УДК 004.272.2:519.63

О.А. Дмитриева, д-р техн. наук, проф.,
Н.Г. Гуськова, аспирант,
Донецкий национальный технический университет, г. Покровск, Украина
dmitrieva.donntu@gmail.com, huskovanadiia@gmail.com

Моделирование жестких систем на основе коллокационных схем растяжения - сжатия

Материал статьи посвящен вопросам управления шагом интегрирования при моделировании жестких систем. В качестве методов численной реализации выбраны многошаговые многоточечные коллокационные разностные схемы. Управление точностью моделирования осуществляется за счет растяжения и сжатия шагов интегрирования, которые формируются переходом на соответствующие расчетные схемы. В случае невозможности обеспечения заданной точности в очередном расчетном блоке предусмотрено формирование нового опорного блока из уже посчитанных точек, что дает возможность локального повышения порядка точности аппроксимации без дополнительных вычислительных затрат. Для формирования расчетных схем разработана программная система, позволяющая сгенерировать неявные разностные схемы с заданными размерностями расчетных и опорных блоков. Поиск численного решения для блока осуществляется на основе использования ньютоновских итераций. Для ускорения сходимости начальные приближения определяются с помощью предикторного метода.

Ключевые слова: задача Коши, коллокационная схема, управление шагом интегрирования, точность аппроксимации, расчетный блок, ньютоновская итерация.

Введение

Как правило, при моделировании динамических объектов, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений, возникает проблема жесткости, обусловленная значительными различиями в скорости изменения пространственных переменных [1]. Также проблема жесткости возникает при численном решении систем дифференциальных уравнений в частных производных, если пространственные переменные дискретизируются конечными разностями или методом конечных элементов [2]. В таком случае полученная жесткая система уравнений характеризуется еще и большой размерностью [3], и тогда численная реализация становится возможной только при условии использования параллельных компьютеров. Этот факт породил насущную необходимость в создании эффективных численных методов, в частности, для численного решения задачи Коши

$$x' = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0, \qquad (1)$$

ориентированных на реализацию в параллельных вычислительных системах [4]. При этом необходимо отметить, что, поскольку, надежных универсальных способов оценки жесткости не существует [1], для реализации в параллельных компьютерах необходимо разрабатывать такие численные методы решения задачи Коши, которые могут работать без проверок на жесткость. Данная статья является продолжением работ [5-9].

Целью исследования является теоретическое обоснование и разработка параллельных численных методов, позволяющих обеспечивать автоматическое управление шагом интегрирования при численной реализации (1), представляющей из себя систему большой размерности.

Рассмотренные в [5-7] подходы, связанные с контролем локальной погрешности на основе сопоставления решений, полученных с разными порядками в совпадающих точках блока, оказываются очень результативным при решении нежестких уравнений и систем. Такие подходы могут быть использованы для оценки погрешности полученного решения. Если получить априорные оценки шага интегрирования для обеспечения заданной точности до начала счета, то можно утверждать, что ни на каком участке интегрирования полученная погрешность не превзойдет заданную. Но, к сожалению, указанные методы не позволяют обеспечивать изменение шага интегрирования во время счета. Этот вопрос становится наиболее актуальным, когда искомая функция (функции) на отдельных участках интегрирования характеризуется различными скоростями изменения [1]. В этом случае целесообразно использовать для интегрирования адаптируемый шаг, что не позволяют обеспечить расчетные схемы [5-7]. Кроме того актуальным остается вопрос о максимизации отношения

количества результативных шагов к общему числу выполненных [9].

Теоретическое обоснование расчетных схем растяжения-сжатия

Для устранения вышеуказанных недостатков в работе предлагается введение новых расчетных схем, которые также будут строиться на интерполяционных многочленах, степени которых совпадают с количеством точек коллокации, а значения многочленов в этих точках совпадают с правыми частями дифференциального уравнения в расчетных точках [6-7]. Но точки коллокации не обязательно будут представлять собой равномерную сетку (рис. 1), хотя, желательно (но не обязательно), чтобы они были связаны между собой каким-либо коэффициентами пропорциональности, например, степенями двойки. Поскольку речь идет о многошаговых методах, необходимо выделить множество точек, формирующих опорный блок

$$t_{n,i} = t_{n,0} + i\tau_n \in \left[t_{n,-m+1}, t_{n,0} \right],$$
$$i = -(m-1), -(m-2), ..., 0,$$

а также два множества точек, которые будут формировать расчетные блоки

$$t^{(1)}_{n,i} = t_{n,0} + i\tau_{n_1} \in \left[t_{n,0}, t_{n,s_1} \right], \quad i = 1,2,...,s_1,$$
$$t^{(2)}_{n,i} = t_{n,0} + i\tau_{n_2} \in \left[t_{n,0}, t_{n,s_2} \right], \quad i = 1,2,...,s_2,$$

