

О. А. ДМИТРИЄВА^{1,2}, д-р техн. наук, проф., ¹НТУУ "ХПІ"
ім. І. Сікорського, Київ, Україна, ²Інститут моделювання водно-
екологічних систем університету Штутгарта, Німеччина

ПОБУДОВА БЛОКОВИХ ІНТЕГРАТОРІВ ДЛЯ ЖОРСТКИХ ДИНАМІЧНИХ ЗАВДАНЬ ІЗ УЗГОДЖЕННЯМ ПОРЯДКІВ АПРОКСИМАЦІЇ ПРИ АДАПТАЦІЇ КРОКУ

У статті подано новий підхід побудови інтеграторів, що ґрунтуються на використанні багатокрокових блокових методів і орієнтовані на розв'язання жорстких динамічних завдань. Основну увагу приділено схемам адаптації кроку інтегрування, де відновлення нових значень в опорних блоках здійснюється за допомогою Ермітової інтерполяції. Застосування інтерполантів з кратними вузлами забезпечує збереження порядків апроксимації відновлених значень, які відповідають порядкам основної розрахункової схеми. Для контролю кроку запропоновано кілька алгоритмів, заснованих на оцінці локальних похибок в точках розрахункового блоку, що збігаються. Порівняння значень у співпадаючих точках дозволяє точно регулювати крок інтегрування, мінімізуючи помилку при збереженні необхідної точності. Розглянуто основні теоретичні аспекти, включаючи узгодження порядків апроксимації при адаптації кроку, а також обчислювальні переваги застосування методу для жорстких завдань. Наведено результати чисельних експериментів, що демонструють ефективність запропонованих алгоритмів у порівнянні з традиційними методами, а також можливість їх застосування для розв'язання жорстких завдань з високим ступенем точності. Іл.: 18. Табл.: 2. Бібліогр.: 27 назв.

Ключові слова: блоковий інтегратор, жорстка задача, порядок апроксимації, адаптація кроку, Ермітова інтерполяція.

Вступ. Одним з найважливіших математичних інструментів, що використовується під час дослідження еволюційних моделей у прикладних науках (біології, хімії, фізиці та інш.) є звичайні диференціальні рівняння (ЗДР) та їх системи [1 – 2]. Свідченням цього факту є безліч ефективних чисельних методів, створених останнім часом для симуляції процесів, які описуються такими рівняннями. При цьому переважна більшість моделей, орієнтованих на відновлення траєкторій поведінки динамічних об'єктів, є жорсткими [1, 3 – 6], і для симуляцій необхідно застосовувати чисельні

методи, які мають можливість адаптації кроку інтегрування. Жорсткі системи зустрічаються в математичних моделях інженерних систем управління, електронних схем, механіки, лазерів, оптичного зв'язку, молекулярної динаміки, в описах атмосферних явищ, хімічних реакцій, які відбуваються у живих організмах [7 – 8]. На теперешній час математичні моделі, що ґрунтуються на системах ЗДР, описують поширення таких захворювань, як грип, кір та COVID-19 в епідеміології, динаміку Т-клітин під час ВІЛ-інфекції у медицині [9], і тут детальні моделі допомагають ідентифікувати способи втручання, оцінювати ефективність препаратів для профілактики захворювань.

Наявність жорсткості також є основною перешкодою для широкого застосування нейронних звичайних диференціальних рівнянь (НЗДР). Сучасні НЗДР, які є моделями машинного навчання [9 – 12], що використовують нейронні мережі для апроксимації рішень диференціальних рівнянь з даних, стикаються з труднощами при роботі з жорсткими системами через проблеми з нестійкістю розрахунків [9]. Крім того, нейронні ЗДР часто стають жорсткими під час навчання, навіть якщо дані навчання надходять із нежорсткої моделі [8 – 9]. Це додаткове ускладнення може значно уповільнити або, навіть, зупинити процес навчання, вимагаючи, щоб усі чисельні методи для розв'язання ЗДР були стійкими до жорсткості, незалежно від того, чи є жорсткою базова модель.

