

©Белов А. А., Калиткин Н. Н., 2016

DOI: 10.18255/1818-1015-2016-5-529-538

УДК 519.6

## Численные методы решения задач Коши с контрастными структурами

Белов А. А., Калиткин Н. Н.

*получена 20 июня 2016*

**Аннотация.** Изложены современные численные методы, позволяющие наиболее эффективно рассчитывать задачи с контрастными структурами. К ним относятся явно- неявные схемы Розенброка с комплексными коэффициентами и чисто неявные оптимальные обратные схемы Рунге–Кутты. В качестве аргумента целесообразно выбирать длину дуги интегральной кривой. Этот аргумент обеспечивает высокую надежность расчета и существенно снижает трудоемкость для систем уравнений невысокого порядка. Для повышения экономичности предложен алгоритм автоматического выбора шага по кривизне интегральной кривой. Этот алгоритм не уступает стандартным алгоритмам по экономичности, но существенно превосходит их по надежности. Показано, что при этом можно одновременно вычислять апостериорную асимптотически точную оценку погрешности методом Ричардсона. Стандартные алгоритмы автоматического выбора шага не могут дать таких оценок, а фактическая погрешность у них нередко на много порядков превышает заданную пользователем. Исследованы границы применимости численных методов. При решении задач сверхвысокой жесткости они могут не дать удовлетворительного ответа; в этих случаях следует переходить к приближенным аналитическим методам. Таким образом, численные и асимптотические методы являются взаимно дополняющими.

**Ключевые слова:** жесткая задача Коши, контрастная структура, автоматический выбор шага, кривизна в многомерном пространстве, оценки по методу Ричардсона, диагностика сингулярностей, разрушение решений.

**Для цитирования:** Белов А. А., Калиткин Н. Н., "Численные методы решения задач Коши с контрастными структурами", *Моделирование и анализ информационных систем*, **23:5** (2016), 529–538.

**Об авторах:**

Белов Александр Александрович, [orcid.org/0000-0002-0918-9263](https://orcid.org/0000-0002-0918-9263), аспирант  
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,  
Ленинские горы, 1, стр. 2, г. Москва, 119991 Россия, e-mail: [belov\\_25.04.1991@mail.ru](mailto:belov_25.04.1991@mail.ru)

Калиткин Николай Николаевич, [orcid.org/0000-0002-0861-1792](https://orcid.org/0000-0002-0861-1792),  
член-корреспондент РАН, доктор физ.-мат. наук, профессор,  
Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН,  
Миусская пл., 4, г. Москва, 125047 Россия, e-mail: [kalitkin@imamod.ru](mailto:kalitkin@imamod.ru)

**Благодарности:**

Работа поддержана грантами РФФИ №14-01-00161, 16-31-00062

## 1. Введение

В практических приложениях часто возникают задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих сразу несколько процессов с

сильно различающимися масштабами времени. Простейшим примером может служить система уравнений кинетики химических реакций, в которой скорости отдельных реакций отличаются на много порядков. Другой пример – широкополосные радиотехнические системы, в которых отношение границ частотного спектра превышает  $10^8$ . Такие задачи получили название *жестких*. Их теория и практика расчета начали разрабатываться в 1950-е годы, и достигнутые успехи описаны в [1]. Однако такие задачи по-прежнему остаются непростыми, а зачастую и очень трудными для расчета.

В простейших случаях решение таких задач содержит только начальный пограничный слой, после чего решение выходит на сравнительно медленно меняющийся регулярный участок. Заметно труднее задачи, в которых пограничные слои могут возникать в ходе расчетов в различные моменты времени. Внутренние пограничные слои называются *контрастными структурами*.

Для решения подобных задач параллельно развивались аналитические методы, подробный обзор которых дан в [2]. Они основаны на разложении в асимптотические ряды по обратным степеням параметра жесткости. Поэтому они дают особенно хорошую точность в случае задач сверхвысокой жесткости. Однако при уменьшении жесткости требуется учитывать большее число членов ряда, и их реализация становится сложной. Кроме того, для систем большого числа уравнений их запись и реализация оказываются громоздкими.