где $\tau_n, \tau_{n_1}, \tau_{n_2}$ – шаги интегрирования в опорном блоке, и в блоках размерностью s_1 и s_2 соответственно. При этом проще всего связать шаги интегрирования τ_{n_1} и τ_{n_2} соотношениями $\tau_{n_1} = 2\tau_{n_2}$. Тогда между размерностями расчетных блоков должно будет выполняться соотношение $s_2 = 2s_1$. Счет, как и в предыдущих случаях [5-7], будет выполняться параллельно для двух расчетных схем с одинаковыми размерностями опорных блоков и с различающимися в s_2 / s_1 раз размерностями расчетных блоков. Канонический вид многошаговых коллокационных методов с числом опорных точек m и числом расчетных точек s_1 и s_2 соответственно, будет иметь вид

$$u^{(1)}_{n,i} = u_{n,0} + \tau_n \sum_{j=1-m}^{0} b^{(1)}_{i,j} F_{n,j} + \tau_{n_1} \sum_{j=1}^{s_1} a^{(1)}_{i,j} F^{(1)}_{n,j},$$
$$i = 1,2,...,s_1, \qquad (2)$$
$$u^{(2)}_{n,i} = u_{n,0} + \tau_n \sum_{j=1-m}^{0} b^{(2)}_{i,j} F_{n,j} + \tau_{n_2} \sum_{j=1}^{s_2} a^{(2)}_{i,j} F^{(2)}_{n,j},$$
$$i = 1,2,...,s_2,$$

где $u^{(1)}_{n,i}, u^{(2)}_{n,i}$ – приближенные значения решения задачи Коши (1) в точках $t^{(1)}_{n,i}, t^{(2)}_{n,i}$,

$F_{n,j} = f\left(t_n + j\tau_n, u_{n,j}\right)$ – правые части уравнения (1) в точках, $j = -(m-1), -(m-2), ..., 0,$ соответственно

$F^{(1)}_{n,j} = f\left(t_n + j\tau_{n_1}, u_{n,j}\right), \ j = 1,2,...,s_1,$

$F^{(2)}_{n,j} = f\left(t_n + j\tau_{n_2}, u_{n,j}\right), \ j = 1,2,...,s_2,$

$a^{(1)}_{i,j}, \ b^{(1)}_{i,j}, a^{(2)}_{i,j}, b^{(2)}_{i,j}$ – коэффициенты расчетных схем (2).

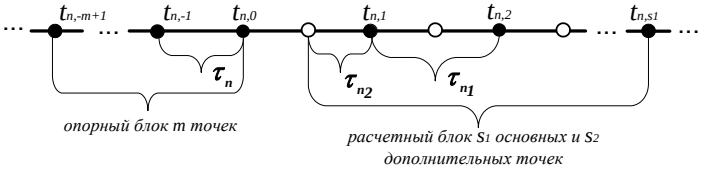

Рисунок 1 – Схема закрепления опорных, расчетных и промежуточных точек

Для разграничения рассчитанных и искомых точек введем соответствующие обозначения и представим их в виде векторов

$U_n = \left(u_{n,j}\right), n = 1,2,..., \ j = 1-m, 2-m, ..., 0$

– вектор посчитанных точек,

$U_{n+1} = \left(u_{n,j}\right), n = 1,2,..., \quad j = 1,2,...,s_1$ – вектор искомых точек для размерности блока s_1,

$V_{n+1} = \left(u_{n,j}\right), n = 1,2,..., \quad j = 1,2,...,s_2$ – вектор искомых точек для размерности блока s_2,

$F_n = f\left(t_n + j\tau_n, u_{n,j}\right), \ n = 1,2,..., \ j = 1-m, 2-m, ..., 0,$

$F_{n+1} = f\left(t_n + j\tau_{n_1}, u_{n,j}\right), n = 1,2,..., \quad j = 1,2,...,s_1,$

$\Psi_{n+1} = f\left(t_n + j\tau_{n_2}, u_{n,j}\right), n = 1,2,..., \quad j = 1,2,...,s_2$

– соответственно, правые части уравнений (2) в известных и искомых точках с разными размерностями блоков. Обозначим дополнительно $U_{n,0} = \left(u_{n,0}\right)e$ – решение в точке $t_{n,0}$, e – единичный вектор размерности s. Тогда в векторной форме система уравнений (2) для нашего случая будет иметь вид

$$U_{n+1} = U_{n,0} + \tau_n B^{(1)} F_n + \tau_{n_1} A^{(1)} F_{n+1}. \qquad (3)$$
$$V_{n+1} = U_{n,0} + \tau_n B^{(2)} F_n + \tau_{n_2} A^{(2)} \Psi_{n+1}.$$

Для начала расчета необходимо ввести множество опорных значений, которые могут быть определены одношаговым методом, обеспечивающим требуемую точность расчетов.

Тогда поиск численного решения может быть сведен к решению на каждом шаге двух нелинейных систем уравнений (3), с последовательным определением векторов $U_1, V_1, U_2, V_2 \ldots$. Для определения неизвестных коэффициентов в (2) можно использовать либо условия аппроксимации [8], либо интегро-интерполяционный метод [9]. После определения неизвестных коэффициентов и формирования матриц $A^{(1)}, B^{(1)}$ с размерностями $s_1 \times m$ и $s_1 \times s_1$, $A^{(2)}, B^{(2)}$ с размерностями $s_2 \times m$ и $s_2 \times s_2$, вычисления многошаговым блочным методом, представленным в виде систем нелинейных уравнений (3), можно свести к следующим итерационным процессам

$$U_{n+1}^{(1)} = U_{n,0} + \tau_n B^{(1)} F_n, \qquad (4)$$
$$U_{n+1}^{(k+1)} = (U_{n,0} + \tau_n B^{(1)} F_n) + \tau_{n_1} A^{(1)} F_{n+1}^{(k)},$$
$$n = 1,2,\ldots,\ k = 1,\ldots,s_1,$$
$$V_{n+1}^{(1)} = U_{n,0} + \tau_n B^{(2)} F_n,$$
$$V_{n+1}^{(k+1)} = (U_{n,0} + \tau_n B^{(2)} F_n) + \tau_{n_2} A^{(2)} \Psi_{n+1}^{(k)},$$
$$n = 1,2,\ldots,\ k = 1,\ldots,s_2.$$

Системы в (4) требуют предварительно определения значений вектора U_0 в опорных точках начального блока. Определение начальных значений $U_{n+1}^{(1)}, V_{n+1}^{(1)}$ в расчетных блоках осуществляется на основе многошагового предикторного метода Адамса, что позволяет повысить точность начального приближения. Вычисление приближенных значений $U_{n+1}^{(k+1)}, V_{n+1}^{(k+1)}$ решения задачи Коши в каждом следующем расчетном блоке осуществляется итерационно и независимо. После получения решения в очередном блоке осуществляется сопоставление полученных значений в совпадающих точках.