Аналіз стану питання. У багатьох практичних додатках труднощі, пов'язані з жорсткими ЗДР, полягають у виборі ефективної схеми інтегрування [13 – 15]. На жаль, для чисельних симуляцій поведінки жорстких систем практично не можуть бути задіяні явні схеми, які зазвичай накладають неприйнятні обмеження на крок інтегрування, що пояснюється вимогами стійкості. Неявні схеми, що забезпечують чисельну стійкість, дуже витратні, оскільки вимагають оцінки якобіана. Останнім часом у літературі були запропоновані підходи, що присвячено розробці блокових методів розв'язання [1, 3, 7, 16 – 17]. Блокові методи, як правило, мають високі порядки апроксимації і характеризуються загальним скороченням кількості оцінок функцій. В багатьох роботах [1, 16 – 18] представлені різні типи блокових методів, що відрізняються принципами побудови, розмірностями розрахункових блоків, наявністю опорних блоків, розширеними областями стійкості, порядком апроксимації,

залученням точок колокацій, можливостями варіацій розміру кроку. Усі методи, згадані вище, можуть надавати розв'язання у кількох точках блоку одночасно. Серед відомих сьогодні одно- і багатокрокових блокових методів останні мають вищий порядок апроксимації, який залежить від кількості розрахункових і опорних точок кожного блоку, тоді як порядок однокрокових методів визначається лише кількістю розрахункових (нових) точок, ігноруючи при цьому інформацію про вже пораховані точки. Для такої позиції є об'єктивне пояснення, що за необхідності зміни розміру кроку інтегрування виникає проблема, пов'язана з відсутністю опорних точок, здатних підтримати розрахунки багатокроковим блоковим методом з новим кроком інтегрування.

Тому мета цієї роботи полягає у побудові нових алгоритмів управління кроком інтегрування у класі багатокрокових блокових методів за допомогою відновлення нових точок опорного блоку з порядком апроксимації, що не суперечить порядку основного розрахункового методу. Покращення досягається за рахунок використання інтерполяційних багаточленів з кратними вузлами, які дозволяють відновлювати значення в нових точках опорного блоку, необхідних для продовження розрахунків з високим порядком точності.

Основні завдання роботи спрямовані на розробку алгоритмів відновлення значень в опорних блоках для багатокрокових блокових методів з метою ефективного управління кроком інтегрування для жорстких завдань. Для формування точок опорного блоку передбачається розробка різницевих схем, які побудовані на інтерполяційних багаточленах з кратними вузлами і порядок апроксимації яких відповідає порядкам основних розрахункових схем. Для генерування коефіцієнтів основних розрахункових різницевих схем, різницевих схем відновлення значень у опорних блоках, проведення аналізу стійкості, оцінювання порядків апроксимації необхідно розробити програмний застосунок. На підставі розроблених алгоритмів управління кроком інтегрування необхідно провести чисельні реалізації для жорстких задач з варіативними параметрами жорсткості.

Аналіз основних досягнень і літератури. За минулі роки дослідження показали, що при інтегруванні рівнянь і систем диференціальних рівнянь у формі Коші (1) методи з фіксованим

(постійним) розміром кроку можуть бути досить ефективними [8]. Однак не залишає сумніву той факт, що в деяких жорстких випадках диференціальних систем для досягнення ефективності та точності потрібні методи з нефіксованим (змінним) розміром кроку. Тому ефективність чисельного розв'язання жорстких систем ЗДР насамперед визначається наявністю алгоритмів адаптивного вибору розміру кроку [8, 19 – 22].

$$x'(t) = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0, \quad t \in [t_0, T]. \quad (1)$$

Практично всі відомі нині чисельні методи з автоматичним вибором кроку інтегрування засновані на обчисленні головного члена локальної помилки та подальшому виборі такого розміру наступного кроку, який є максимальним для заданої межі локальної помилки [4, 19, 23]. Для обчислення головного члена локальної помилки, зазвичай, залучаються або методи, засновані на прорахунках з половинним кроком (правило Рунге), або методи з порядками точності, які різняться на одиницю (вкладені методи). Недоліком таких підходів є необхідність повторних (правило Рунге) або додаткових (вкладеність) обчислень розв'язань в кожній точці, що призводить до значного збільшення обчислювальних витрат. З іншого боку, жорстко регламентуються пропорції скорочення кроку.

