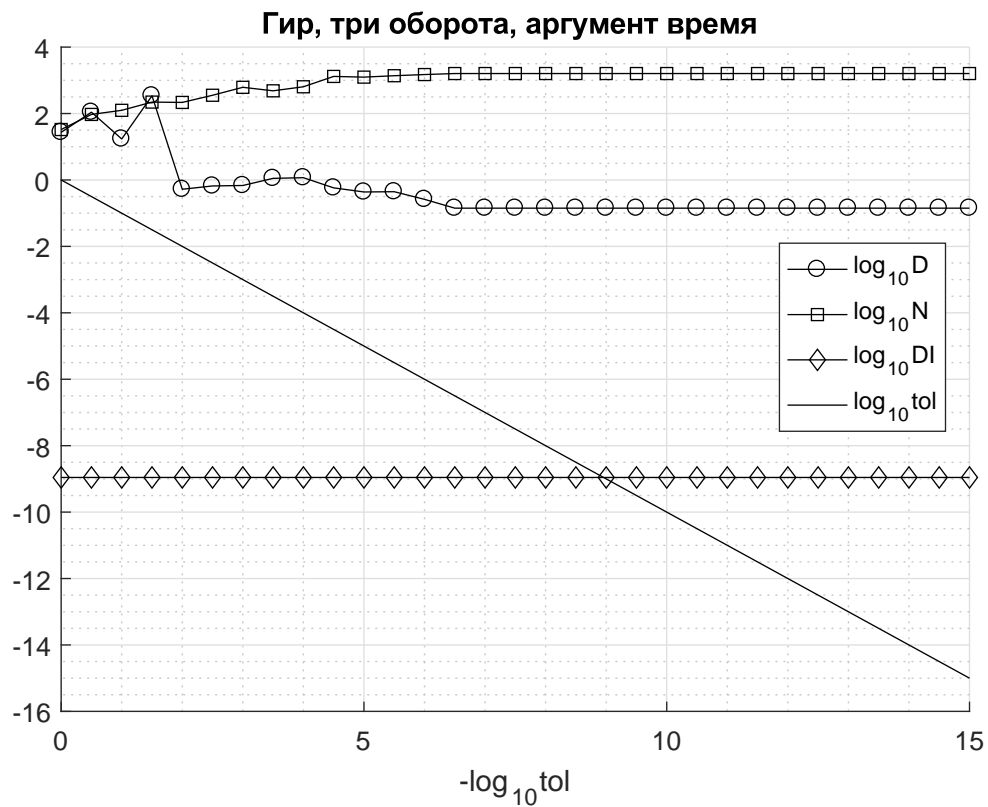


Рис. 21: Задача Арнсторфа, три оборота. Погрешность расчета по программе Гира в аргументе «время».