Поэтому встает вопрос о разграничении областей эффективного применения аналитических и численных методов. Для этого надо выбрать наиболее эффективные численные методы и выяснить, при каких жесткостях и других особенностях задач они конкурентоспособны. Различные аспекты этой проблемы исследованы в данной работе.

## 2. Структура решения

Изложим общие идеи на примере конкретной задачи Коши для одного уравнения, содержащей все характерные особенности общего случая:

$$\frac{du}{dt} = -\lambda(t) \frac{(u^2 - a^2)^2}{(u^2 + a^2)}, \quad u(0) = u^0, \quad |u^0| < a. \quad (1)$$

Эта задача при соответствующем выборе  $u^0$  имеет 2 стационарных решения  $u = \pm a$ . Эти решения являются корнями вырожденного уравнения кратности 2. Они устойчивы, если  $|u^0| < a$ , и неустойчивы при  $|u^0| > a$ .

Задача (1) решается в квадратурах, что делает ее очень удобным тестом для численных расчетов:

$$u(t) = -\frac{2\Lambda(t)a^2}{1 + \sqrt{1 + 4a^2\Lambda(t)^2}}, \quad \Lambda(t) = \frac{u^0}{(u^0)^2 - a^2} + \int_0^t \lambda(\tau) d\tau. \quad (2)$$

Нетрудно выбрать такое  $\lambda(t)$ , чтобы квадратура точно вычислялась, а само решение передавало те или иные особенности. Например, возьмем  $\lambda(t) = \lambda_0 \cos t$ . Тогда

$$\Lambda(t) = \frac{u^0}{(u^0)^2 - a^2} + \lambda_0 \sin t. \quad (3)$$

На рис. 1 показано решение этой задачи при различных  $\lambda_0$ . Видно, что при увеличении  $\lambda_0$  решение стремится к ступенчатому. Это наглядная интерпретация контрастных структур, соответствующая высокой жесткости.

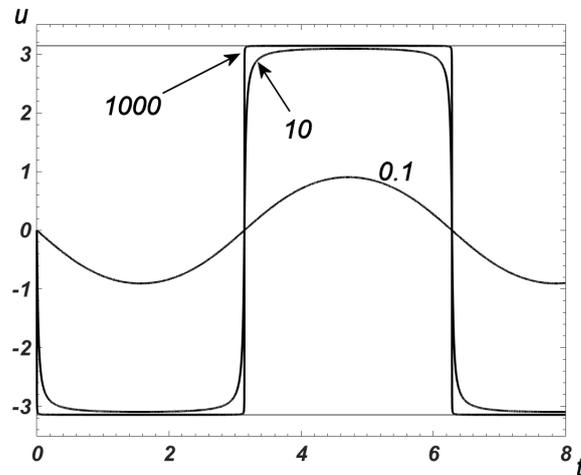


Рис. 1. Тест (1); жирные кривые – точное решение (2) – (3) при разных значениях  $\lambda_0$  (указаны около кривых); тонкие прямые – стационары  
Fig. 1. Test problem (1); solid curves are the exact solutions for different values of  $\lambda_0$  (the latter are given near the curves); thin straight lines are stationary solutions

Обычно в структуре решения выделяют следующие характерные участки. Во-первых, это области плавного изменения решения, которые называются регулярными. Во-вторых, области очень быстрого изменения решения, называемые пограничными слоями.

Мы предлагаем выделить еще один тип характерных областей, расположенных между пограничными слоями и регулярными участками. В этих областях решение имеет большую кривизну, и мы называем их *переходными зонами*. Кроме того, пограничный слой состоит из двух качественно разных участков (что ранее в литературе не отмечалось). Первая половина пограничного слоя, идущая от регулярного участка, соответствует плохой обусловленности задачи (1). За ней следует второй участок пограничного слоя, ведущий к регулярному решению. На нем задача является жесткой в узком смысле.

### 3. Классификация жесткости

Для практической помощи вычислителю дадим некоторую качественную классификацию, основанную на практике численных расчетов и не претендующую на математическую строгость.