Управление шагом интегрирования в расчетных схемах растяжения-сжатия

Величина нормы расхождений между значениями приближенных решений в совпадающих s_1 узлах основного блока является определяющей для принятия решения о выборе размера шага. Основным является метод $(m \times s_1)$, локальная погрешность которого в *i*–ом узле блока определяется на основе соотношения

$$\gamma_{n,i}^{(m,s_1)} = u^{(m,s_1)}_{n,i} - x(t_{n,i}) \approx$$
$$\approx \varphi^{(s_1+m+1)}(t_{n,0}, x_{n,0})\tau^{s_1+m+1}, \qquad (5)$$
$$\tau = max(\tau_{n_1}, \tau_{n_2}), \quad i = 1,2,\ldots,s_1,$$

где $x(t_{n,i})$ – точное решение в *i* –той точке *n* – того блока,

$u^{(m,s_1)}_{n,i}$ – численное решение задачи Коши (1) $(m \times s_1)$ методом, полученное для *i*–той точки *n*–ого блока.

Если принять к сведению, что в расчетном блоке должны быть совпадающие точки, значения в которых посчитаны двумя различными схемами (4), и связать размерности блоков коэффициентами пропорциональности, самый простой из которых можно выбрать равным 2, то для $(m \times s_2)$ метода, при условии, что $s_2 = 2s_1$, локальная погрешность в тех же узлах будет определяться как

$$\gamma_{n,i}^{(m,s_2)} = u_{n,i}^{(m,s_2)} - x(t_{n,i}) \approx$$
$$\approx \varphi^{(2s_1+m+1)}(t_{n,0}, x_{n,0})\tau^{2s_1+m+1}, \qquad (6)$$
$$\tau = max(\tau_{n_1}, \tau_{n_2}), \quad i = 1,2,\ldots,s_2,$$

где $u_{n,i}^{(m,s_2)}$ – численное решение задачи Коши (1) методом $(m \times s_2)$, полученное для *i*–той точки *n*–ого блока. Тогда из соотношений (5) и (6) можно получить представление главного члена погрешности метода $(m \times s_1)$

$$\gamma_{n,i}^{(m,s)} = u^{(m,s_1)}_{n,i} - u^{(m,s_2)}_{n,i} \approx$$
$$\approx \varphi^{(s_1+m+1)}(t_{n,0}, x_{n,0})\tau^{s_1+m+1}, \qquad (7)$$
$$\tau = max(\tau_{n_1}, \tau_{n_2}), \quad i = 1,2,\ldots,s_1,$$

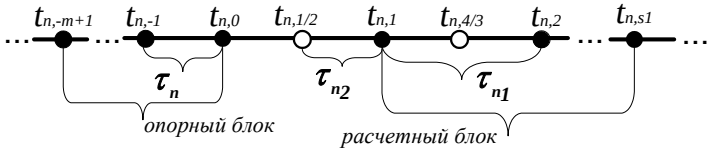

Рисунок 2 – Схема сохранения шага в расчетном блоке с основными соотношениями между шагами интегрирования $\tau_{n_1} = \tau_n, \tau_{n_2} = \tau_{n_1}/2.$

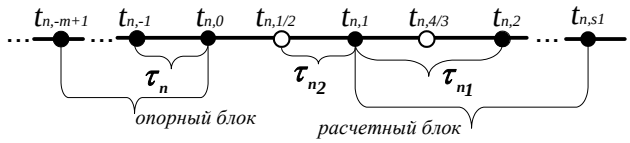

Рисунок 3 – Схема увеличения шага в расчетном блоке с соотношениями между шагами интегрирования $\tau_{n_1} = 2\tau_n, \tau_{n_2} = \tau_{n_1}/2.$

Управление шагом интегрирования для предложенного подхода обеспечивается контролем локальной погрешности (7). После получения значений $u_{n,i}^{(m,s_1)}$ и $u_{n,i}^{(m,s_2)}$, которые вычисляются параллельно и независимо друг от друга с использованием ньютоновских итераций, оценивается норма вектора расхождений в совпадающих точках, которая сравнивается с заданным значением точности *Tol*.

Если локальная погрешность не превышена, формируются вектор решений и новое значение шага. Шаг при этом может оставаться прежним (рис. 2), а может быть принято решение о его увеличении (рис. 3), если на протяжении нескольких предшествующих шагов не было сокращения шага, и расхождение между достигнутой локальной погрешностью и заданной предельной составляет не менее порядка.

Если локальная погрешность превышена, вектор решений не формируются, схема $(m \times s_2)$ становится основной (рис. 4), но из множества посчитанных по ней значений оставляются только первые s_1, которые будут определять возможное решение. Дополнительно рассчитываются значения в сокращенном блоке по схеме $(m \times s_2)$ с новым шагом τ_{n_2}.