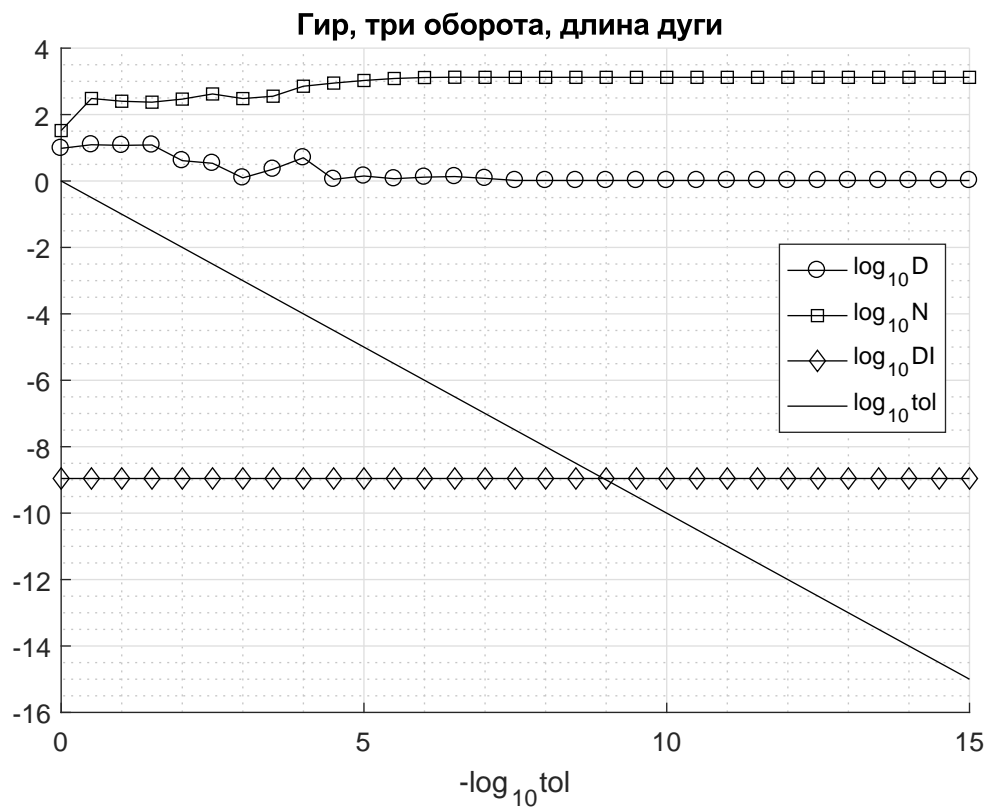


Рис. 22: Задача Арнсторфа, три оборота. Погрешность расчета по программе Гира в аргументе «длина дуги».

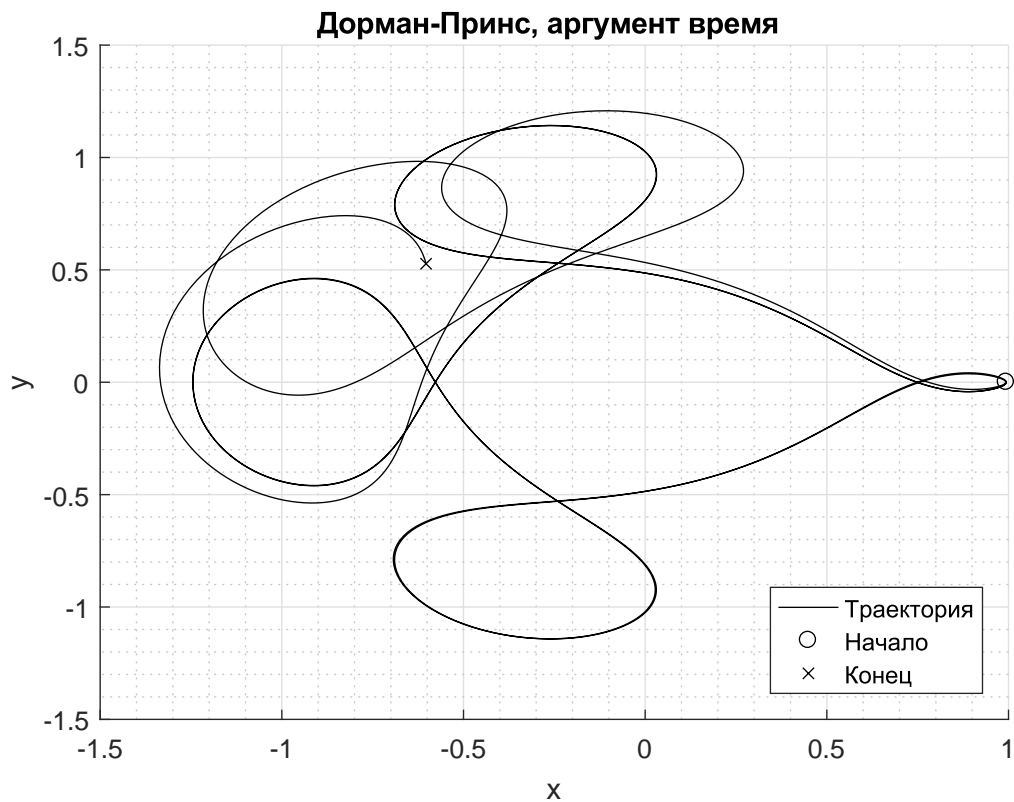


Рис. 23: Задача Аренсторфа, три оборота. Траектория. Расчёт по программе Дормана-Принса в аргументе «время».