*Мягкими* назовем задачи, решения которых на графике хорошо отличимы от стационаров (случай  $\lambda_0 = 10^{-1}$  на рис. 1).

*Жесткими* назовем задачи, решения которых с графической точностью ложатся на стационары, но визуальна ширина пограничного слоя ненулевая (случай  $\lambda_0 = 10^1$  на рис. 1).

**Сверхжесткими** назовем задачи, в которых ширина пограничного слоя визуально пренебрежимо мала, так что решение имеет ступенчатый характер; при этом регулярные участки визуально сливаются с корнями вырожденного уравнения (случай  $\lambda_0 = 10^3$  на рис. 1).

**Ультразжесткими** назовем задачи, у которых регулярные участки решения в пределах ошибок компьютерного округления неотличимы от корней вырожденного уравнения (для данного примера это будет при  $\lambda_0 = 10^5$  и более, если вычисления 64-битовые).

Категорию жесткости надо учитывать, выбирая метод решения задачи. Но по виду исходного уравнения априори определить категорию жесткости удастся не всегда. Зачастую это приходится делать методом проб и ошибок.

#### 4. Длина дуги

Численное решение упрощается, если в качестве новой независимой переменной выбрать длину дуги интегральной кривой  $dl^2 = dt^2 + du^2 = (1 + u_t^2)dt^2$ .

Тогда почти вертикальные участки кривой  $u(t)$  превращаются в наклонные участки кривой  $u(l)$  (см. рис. 2) с наклоном  $\pm 1$ . Поэтому формально пограничные слои исчезают.

Однако это не означает, что задача перестает быть жесткой. Остаются только участки с большой кривизной интегральной кривой, которые по-прежнему трудны для расчета. При этом регулярные участки решения при достаточно больших  $\lambda$  по-прежнему могут совпадать с корнями вырожденного уравнения визуально и даже с точностью компьютерного округления. Поэтому понятия сверхжесткости и ультразжесткости остаются в силе.

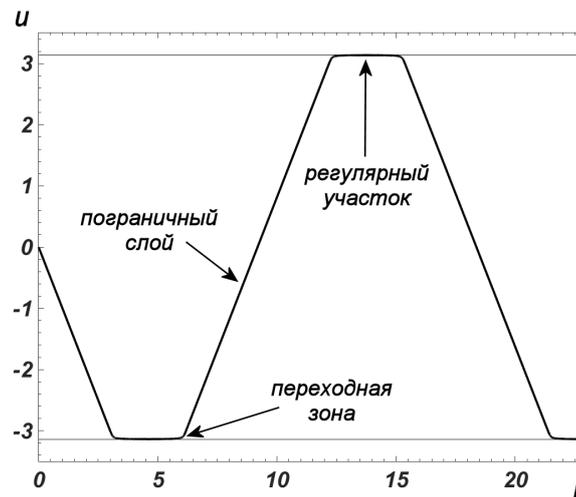


Рис. 2. Тест (1) при  $\lambda_0 = 100$ , аргумент – длина дуги; кривая – решение, тонкие прямые – стационары

Fig. 2. Test problem (1) with  $\lambda_0 = 100$ , arc length is chosen as integration argument; thin straight lines are stationary solutions

Тем не менее, переход к длине дуги существенно облегчает решение даже таких

задач. Поэтому далее будем полагать, что он уже произведен. Напомним, что для этого нужно решать 2 уравнения для функций  $u(l)$  и  $t(l)$ . Если решается система уравнений, то к ней добавляется только уравнение для  $t(l)$ , так что фактическая трудоемкость расчета увеличивается лишь незначительно, а его надежность повышается существенно.

## 5. Методы расчета

Мягкие задачи даже в переменной  $t$  можно решать явными схемами. При переходе к длине дуги то же относится к жестким задачам. В этих случаях целесообразно использовать либо классическую 4-стадийную схему Кутты точности  $O(h^4)$ , либо 7-стадийные схемы Бутчера или Хаммуда точности  $O(h^6)$ .