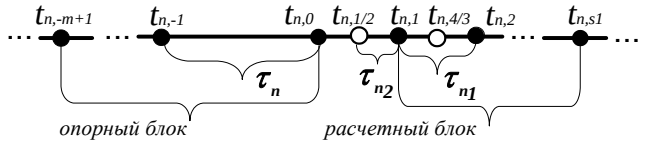

Рисунок 4 – Схема сокращения шага в расчетном блоке с соотношениями между шагами интегрирования $\tau_{n_1} = \tau_n / 2, \tau_{n_2} = \tau_{n_1} / 2.$

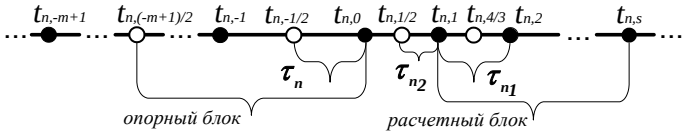

Рисунок 5 – Схема сокращения шага в опорном блоке с соотношениями между шагами интегрирования

$$\tau_n = \tau_n / 2, \tau_{n_1} = \tau_n, \tau_{n_2} = \tau_{n_1} / 2.$$

Если после сокращения шага в опорном блоке локальная погрешность пришла в норму, формируется вектор решений с измененными размерностями шагов и соответствующими им значениями, осуществляется переход на стандартную расчетную схему (рис. 2). В том случае, если локальная погрешность все еще превышает заданную, осуществляется попытка сокращения шага в опорном блоке (рис. 5). Последовательное применение схем, приведенных на рис. 3–5, позволяет обеспечить заданную точность нужного порядка. После формирования решения, достигнутого с заданной точностью, расчеты переводятся на схему сохранения шага (рис. 2).

Формирование расчетных схем

В отличие от подхода к оценке погрешности, который основывался на введении дополнительной точки в опорный блок и требовал генерирования двух расчетных схем: основной для метода $(m \times s)$ и дополнительной для метода $((m+1) \times s)$, предлагаемый подход требует большего количества расчетных схем. В частности, необходимо сгенерировать базовые расчетные схемы, соответствующие интегрированию с неизменным шагом, затем предусмотреть схемы для увеличения и сокращения шагов. Причем схемы сокращения необходимо подготовить как для расчетного, так и для опорного блоков. Фактически генерирование этих схем сводится к определению расчетных коэффициентов и осуществляется один раз, до начала вычислений, подразумевая их многократное использование при решении различных задач.

Приведем в качестве примера расчетные схемы для метода $((m \times s_1) \times (m \times s_2))$ со значениями параметров $m = 3, s_1 = 3, s_2 = 6.$ Получим эти разностные схемы с помощью интегро-интерполяционного метода. Основные расчетные схемы для метода (3×3) примут вид

$$B^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{11}{1440} & -\frac{31}{480} & \frac{401}{720} \\ 0 & -\frac{1}{90} & \frac{17}{45} \\ \frac{3}{160} & -\frac{21}{160} & \frac{57}{80} \end{pmatrix},$$

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{401}{720} & -\frac{31}{480} & \frac{11}{1440} \\ \frac{19}{15} & \frac{17}{45} & -\frac{1}{90} \\ \frac{57}{80} & \frac{219}{160} & \frac{51}{160} \end{pmatrix}$$

Аналогично генерируются основные схемы для метода $(m \times s_2)$, а также соответствующие дополнительные схемы для сокращения и увеличения шага, которые из-за громоздкости представления в этой статье опущены. При оценке погрешности основных расчетных формул необходимо принять во внимание, что максимальный порядок

аппроксимации составляет величину $m+s_1$, поэтому для случая (3×3) при разложении решений в ряды Тейлора ограничимся членами порядка $O\left[\tau^7\right]$, получим для соответствующих расчетных точек $u_{n,1}^{(3,3)}, u_{n,2}^{(3,3)}, u_{n,3}^{(3,3)}$:

$$\frac{191\,x^{(7)}[t_n]\tau^6}{60480}+O\left[\tau^7\right],$$

$$-\frac{x^{(7)}[t_n]\tau^6}{756}+O\left[\tau^7\right],$$

$$\frac{29\,x^{(7)}[t_n]\tau^6}{2240}+O\left[\tau^7\right].$$

Таким образом, принимая во внимание доступную размерность процессорного поля и требуемую точность вычислений, можно сформировать разностные схемы растяжения-сжатия соответствующего порядка, обеспечивающих автоматическую адаптацию шага интегрирования.

Проведение экспериментов с тестовыми уравнениями и системами

Для проведения экспериментов использовались известные тестовые задачи, которые позволяют усиливать жесткость уравнений путем вариации параметров. В качестве одиночного уравнения использовалась задача, приведенная в [10], вида

$$x'(t) = -\lambda(x_1(t) - t) + 1, t \in [0, 10], \quad (8)$$

с начальным условием $x(t_0) = 1$, и с известным точным решением

$$x(t) = e^{(-\lambda t)} + t.$$

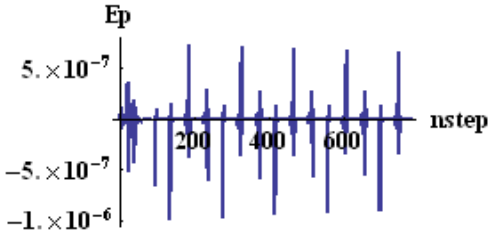

Рисунок 6 – Накопленная погрешность решения (8) по $x(t)$ при $\lambda = 100, Tol = 10^{-6}$