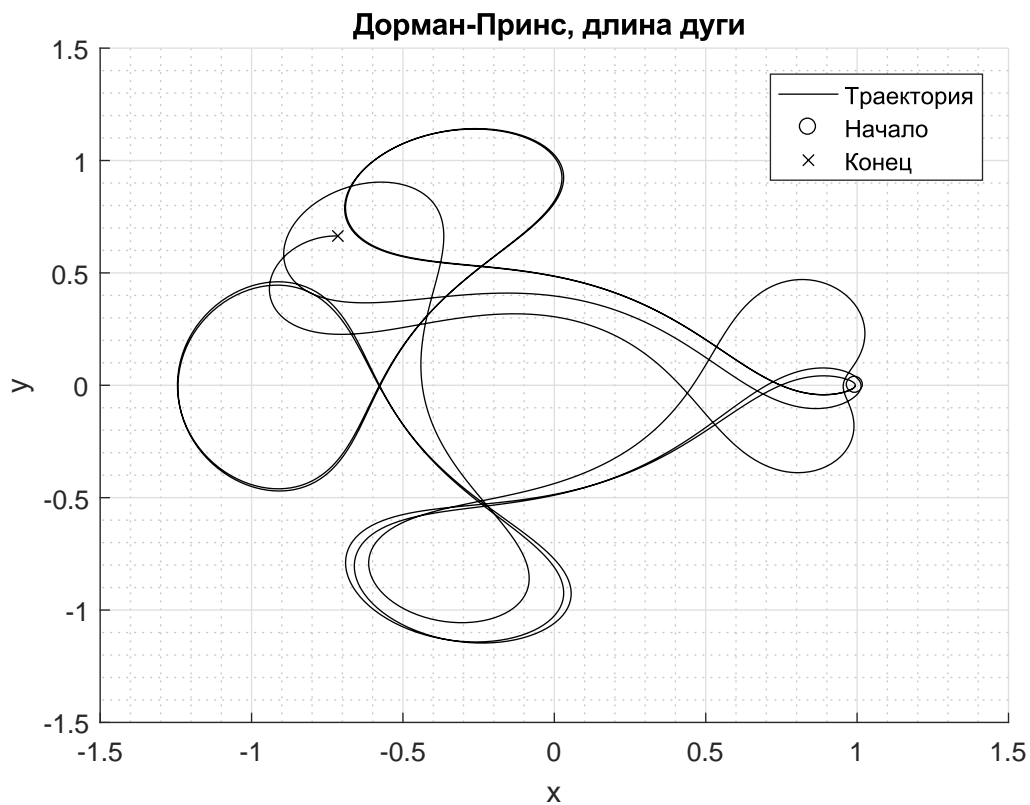


Рис. 24: Задача Аренсторфа, три оборота. Траектория. Расчёт по программе Дормана-Принса в аргументе «длина дуги».