Однако для жестких задач даже в длине дуги существенно более надежны явно- неявные схемы. Наилучшие результаты дают схемы Розенброка с комплексными коэффициентами. В первую очередь рекомендуем использовать одностадийную комплексную схему CROS [3]. Запишем эту схему для аргумента  $l$  и произвольной системы с вектор-функциями  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{f}$ , где в качестве нулевой компоненты добавлены  $u_0 \equiv t$ ,  $f_0 \equiv 1$ . Обозначая через  $\hat{\mathbf{u}}$  решение на новом шаге, получим

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + h \operatorname{Re} \mathbf{w}, \quad \left( E - \frac{1+i}{2} h \mathbf{f}_{\mathbf{u}} \right) \mathbf{w} = \mathbf{f}(\mathbf{u}). \quad (4)$$

Эта схема имеет порядок точности  $O(h^2)$  и  $L_2$ -устойчивость, обеспечивает хорошее качественное поведение численного решения и относится к очень надежным. Если желательно иметь более высокую точность, то можно использовать двустадийные схемы Ширкова [4] или Альшиных [5]. Они имеют точность  $O(h^4)$  и  $L_4$ -устойчивость, но несколько менее надежны. Если эффекты нелинейности невелики, то комплексные схемы Розенброка успешно работают даже для сверхжестких задач.

В сверхжестких задачах со значительной нелинейностью схемы Розенброка оказываются ненадежными. Следует использовать чисто неявные схемы. Лучшими из них являются так называемые оптимальные обратные схемы Рунге–Кутты BORK [6] – [7]. Такие схемы построены для числа стадий  $s \leq 4$ , имеют точность  $O(h^s)$  и  $L_s$ -устойчивость.

Простейшей из них является обратная схема Эйлера, соответствующая  $s = 1$

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + h \mathbf{f}(\hat{\mathbf{u}}). \quad (5)$$

Оптимальные схемы с  $s > 1$  выражаются через рекурсивные функции и записываются более громоздко. Однако для  $s = 2$  есть одна схема, близкая к оптимальной и записывающаяся наиболее просто:

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \frac{1}{2} h \mathbf{f} \left( \hat{\mathbf{u}} - \frac{1}{2} h \mathbf{f}(\hat{\mathbf{u}}) \right). \quad (6)$$

Эта схема практически не уступает оптимальным и благодаря простоте особенно удобна для прикладных расчетов.

Для ультражестких задач любые сеточные методы оказываются ненадежными. В них следует переходить к приближенным аналитическим методам.

## 6. Выбор шага по кривизне

Расчет жестких задач с равномерным шагом очень неэкономичен. Существуют традиционные автоматы выбора шага по вложенной схеме или по локальному сгущению шага. Они хорошо работают для мягких задач. Однако уже для жестких задач они становятся очень ненадежными. Во-первых, фактическая погрешность может на несколько порядков превышать запрошенную пользователем. Во-вторых, зачастую на регулярных участках возникают неоправданные срывы: шаг уменьшается на несколько порядков и потом медленно восстанавливается. Расчет становится неэкономичным.

В аргументе  $l$  решение состоит из сравнительно длинных почти прямолинейных участков, соединенных между собой короткими участками с очень большой кривизной (см. рис. 2). Почти прямолинейные участки можно численно интегрировать с большим шагом  $h$ . Однако на участках большой кривизны необходим очень малый шаг. Удачным оказался следующий эвристический алгоритм выбора шага [8]:

$$h_n = \frac{h_*}{1 + L^{1/2}(\varkappa, \varkappa)_n^{1/4}}, \quad (7)$$

где  $\varkappa$  – вектор кривизны,  $L$  – полная длина дуги,  $h_*$  – шаг на прямолинейном участке.