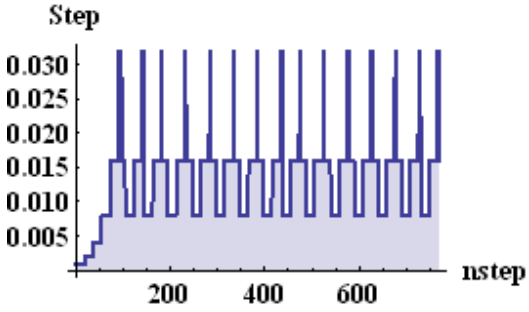

Рисунок 7 – Автоматическое изменение шага интегрирования (8) при $\lambda = 100, Tol = 10^{-6}$

Как показано в [10], методы без управления шагом для высоких значений параметра λ не могут обеспечить заявленную точность вычисления. Поскольку точное решение (8) известно, то в качестве значений в m начальных точках можно использовать точные решения. Для случаев, когда точное решение отсутствует, необходимо определить требуемое число начальных значений каким-либо одношаговым методом с сопоставимой точностью. Погрешность полученного численного решения и соответствующие значения шагов интегрирования при значениях параметра $\lambda = 100$ с заданной точностью 10^{-6} приведены на рис. 6-7, результаты моделирования с той же точностью при параметре λ=1000 представлены на рис. 8-9.

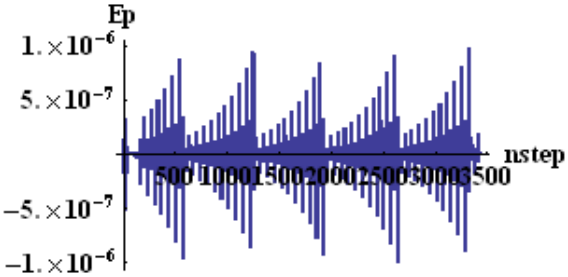

Рисунок 8 - Накопленная погрешность решения (20) по $x(t)$ при $\lambda = 1000, Tol = 10^{-6}$

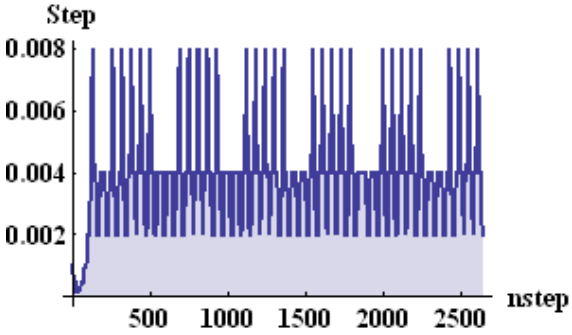

Рисунок 9 – Автоматическое изменение шага интегрирования (20) при $\lambda = 1000, Tol = 10^{-6}$

В качестве одной из тестовых систем обыкновенных дифференциальных уравнений рассматривалась система, известная как задача Капса [11], вида

$$x_1'(t) = -(\lambda + 2)x_1(t) + \lambda x_2^2(t), \quad (9)$$
$$x_2'(t) = x_1(t) - x_2(t)\big(1 + x_2(t)\big), t \in [0, 2],$$

с начальным вектором

$$x(t_0) = (1,1)^T,$$

с известными точными решениями

$$x_1(t) = 2\,e^{(-t)},$$
$$x_2(t) = 2\,e^{(-t)}.$$

Погрешность полученных численных решений и соответствующие значения шагов интегрирования при значениях параметра $\lambda = 100$ с заданной точностью 10^{-9} приведены

на рис. 10-11. На рис. 12-14 приведена динамика изменения шага для решений, полученных с той же точностью при соответствующих значениях параметра $\lambda = 100$, λ=1000 и $\lambda = 10000$.

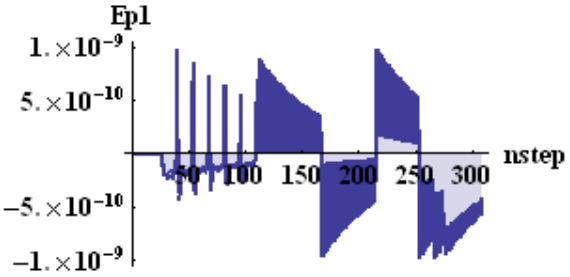

Рисунок 10 – Накопленная погрешность решения (9) по $x_1(t)$ при $\lambda = 100, Tol = 10^{-9}$

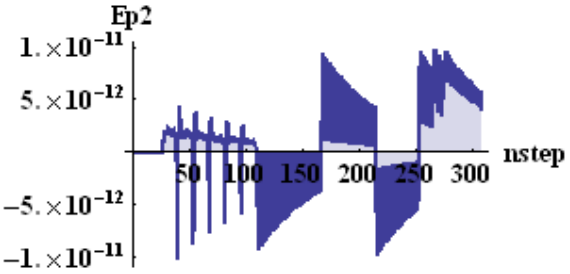

Рисунок 11 – Накопленная погрешность решения (9) по $x_2(t)$ при $\lambda = 100, Tol = 10^{-9}$

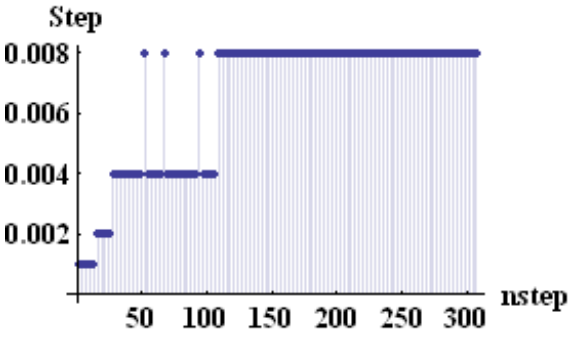

Рисунок 12 – Автоматическое изменение шага интегрирования (9) при $\lambda = 100, Tol = 10^{-9}$