У деяких випадках процедури керування кроком інтегрування намагаються будувати на основі екстраполяційних методів [24 – 25]. Виходячи з апроксимації чисельного розв'язання в точці t_m , встановлюють кілька різних апроксимацій для точки t_{m+1} , з яких потім екстраполюється чисельне розв'язання з більш високим порядком точності, ніж окремі апроксимації. Але такий підхід призводить до необхідності виконання кількох інтеграцій в інтервалі $[t_m, t_{m+1}]$ з різними величинами кроку.

Дешевшим є багатокроковий спосіб [18]. Цей спосіб оцінки похибки, а, отже, і вибору кроку, не вимагає повторних обчислень розв'язання, але через багатокроковість оцінки, трудомісткість отримання необхідного значення буде у m разів (m – кількість опорних точок багатокрокового методу) вища, ніж в однокрокових методах. Однак при цьому виникає інша проблема, пов'язана з тим, що звичне керування кроком (передбачення у будь-який спосіб розміру чергового кроку) у багатокрокових блокових методах неможливе. Тобто неможливо продовжувати обчислення з новим

розміром кроку τ_m/q при скороченні кроку (рис. 1) або $\tau_m * q$ при збільшенні, оскільки точки опорного блоку вже розраховані, і відстань між ними вже фіксовано.

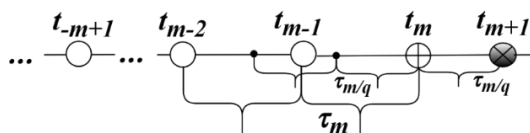


Рис. 1. Порушення вимоги щодо розташування опорних точок при необхідності зміни (скорочення) кроку m -крокового методу

Відомі спроби [8, 26] розробки алгоритмів з нефіксованим розміром кроку, що використовують інтерполяційні поліноми Лагранжа [8], Лежандра [26] для відновлення нових опорних точок за допомогою інтегрування в обраних межах. Такий підхід здатний інтегрувати жорсткі диференціальні системи зі значною економією машинного часу. Однак при побудові інтерполяційного полінома на проміжку, що містить опорні точки, порядок апроксимації основного методу значно скорочується, оскільки для побудови багаточлена використовуються лише пари: аргумент – значення функції

$$\{(t_{-m+1}, f(t_{-m+1})), (t_{-m+2}, f(t_{-m+2})), \dots, (t_m, f(t_m))\}. \quad (2)$$

Намагання підвищити порядок апроксимації інтерполяційного полінома шляхом включення додаткових опорних точок призводять до збільшення амплітуди розбіжностей на межах опорного блоку, що робить такий підхід неприйнятним, так як при скороченні розміру кроку нові точки відновлюються якраз на правій межі опорного блоку, а при збільшенні розміру кроку захоплюються точки, відновлені на лівій межі.

Також можна компенсувати повторні обчислення значень в опорних точках, використовуючи як розрахункові не одну, а множину точок наступного блоку [17 – 18, 26], тобто, залучаючи для проведення розрахунків багатокрокові блокові методи (2).

Відомі підходи управління кроком для блокових методів, побудовані на схемах розтягування-стиснення, дають можливість збільшувати (зменшувати) крок вдвічі, що іноді є неприйнятним, особливо коли йдеться про збільшення кроку. Як правило, найбільш успішним інтервалом для

варіації коефіцієнта розтягування кроку $q \in$ інтервал $1.4 \leq q \leq 1.9$. Тобто, для успішного використання багатокрокових блокових методів необхідно запропонувати процедуру, яка може змінювати розмір кроку у розподілі опорних точок у межах певного інтервалу інтегрування.