В многомерном случае для  $\varkappa$  построены конструктивные выражения при следующих выборах многомерного пространства: 1) фазовое пространство  $\{\mathbf{u}\}$ , 2) пространство  $\{t, \mathbf{u}\}$ , 3) пространство  $\{l, t, \mathbf{u}\}$ . Наиболее важен для практики второй случай. Для него вектор кривизны

$$\varkappa = \frac{\{-(\mathbf{u}_t, \mathbf{u}_{tt}), \mathbf{u}_{tt}[1 + (\mathbf{u}_t, \mathbf{u}_t)] - \mathbf{u}_t(\mathbf{u}_t, \mathbf{u}_{tt})\}}{[1 + (\mathbf{u}_t, \mathbf{u}_t)]^2}. \quad (8)$$

Сюда входит матрица Якоби от правых частей. Ее вычисление трудоемко. Однако для расчетов по неявным схемам ее все равно приходится вычислять для нахождения  $\hat{\mathbf{u}}$ . Поэтому включение автоматического выбора шага не увеличивает трудоемкости расчетов.

Алгоритм (7) столь же экономичен, что и принятые в литературе автоматы выбора шага, но в отличие от них сохраняет надежность даже на сверхжестких задачах.

Для алгоритма (7) разработана процедура сгущения сеток, позволяющая вычислять апостериорную асимптотически точную оценку погрешности аналогично методу Ричардсона. Традиционные автоматы выбора шага не позволяют сделать такую оценку.

Процедура сгущения сеток проводится в два этапа. На первом этапе будем уменьшать  $h_*$  вдвое и строить последовательность сеток, адаптированных к кривизне. Это сгущение повторяется до тех пор, пока четные узлы новой сетки не станут достаточно близкими к узлам предыдущей сетки.

Далее переходим ко второму этапу. На нем узлы предыдущей сетки берутся в качестве четных узлов следующей сетки. Для этих узлов новой сетки внутренний шаг  $h_n$  дробится в отношении

$$\sqrt[4]{h_{n+1}/h_{n-1}}, \quad 1 \leq n \leq N - 1. \quad (9)$$

Формулы для граничных шагов ( $n = 0$  и  $n = N$ ) выводятся из аналогичных соотношений. Можно показать, что сетки второго этапа являются квазиравномерными. Поэтому к каждой паре сеток можно однократно применить метод Рундсона, что дает апостериорную асимптотически точную оценку погрешности [9].

## 7. Сходимость

Покажем, как можно проводить расчеты контрастных структур с получением гарантированной оценки погрешности. Для этого, во-первых, выберем в качестве аргумента длину дуги. Во-вторых, возьмем надежную чисто неявную схему BORK4. Это позволяет единообразно рассчитывать задачи от мягких до сверхжестких. В-третьих, для получения рундсоновской гарантированной оценки погрешности проведем расчет на последовательности сгущающихся сеток. В-четвертых, шаги этих сеток будем выбирать автоматически по кривизне интегральной кривой.

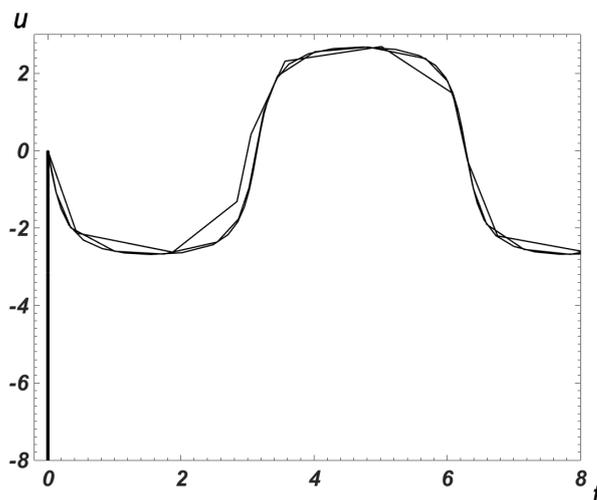


Рис. 3. Тонкие линии – решение теста (1) на сгущающихся сетках,  $\lambda_0 = 10^{-1}$ . Жирная линия – численное решение ультражесткой задачи с  $\lambda_0 = 10^7$

Fig. 3. Thin lines are solutions of test problem (1) on thickening grids for  $\lambda_0 = 10^{-1}$ . Solid line is the numerical solution of ultra-stiff problem with  $\lambda_0 = 10^7$

Проиллюстрируем результаты. На рис. 3 показаны профили решения на сгущающихся сетках для теста (1) с  $\lambda_0 = 10^{-1}$ . Для наглядности профили построены в координатах  $u(t)$ , хотя непосредственно рассчитывались  $u(l)$  и  $t(l)$ . Хорошо видно, что при сгущении сеток профили стремятся к точному решению.