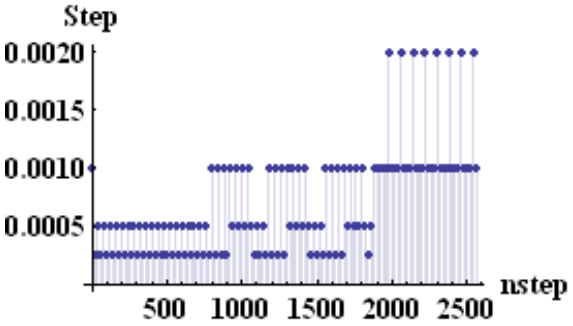

Рисунок 13 – Автоматическое изменение шага интегрирования (9) при $\lambda = 1000, Tol = 10^{-9}$

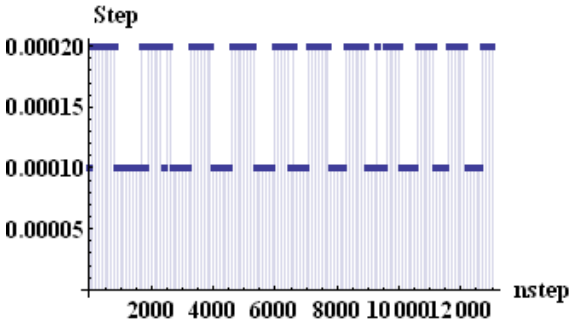

Рисунок 14 – Автоматическое изменение шага интегрирования () при $\lambda = 10000, Tol = 10^{-9}$

Тестовая система Ламберта [12] имеет вид

$$x_1'(t) = -2x_1(t) + x_2(t) + 2\,sin(t), \quad (10)$$
$$x_2'(t) = 998x_1(t) - 999x_2(t) + 999\big(cos(t) - sin(t)\big),$$

с начальным вектором

$$x(t_0) = (2,3)^T, \qquad t \in [0, 10],$$

при этом известны точные решения

$$x_1(t) = 2\,e^{(-t)} + sin(t),$$
$$x_2(t) = 2\,e^{(-t)} + cos(t).$$

Использование для численной реализации предложенных схем растяжения-сжатия позволяет обеспечить заданный уровень погрешности 10^{-6} (рис. 15-16) с вариацией шага, динамика которого приведена на рис. 17.

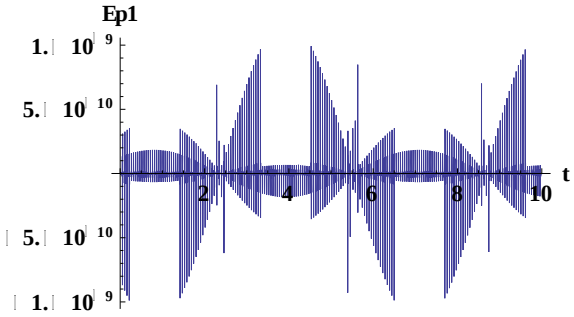

Рисунок 15 – Накопленная погрешность решения (10) по $x_1(t)$ при $Tol = 10^{-6}$

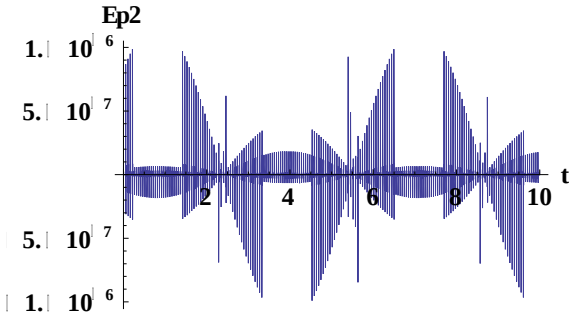

Рисунок 16 – Накопленная погрешность решения (10) по $x_2(t)$ при $Tol = 10^{-6}$

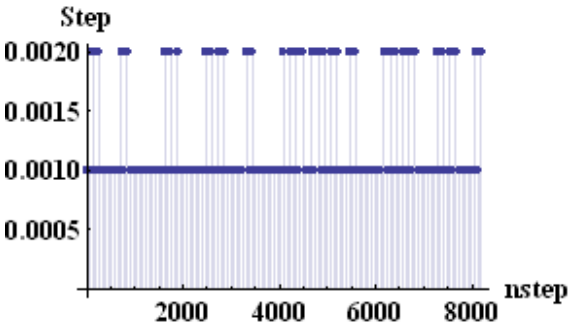

Рисунок 17 – Автоматическое изменение шага интегрирования (10) при $Tol = 10^{-6}$

На рис. 18 приведена динамика шага интегрирования для еще одной тестовой задачи Ламберта вида

$$x'(t) = Ax(t),\ t \in [t_0, T], \qquad (11)$$
$$x(t_0) = (1,0,-1)^T,\quad t \in [0,1],$$
$$A = \begin{pmatrix} -21 & 19 & -20 \\ 19 & -21 & 20 \\ 40 & -40 & -40 \end{pmatrix},$$