Огляд сучасних підходів до проблем адаптації кроку інтегрування був би неповним, якщо не зазначити, що стрімке поширення методів машинного навчання знайшло своє відображення й у завданнях прогнозування еволюції об'єктів, поведінка яких описується ЗДР чи їх системами. Вже відомі роботи, в яких представлені спроби об'єднання ідей машинного навчання та чисельного аналізу для ефективного управління кроком інтегрування. Такі дослідження представлені, зокрема, в [9 – 12], де пропонуються методи автоматичного навчання інтеграторів високого порядку для певних сімейств ЗДР на основі алгоритмічної надбудови явних стадійних методів типу Рунге-Кутти. Ґрунтуючись на навчальних вибірках, автори [10] намагаються побудувати алгоритм, що мінімізує суму масштабованої помилки найменших квадратів та регуляризатора. Але, як стверджують автори, ці спроби є базовим кроком до систематичного дослідження підходів на основі навчання до проектування та адаптації чисельних алгоритмів. Основні результати, отримані в роботі, все ж таки спрямовані на мінімізацію глобальних помилок серед окремих інтеграторів щодо деякого фіксованого часового кроку. В роботі [11] основна увага приділяється оцінюванню локальної помилки відсікання в нейронних ЗДР, для визначення якої пропонується нова апроксимація оцінки локальної помилки усічення. Така апроксимація ґрунтується на порівнянні кількох наближень, а не двох, як це здійснюється у класичних підходах, що суттєво підвищує трудомісткість. До того ж дослідження [11] в якості інтеграторів також розглядають явні стадійні методи з адаптацією розміру кроку на основі вкладеного методу Дормана-Прінса 5(4).

У роботі [9] запропоновано підхід, що ґрунтується на однокрокових неявних різницевих схемах Радау різних порядків. За свідченням авторів зосередження роботи на однокрокових методах відбувалося через їхню простоту та легкість реалізації, але більш просунуті багатокрокові методи можуть пропонувати обчислювальні переваги. В той же час існує певна складність застосування багатокрокових підходів, оскільки їх використання вимагає високоточної інформації з кількох попередніх

моментів часу, що ускладнює їх використання в навчанні нейронних ЗДР. Саме цей факт і сприяв дослідженням, що ґрунтуються на багатокрокових методах і доводять потенційні переваги останніх при наявності жорсткості.

Розрахункові схеми блочних багатокрокових методів із контролем точності.

У роботі для розв'язання задачі Коші (1) чисельні симуляції проводяться багатокроковими блоковими методами (3). Можливість отримати нові значення відразу в кількох нових точках розрахункового блоку нівелює проблеми, пов'язані з участю у обчисленнях множини опорних значень.

$$U_{n,i}=u_{n,0}+\tau_n\left(\sum_{j=-(m-1)}^0 b_{i,j} F_{n,j} + \sum_{j=1}^s a_{i,j} F_{n,j}\right),$$

$$i = 1, 2, \dots, s, n = 1, 2, \dots, N, \quad (3)$$

де $u_{n,i}$ – наближені значення розв'язання завдання Коші (1) в точках $t_{n,i}$, $i = 0, 1, 2, \dots, s$;

τ_n – крок інтегрування в n -му блоці;

$F_{n,j} = f(t_n + j\tau, u_{n,j})$ – праві частини рівняння (1) у відповідних точках, $j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0, 1, \dots, s$;

$a_{i,j}$ і $b_{i,j}$ – коефіцієнти розрахункових схем, $i = 1, 2, \dots, s, j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0, 1, \dots, s$;

m – кількість опорних точок;

s – розмірність нового блоку (кількість розрахункових точок);

N – кількість розрахункових блоків.

Для отримання надійної оцінки локальної помилки в роботі пропонується використовувати блокові схеми з порядками точності, що відрізняються на одиницю. Розглядаються два основні типи розрахункових схем (рис. 2 – 3). У першому випадку (рис. 2) йдеться про прорахунок блоковими методами (3): основним, із співвідношенням опорних і розрахункових точок $m \times s$ та порядком точності $p = s + m$, і допоміжним, із співвідношенням опорних та розрахункових точок $(m + 1) \times s$ та порядком точності $p = s + m + 1$. Для цього типу схем розмірності розрахункових блоків збігаються і порівняння нових значень проводиться за всіма точками розрахункового блоку.