На рис. 3 показан также расчет ультражесткой задачи с  $\lambda_0 = 10^7$ . После прохождения пограничного слоя и переходной зоны кривая выходит на стационарное решение с точностью до ошибок округления. Но уже на ближайших шагах ошибки округления выводят кривую в область неустойчивости, после чего она быстро уходит от точного решения. Видно, что численные методы непригодны для задач столь большой жесткости. В этом случае надо пользоваться асимптотическими разложениями по малому параметру.

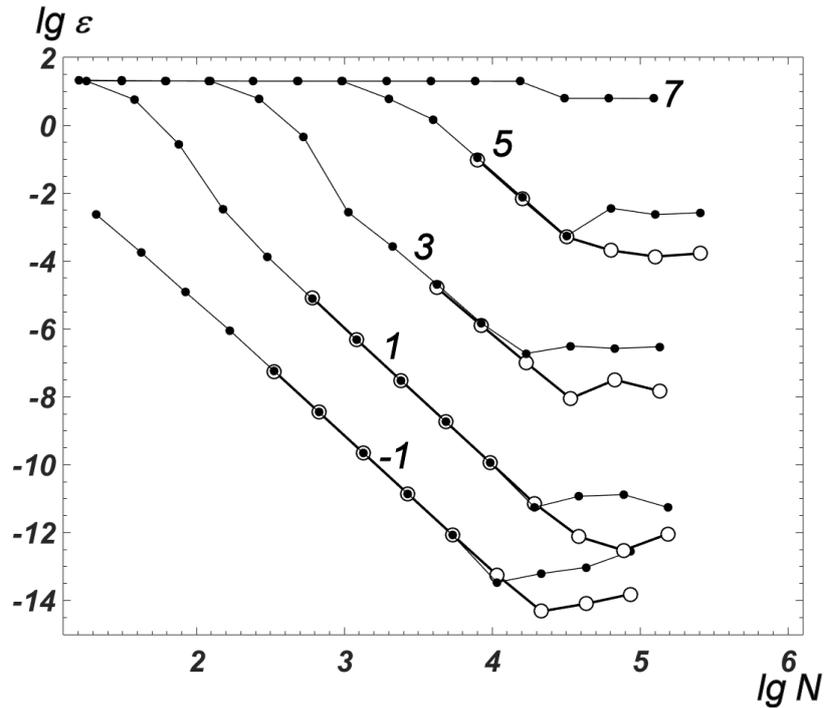


Рис. 4. Сходимость в тесте (1), у линий указаны  $\lg \lambda_0$ .  $\bullet$  – погрешности, вычисленные сравнением с точным решением,  $\circ$  – оценки по методу Ричардсона  
 Fig. 4. Convergence in test problem (1); numbers near curves are  $\lg \lambda_0$ ;  $\bullet$  – errors calculated by comparing the numerical solution with the exact one,  $\circ$  – estimations via Richardson method

Оценку погрешности численного расчета можно получить по методу Ричардсона. На рис. 4 представлены кривые погрешности для различных жесткостей. Видно, что на мягких задачах ( $\lambda_0 < 10$ ) эти кривые уже при небольшом  $N$  выходят на прямую линию с наклоном 4, что соответствует теоретическому порядку точности  $O(h^4)$ . Чем жестче задача, тем позднее происходит выход кривых погрешностей на этот прямолинейный участок.

На рис. 4 представлены два способа расчета погрешности: непосредственное вычисление по известному точному решению (точки) и ричардсоновская оценка по парам соседних сеток (кружки). Видно, что на прямолинейном участке с теоретическим наклоном оба способа дают одинаковый результат. Это относится даже к сверхжестким задачам. Это показывает, что и для задач с неизвестным точным решением можно уверенно пользоваться ричардсоновскими оценками, если кривая погрешности содержит указанный прямолинейный участок. Напомним, что в традиционных алгоритмах автоматического выбора шага по вложенным схемам или по локальному сгущению выдаваемая оценка погрешности не только не является асимптотически точной, но и может на много порядков превышать фактическую погрешность.