приведенной в [13] с известными точными решениями

$$x_1(t) = \frac{1}{2}\, e^{(-2t)} + \frac{1}{2}\, e^{(-40t)}\left(cos(40t) + sin(40t)\right),$$
$$x_2(t) = \frac{1}{2}\, e^{(-2t)} - \frac{1}{2}\, e^{(-40t)}\left(cos(40t) + sin(40t)\right),$$
$$x_3(t) = -\, e^{(-40t)}\left(cos(40t) - sin(40t)\right).$$

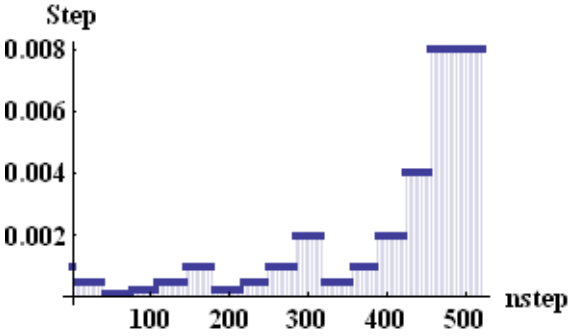

Рисунок 18 – Автоматическое изменение шага интегрирования (11) при $Tol = 10^{-6}$

Полученные экспериментальные результаты позволяют утверждать, что предложенные разностные схемы растяжения-сжатия обеспечивают эффективное управление шагом интегрирования для произвольной наперед заданной точности численного решения.

Заключение

В работе рассмотрены вопросы управления шагом интегрирования при моделировании жестких систем.

Научная новизна заключается в теоретическом обосновании возможности использования расчетных схем растяжения-сжатия. Построение предложенных схем обеспечивается использованием интерполяционных многочленов, степени которых совпадают с количеством точек коллокации, а значения многочленов в этих точках совпадают с правыми частями дифференциального уравнения в расчетных точках. Управление точностью моделирования осуществляется за счет растяжения и сжатия шагов интегрирования, которые обеспечиваются переходом на соответствующие расчетные схемы. В случае невозможности обеспечения заданной точности в очередном расчетном блоке, предусмотрено формирование нового опорного блока из уже посчитанных точек, что дает возможность локального повышения порядка точности аппроксимации без дополнительных вычислительных затрат.

Практическая значимость. Для формирования расчетных схем разработана программная система, позволяющая сгенерировать неявные разностные схемы с заданными размерностями расчетных и опорных блоков. Поиск численного решения для каждого расчетного блока осуществляется на основе использования ньютоновских итераций. Для ускорения сходимости начальные приближения определяются с помощью предикторного метода Адамса. В проведенных экспериментах кроме заданных показателей по точности численного решения и размерности опорных и расчетных блоков отслеживаются также соотношения количества принятых (результативных) шагов к общему числу рассчитанных, которые обеспечивают значения коэффициентов, близкие к единице.

Список использованной литературы

1. Hairer E. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems / E. Hairer, G. Wanner. – Springer–Verlag, 1999. – 685p.
2. Самарский А.А. Численные методы / А. А. Самарский, А. В. Гулин. – М.: Наука, 1989. – 432с.
3. Petcu D. Solving Large Systems of Differential Equations with PaViS / D. Petcu // Parallel Processing and Applied Mathematics. – 2002. – Vol. 23. – P. 437–445.
4. Migdalas A. Parallel Computing in Optimization / A. Migdalas, M. Panos Pardalos, S. Storoy. – Berlin-Heidelberg: Springer Verlag, 2012. – 608 p. – ISBN 978-1461334026
5. Dmitrieva O. Parallel Step Control. Development of parallel algorithms of the step variation for simulation of stiff dynamic systems / O. Dmitrieva, L. Feldman. – Lambert Academic Publishing. – 2013. – 72p.

6. Dmitrieva O. Parallel Algorithms of Simulation. Increase of simulation of dynamic objects with the lumped parameters / O. Dmitrieva, A. Firsova. – Lambert Academic Publishing, 2012. – 192 p.
7. Дмитрієва О.А. Паралельне моделювання динамічних об'єктів зі сконцентрованими параметрами/ О.А. Дмитрієва. - Харків: «Ноулідж», 2014. – 336 с.
8. Дмитриева О.А. О построении параллельных разностных схем моделирования с вариацией шага в расчетном блоке / Дмитриева О.А // Вестник НТУ «ХПИ». Серия: Информатика и моделирование. – Харьков: НТУ «ХПИ». – 2016. – № 21(1193). – С. 20 – 28.
9. Дмитриева О.А. Параллельные численные методы моделирования динамических объектов: монография / О.А. Дмитриева. – Красноармейск: ГВУЗ «ДонНТУ», 2016. – 384 с
10. Numerical Solution of Extended Block Backward Differentiation Formulae for Solving Stiff ODEs / [S.A.M. Yatim, Z.B. Ibrahim, K.I. Othman, M.B. Suleiman] //Proceedings of the World Congress on Engineering. WCE 2012, July 4 – 6, 2012, London, U.K. – 2012. – Vol. 1. – P. 109–113.
11. Kaps P. A study of Rosenbrock-type methods of high order / P.Kaps, G. Wanner // Numerische Mathematik, vol. 38, no. 2, pp. 279–298, 1981.
12. Lambert J. D., Computational Methods in Ordinary Differential Equations/ J. D. Lambert, John Wiley & Sons, New York, NY, USA, 1973. – 278 p.
13. Lambert J. D., Numerical methods for ordinary differential systems. The initial value problem, John Wiley & Sons, New York, NY, USA, 1991 – 293p.