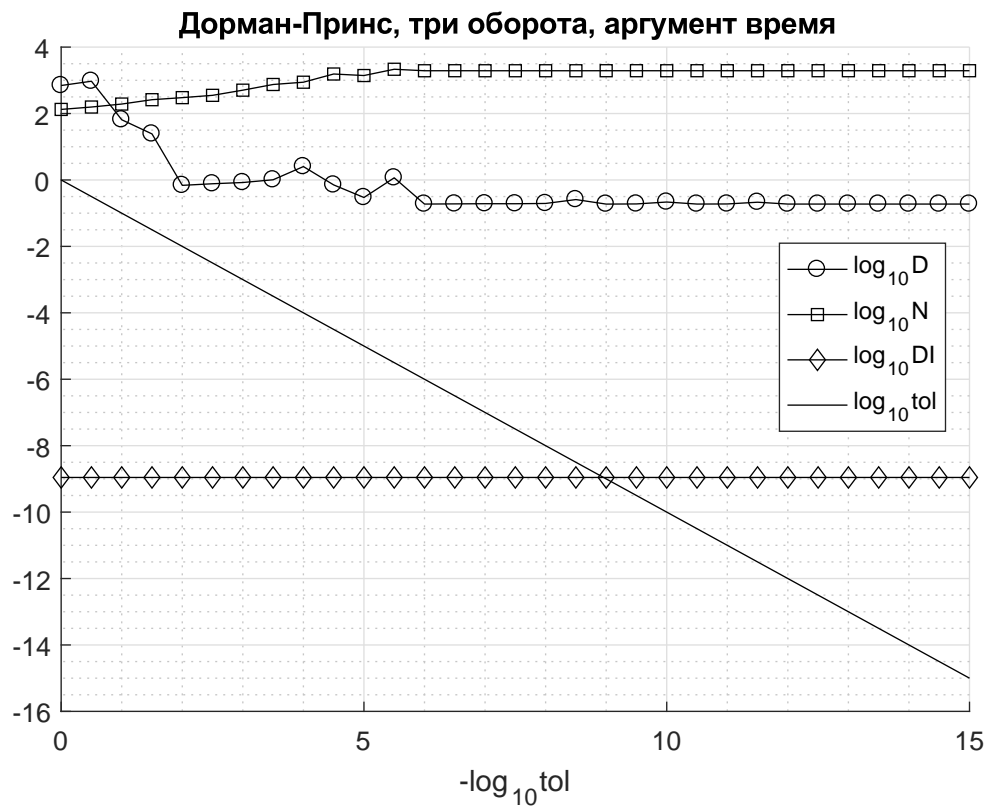


Рис. 25: Задача Аренсторфа, три оборота. Погрешность расчета по программе Дормана-Принса в аргументе «время».

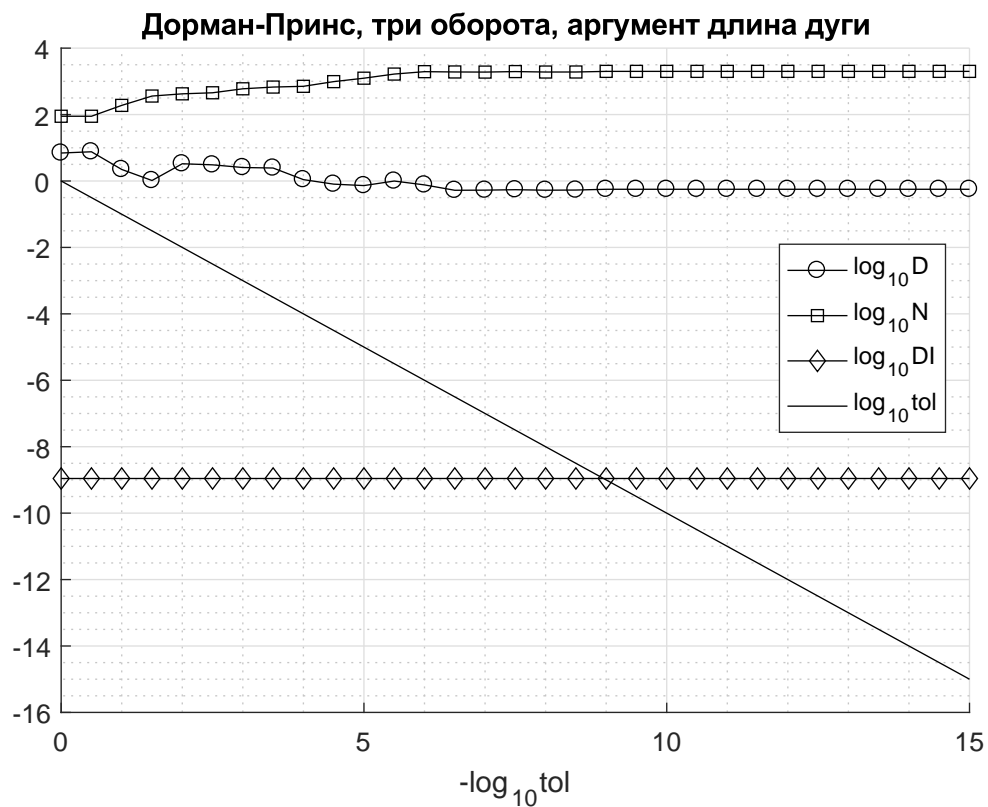


Рис. 26: Задача Аренсторфа, три оборота. Погрешность расчета по программе Дормана-Принса в аргументе «длина дуги».