На данном рисунке показан также расчет для ультражесткой задачи с  $\lambda_0 = 10^7$ . Видно, что прямолинейный участок погрешности с теоретическим наклоном отсутствует, поэтому для таких задач ричардсоновскую оценку погрешности дать невозможно.

## 8. Диагностика сингулярностей

Задачи с сингулярностями (полос и т.д.) также можно отнести к жестким. Нетривиальной является следующая проблема: определить только на основании численного решения, имеется ли сингулярность точного решения и каков ее вид и параметры. Впервые подход к решению этой проблемы был предложен в [10], [11]. В нем было использовано интегрирование по аргументу  $t$  по схеме CROS. Однако при этом момент сингулярности и ее вид определялись с невысокой точностью. В [12] использовано интегрирование по аргументу  $l$ . Это позволило использовать практически любые численные схемы и построить рунгедоновскую процедуру нахождения параметров (например, момента и порядка полюса) с апостериорной асимптотически точной оценкой погрешности. Конкретные формулы диагностики построены для особенностей типа степенного полюса, логарифмического полюса и произведения степенного полюса на логарифм.

Этот метод применим не только к обыкновенным дифференциальным уравнениям, но и к уравнениям в частных производных, поскольку они сводятся к системам ОДУ посредством метода прямых.

## Список литературы / References

- [1] Hairer E., Wanner G., *Solving ordinary differential equations. Stiff and differential-algebraic problems*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, 1999.
- [2] Васильева А. Б., Бутузов В. Ф., Нефедов Н. Н., “Контрастные структуры в сингулярно возмущенных задачах”, *Фундаментальная и прикладная математика*, **4:3** (1998), 799–851; [Vasileva A. B., Butuzov V. F., Nefedov N. N., “Kontrastnye struktury v singularno vozmushchennykh zadachakh”, *Fundamentalnaia i prikladnaia matematika*, **4:3** (1998), 799–851, (in Russian).]
- [3] Rosenbrock H. H., “Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations”, *Comput. J.*, **5:4** (1963), 329–330.
- [4] Ширков П. Д., “Оптимально затухающие схемы с комплексными коэффициентами для жестких систем ОДУ”, *Матем. моделирование*, **4:8** (1992), 47–57; [Shirkov P. D., “Optimalno zatukhaiushchie skhemy s kompleksnymi koeffitsientami dlia zhestkikh ODU”, *Matem. Modelirovanie*, **4:8** (1992), 47–57, (in Russian).]
- [5] Альшин А. Б., Альшина Е. А., Лимонов А. Г., “Двухстадийные комплексные схемы Розенброка для жестких систем”, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2009, № 2, 270–287; English transl.: Al’shin A. B., Al’shina E. A., Limonov A. G., “Two-stage complex Rosenbrock schemes for stiff systems”, *Comp. Math. and Math. Phys.*, **49:2** (2009), 261–278.
- [6] Калиткин Н. Н., Пошивайло И. П., “Обратные Ls-устойчивые схемы Рунге-Кутты”, *Доклады Академии Наук*, **442:2** (2012), 175–180; English transl.: Kalitkin N. N., Poshivaylo I. P., “Inverse Ls-stable Runge-Kutta schemes”, *Doklady Math.*, **85:1** (2012), 139–143.
- [7] Калиткин Н. Н., Пошивайло И. П., “Вычисления с использованием обратных схем Рунге-Кутты”, *Матем. моделирование*, **25:10** (2013), 79–96; English transl.: Kalitkin N. N., Poshivaylo I. P., “Computations with inverse Runge-Kutta schemes”, *Math. Models and Comp. Simulations*, **6:3** (2014), 272–285.
- [8] Белов А. А., Калиткин Н. Н., Пошивайло И. П., “Геометрически-адаптивные сетки для жестких задач Коши”, *Доклады Академии наук*, **466:3** (2016), 276–281; English transl.: Belov A. A., Kalitkin N. N., Poshivaylo I. P., “Geometrically adaptive grids for stiff Cauchy problems”, *Doklady Math.*, **93:1** (2016), 112–116.