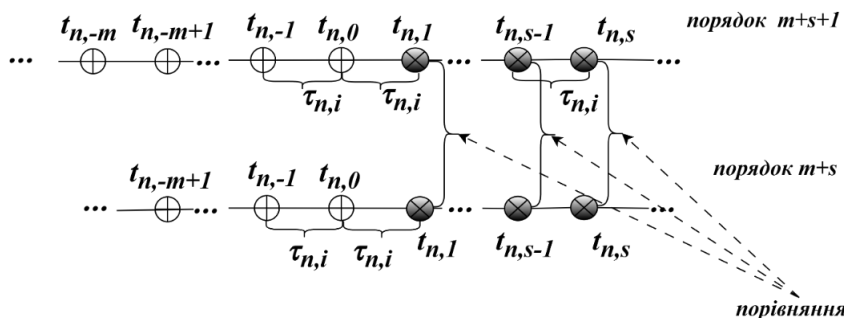


Рис. 2. Шаплони розрахункових схем для блокових методів з розмірностями блоків $(m+1) \times s$ і $m \times s$

Для другого типу розрахункових схем (рис. 3) порядки точності методів та розмірності опорних блоків збігаються, але різняться співвідношення точок у розрахункових блоках: $s+1$ і s . При використанні схем цього типу порівняння нових значень проводиться тільки для точок розрахункового блоку, що збігаються.

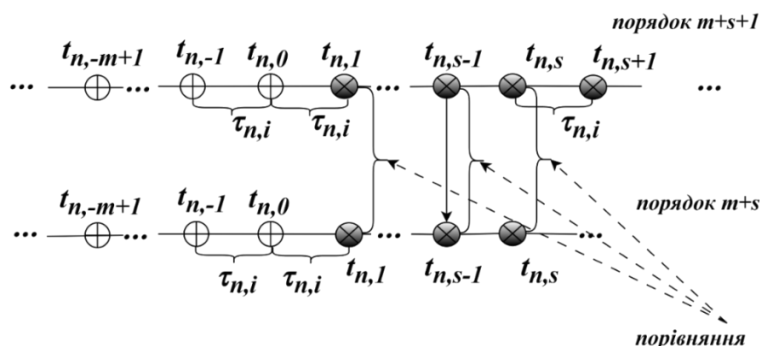


Рис. 3. Шаплони розрахункових схем для блокових методів з розмірностями блоків $m \times (s+1)$ і $m \times s$

Якщо під час проведення чисельних симуляцій крок залишається незмінним чи збільшується, наприклад, удвічі, то жодних особливих проблем розрахункові схеми не викликають і не підлягають радикальній трансформації (рис. 4).

Необхідно лише, щоб на вже пройденому інтервалі “знайшлася” достатня кількість опорних точок для продовження розрахунку. В іншому випадку можна просто виконати розрахунок ще для одного блоку з незмінним τ_n , а потім перейти на схему зі збільшеним кроком. При переході до подвоєного кроку необхідно використовувати m попередніх

значень розв'язків $u_{n,2(m-i-1)}$ і правих частин $f_{n,2(m-i-1)}$, $i = 0, 1, \dots, m-1$, у вузлах, що віддалені один від одного на крок $2\tau_n$.

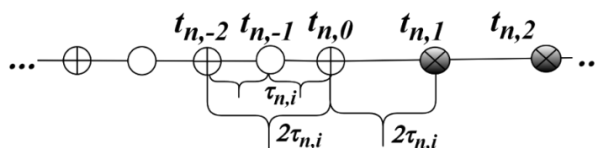


Рис. 4. Перехід на розрахункову схему з подвійним кроком інтегрування для блокових методів

Якщо крок необхідно скорочувати (рис. 5), а також, якщо збільшення кроку здійснюється не з подвоюванням, а з деяким довільним коефіцієнтом q (рис. 6), виникає проблема визначення нових точок в опорному блоці.

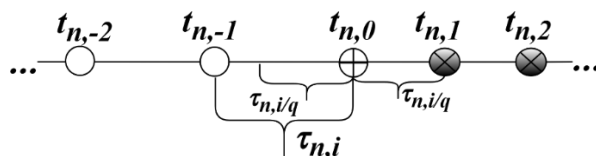


Рис. 5. Перехід на розрахункову схему із довільно зменшеним ($q > 1$) кроком інтегрування для блокових методів

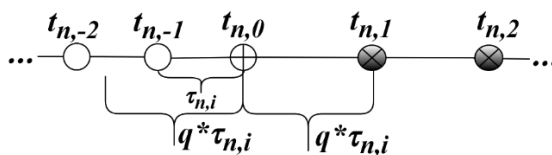


Рис. 6. Перехід на розрахункову схему із довільно збільшеним ($q > 1$) кроком інтегрування для блокових методів