Надійшла до редколегії 25.03.2017

О.А. ДМИТРІЄВА, Н.Г. ГУСЬКОВА
Донецький національний технічний університет, м. Покровськ, Україна

МОДЕЛЮВАННЯ ЖОРСТКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВІ КОЛЛОКАЦІОННИХ СХЕМ РОЗТЯГУВАННЯ - СТИСНЕННЯ

Матеріал статті присвячений питанням управління кроком інтегрування при моделюванні жорстких систем. В якості методів чисельної реалізації обрані багатокрокові багатоточкові колокаційні різницеві схеми. Управління точністю моделювання здійснюється за рахунок розтягування і стиснення кроків інтегрування, які забезпечуються переходом на відповідні розрахункові схеми. У разі неможливості забезпечення заданої точності в наступному розрахунковому блоці передбачено формування нового опорного блоку з уже порахованих точок, що дає можливість локального підвищення порядку точності апроксимації без додаткових обчислювальних витрат. Для формування розрахункових схем розроблена програмна система, що дозволяє згенерувати неявні різницеві схеми із заданими розмірностями розрахункових і опорних блоків. Пошук чисельного розв'язку для кожного розрахункового блоку здійснюється на основі використання ньютоновських ітерацій. Для прискорення збіжності початкові наближення визначаються за допомогою предикторного методу.

Ключові слова: задача Коші, колокаційна схема, управління кроком інтегрування, точність апроксимації, розрахунковий блок, ньютоновська ітерація.

O. DMITRIEVA, N. HUSKOVA
Donetsk National Technical University, Pokrovsk, Ukraine

MODELING OF STIFF SYSTEMS BASED ON COLLOCATION SCHEMES OF STRETCHING – COMPRESSION

The article is devoted to the management integration step in the simulation of stiff systems. As a numerical implementation method multistep multipoint collocation difference schemes were chosen. Precision simulation is controlled by stretching and compression of integration steps that are provided with a direct link to the relevant settlement schemes. In case of impossibility of support of the given accuracy formation of the new reference unit from already counted points is provided in the next estimated unit that gives the chance of local increase in an order of accuracy of approximation without additional computing expenses. To form the design schemes a software system was developed that allows you to generate an implicit finite difference schemes with specified dimensions of settlement and support units. Search of numerical solution for each settlement unit is based on the use of Newtonian iterations. To speed up the convergence the initial approximations are defined using predictive method. To begin the calculation, a set of reference values is introduced, which can be determined by a one-step method that provides the required accuracy of calculations. Search for solutions for each step of two nonlinear systems with sequential definition of vectors. To determine the unknown coefficients, either the approximation conditions or the integro-interpolation method are used. Calculation of approximate values of the solution of Cauchy problems in each subsequent computational block is carried out iteratively and independently. After obtaining the solution in the next block, the values are compared in coinciding points.

Key words: Cauchy problem, collocation scheme, management integration step, the accuracy of approximation calculation unit, Newton iteration.

REFERENCES

1. Hairer E., Wanner G. (1999), *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*, Springer–Verlag, 685p.
2. Samarskiy A. A., Gulin A. V. (1989), *Numerical methods* [Chislennyye metody], Moscow, Nauka, 432p.
3. Petcu D. (2002), *Solving Large Systems of Differential Equations with PaViS*, Parallel Processing and Applied Mathematics, Vol. 23, pp. 437–445.
4. Migdalas A., Panos Pardalos M., Storoy S. (2012), *Parallel Computing in Optimization*, Berlin-Heidelberg: Springer Verlag, 608 p. – ISBN 978-1461334026
5. Dmitrieva O., Feldman L. (2013), *Parallel Step Control. Development of parallel algorithms of the step variation for simulation of stiff dynamic systems*, Lambert Academic Publishing, 72p.
6. Dmitrieva O., Firsova A. (2012), *Parallel Algorithms of Simulation. Increase of simulation of dynamic objects with the lumped parameters*, Lambert Academic Publishing, 192 p.
7. Dmitrieva O.A. (2014), *The parallel simulation of dynamic objects with concentrated parameters* [Paralelne modelyuvannya dynamichnykh ob'yektiv zi skontsentrovanymy parametramy], Kharkiv, Knowledge, 336 p.
8. Dmitrieva O.A. (2016), *On the construction of parallel difference modeling schemes with a step variation in the design block* [O postroyenii parallel'nykh raznostnykh skhem modelirovaniya s variatsiyey shaga v raschetnom bloke], Vestnik NTU «KHPI». Seriya: Informatika i modelirovaniye. – Khar'kov: NTU «KHPI», № 21(1193), pp. 20 – 28.
9. Dmitrieva O.A. (2016), *Parallel numerical methods for modeling dynamic objects: monograph* [Parallel'nyye chislennyye metody modelirovaniya dinamicheskikh ob'yektov: monografiya], Krasnoarmeysk: GVUZ «DonNTU», 384 p
10. Yatim S.A.M., Ibrahim Z.B., Othman K.I., Suleiman M.B. (2012), *Numerical Solution of Extended Block Backward Differentiation Formulae for Solving Stiff ODEs*, Proceedings of the World Congress on Engineering. WCE 2012, July 4 – 6, 2012, London, U.K., Vol. 1, pp. 109–113.
11. Kaps P., Wanner G. (1981), *A study of Rosenbrock-type methods of high order*, Numerische Mathematik, vol. 38, no. 2, pp. 279–298.
12. Lambert J. D. (1973), *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*, John Wiley & Sons, New York, NY, USA, 278 p.
13. Lambert J. D. (1991), *Numerical methods for ordinary differential systems. The initial value problem*, John Wiley & Sons, New York, NY, USA, 293p.