- [9] Калиткин Н. Н., Альшин А. Б., Альшина Е. А., Рогов Б. В., *Вычисления на квазиравномерных сетках*, Физматлит, М., 2005; [Kalitkin N. N., Alshin A. B., Alshina E. A., Rogov B. V., *Vychisleniia na kvaziravnomernykh setkakh*, Fizmatlit, M., 2005, (in Russian).]
- [10] Альшина Е. А., Калиткин Н. Н., Корякин П. В., “Диагностика особенностей точного решения методом сгущения сеток”, *Доклады Академии наук*, **404**:3 (2005), 295–299; English transl.: Alshina E. A., Kalitkin N. N., Koryakin P. V., “Diagnosis of singularities of exact solutions by calculation on embedded grids”, *Doklady Math.*, **72**:2 (2005), 697–701.
- [11] Альшина Е. А., Калиткин Н. Н., Корякин П. В., “Диагностика особенностей точного решения при расчетах с контролем точности”, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, **45**:10 (2005), 1837–1847; English transl.: Alshina E. A., Kalitkin N. N., Koryakin P. V., “Diagnostics of singularities of exact solutions in computations with error control”, *Comp. Math. and Math. Phys.*, **45**:10 (2005), 1769–1779.
- [12] Белов А. А., “Численное обнаружение и исследование сингулярностей решения дифференциальных уравнений”, *Доклады Академии наук*, **468**:1 (2016), 21–25; English transl.: Belov A. A., “Numerical Detection and Study of Singularities in Solutions of Differential Equations”, *Doklady Mathematics*, **93**:3 (2016), 334–338.

---

**Belov A. A., Kalitkin N. N.**, "Numerical Methods of Solving Cauchy Problems with Contrast Structures", *Modeling and Analysis of Information Systems*, **23**:5 (2016), 529–538.

**DOI:** 10.18255/1818-1015-2016-5-529-538

**Abstract.** Modern numerical methods allowing to solve contrast structure problems in the most efficient way are described. These methods include explicit-implicit Rosenbrock schemes with complex coefficients and fully implicit backward optimal Runge–Kutta schemes. As an integration argument, it is recommended to choose the length of the integral curve arc. This argument provides high reliability of the calculation and sufficiently decreases the complexity of computations for low-order systems. In order to increase the efficiency, we propose an automatic step selection algorithm based on curvature of the integral curve. This algorithm is as efficient as standard algorithms and has sufficiently larger reliability. We show that along with such an automatic step selection it is possible to calculate a posteriori asymptotically precise error estimation. Standard algorithms do not provide such estimations and their actual error quite often exceeds the user-defined tolerance by several orders. The applicability limitations of numerical methods are investigated. In solving superstiff problems, they sometimes do not provide satisfactory results. In such cases, it is recommended to imply approximate analytical methods. Consequently, numerical and analytical methods are complementary.

**Keywords:** stiff Cauchy problem, contrast structure, automatic step selection, curvature in multidimensional space, Richardson method estimations, singularity diagnostics, solution blow-up

**On the authors:**

Alexander A. Belov, [orcid.org/0000-0002-0918-9263](https://orcid.org/0000-0002-0918-9263), graduate student,  
Lomonosov Moscow State University,  
1–2 Leninskie Gory, Moscow 119991, Russia, e-mail: [belov\\_25.04.1991@mail.ru](mailto:belov_25.04.1991@mail.ru)

Nikolay N. Kalitkin, [orcid.org/0000-0002-0861-1792](https://orcid.org/0000-0002-0861-1792), corresponding member RAS, Dr. Sci. (Phys.–Math.), professor.  
Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS,  
4 Miusskaya sq., Moscow 125047, Russia, e-mail: [kalitkin@imamod.ru](mailto:kalitkin@imamod.ru)

**Acknowledgments:**

This work was supported by RFBR grants, Projects №14-01-00161, 16-31-00062.