Список литературы

1. Н. Н. Калиткин, П. В. Корякин. Численные методы. Книга 2: Методы математической физики. – М.: «Академия», 2013.
2. C. W. Gear. Hybrid methods for initial value problems in ordinary differential equations // SIAM J. Numer. Anal. ser. B, 1965, Vol. 2, p. 69–86.
3. C. W. Gear. Numerical initial value problems in ordinary differential equations. Prentice Hall PTR Upper Saddle River, NJ, USA. 1971. p. 253. ISBN: 13-626606-1. Library of Congress Catalog Card Number: 75-152448.
4. Э. Хайпер, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи М.: Мир, 1999.
5. П. Е. Булатов, А. А. Белов, Н. Н. Калиткин. Расчет химической кинетики явными схемами с геометрически-адаптивным выбором шага // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2018. №173. <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-173>
6. А. А. Белов, Н. Н. Калиткин. Выбор шага по кривизне для жестких задач Коши // Математическое моделирование. Т. 28, № 11 (2016), С. 97–112.
7. А. А. Белов, Н. Н. Калиткин, И. П. Пошивайло. Геометрически-адаптивные сетки для жестких задач Коши // Доклады Академии наук. 2016. Т. 466, №3, С. 276–281.
8. А. А. Белов, Н. Н. Калиткин. Численные методы решения задач Коши с контрастными структурами // Моделирование и анализ информационных систем. 2016. Т. 23, № 5. С. 528–537.
9. А. А. Белов, Н. Н. Калиткин. Экономичные методы численного интегрирования задачи Коши для жестких систем ОДУ // Дифференциальные уравнения. 2019. Т. 55, №7. В печати.
10. E. Riks. The Application of Newton's Method to the Problem of Elastic Stability // Journal of Applied Mechanics. 1972. Vol. 39. №4. P. 1060–1065.
11. И. П. Пошивайло. Жесткие и плохо обусловленные нелинейные модели и методы их расчета. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук: 05.13.18. — М.: 2015, 89 с.
12. Н. Н. Калиткин, И. П. Пошивайло. Гарантированная точность при решении задачи Коши методом длины дуги // Доклады Академии наук. 2013. Т.452, №5, С. 499–502.

13. Н. Н. Калиткин, И. П. Пошивайло. Решение задачи Коши для жестких систем с гарантированной точностью методом длины дуги // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, №7. С. 3–18.
14. В. И. Шалашин, Е. Б. Кузнецов. Метод продолжения решения по параметру и наилучшая параметризация. — М.: Эдиториал УРСС, 1999, 224 с.
15. А. А. Белов, Н. Н. Калиткин. Проблема нелинейности при численном решении сверхжестких задач Коши // Математическое моделирование. 2016. Т. 28, № 4. С. 16–32.
16. Е. К. Жолковский, А. А. Белов, Н. Н. Калиткин. Решение жестких задач Коши явными схемами с геометрически-адаптивным выбором шага // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2018. № 227.
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-227>
17. Н. Н. Калиткин, А. Б. Альшин, Е. А. Альшина, Б. В. Рогов. Вычисления на квазиравномерных сетках. — М.: Физматлит, 2005.
18. А. А. Белов, Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина. Моделирование химической кинетики в газах // Математическое моделирование. 2016. Т. 28, № 8, С. 46–64.
19. Н. Н. Калиткин, Е. А. Альшина. Численные методы. Книга 1: Численный анализ. — М.: «Академия», 2013.
20. А. А. Белов. Пакет GACK для расчета химической кинетики с гарантированной точностью // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2015. №71.

Содержание

1	Введение	3
2	Геометрически-адаптивные сетки	5
2.1	Параметризация через длину дуги	5
2.2	Выбор шага по кривизне	6
2.3	Вычисление кривизны	6
2.4	Контроль точности	7
3	Сравнение решений	8
3.1	Процедура сравнения	9
3.2	Способы интерполяции	9
3.3	Обратная интерполяция длины дуги	10
3.4	Погрешность интерполяции	10
3.5	Процедура расчётов	11
4	Кинетика химических реакций	11
4.1	Горение водорода в кислороде	11
4.2	Результаты расчётов	15
5	Задача Аренсторфа	21
5.1	Постановка задачи	21
5.2	Один оборот	21
5.3	Три оборота	26