У разі потреби зміни кроку інтегрування при використанні співвідношень (3) має сенс відновлювати значення у точках, які формуватимуть новий опорний блок, виходячи з вимог розташування опорних точок, що регламентуються новим розміром кроку (рис. 5, 6). У

той же час слід звернути увагу на той факт, що для точок, які вже складають опорний блок, відомі не тільки значення правих частин, а й значення похідних правих частин (1): $f'(t_i)$, $i = -m + 1, \dots, m$, і має сенс скористуватися цими значеннями. Тобто можна використовувати інформацію не про пари, як у (2), а про трійки: аргумент – значення функції – значення похідної. У позначках, які були введені для багатокрокових блокових методів, це буде сукупність значень:

$$\left(t_{n,-m+1}, f(t_{n,-m+1}), f'(t_{n,-m+1}) \right), \left(t_{n,-m+2}, f(t_{n,-m+2}), f'(t_{n,-m+2}) \right), \dots, \left(T_{n,0}, f(t_{n,0}), f'(t_{n,0}) \right), \quad (4)$$

інтерполяція яких може бути здійснена багаточленом із кратними вузлами. Для цього в точках інтерполяції необхідно вимагати збігу з інтерполянтом не лише значень функції $f(t, x(t))$, а й її похідних першого порядку. В якості полінома з кратними вузлами в роботі передбачається використання багаточлена Ерміта, який може бути побудований у вигляді рекурентних співвідношень (5), загальною схемою опису, а також отриманий шляхом граничного переходу

$$\begin{aligned} H_0(t) &= 1, \quad H_1(t) = 2t, \\ H_2(t) &= 4t^2 - 2, \quad \dots, \quad H_{n+1}(t) = 2tH_n(t) - 2nH_{n-1}(t). \end{aligned} \quad (5)$$

Побудова багатокрокових блокових вирішувачів зі змінним розміром кроку

Відповідно до розрахункової схеми (рис. 2) згенеруємо два блокових багатокрокових методи: основний, з розмірностями блоків $m \times s$, і додатковий, з розмірностями $(m+1) \times s$, вибравши для визначеності $m = 3$, $s = 4$. Оскільки блокові багатокрокові методи максимального порядку точності, у нашому випадку $O(\tau^{s+m}) = O(\tau^7)$, є умовно стійкими (рис. 7), скоротимо порядок нашого методу на одиницю, приходячи до абсолютно стійкого основного методу (рис. 8) з порядком апроксимації $O(\tau^{s+m-1}) = O(\tau^6)$. Для визначення характеру стійкості різницевої схеми, формування систем різницевих рівнянь та оцінювання порядків апроксимації було розроблено спеціальні програмні застосунки. Систему

різницевих рівнянь для обчислення значень у кожній точці нового блоку основним методом $m \times s$ згенеруємо у вигляді:

$$\begin{aligned} u_{n,1} &= u_{n,0} + \tau_n \frac{-637u_{n,-2} + 3417u_{n,-1} + 28070u_{n,1} - 13425u_{n,2} + 4977u_{n,3} - 802u_{n,4}}{21600}; \\ u_{n,2} &= u_{n,0} + \tau_n \frac{-34u_{n,-2} + 189u_{n,-1} + 2390u_{n,1} + 189u_{n,2} - 34u_{n,4}}{2700}; \\ u_{n,3} &= u_{n,0} + \tau_n \frac{-23u_{n,-2} + 123u_{n,-1} + 1330u_{n,1} + 525u_{n,2} + 483u_{n,3} - 38u_{n,4}}{2400}; \\ u_{n,4} &= u_{n,0} + \tau_n \frac{-7u_{n,-2} + 42u_{n,-1} + 620u_{n,1} + 75u_{n,2} + 522u_{n,3} + 98u_{n,4}}{1350}. \end{aligned} \quad (6)$$

Порядок апроксимації основного методу у кожній точці нового блоку відповідає обраному значенню $O(\tau^6)$:

$$r_{n,1} = -\frac{10273x^{(7)}[t_n]\tau^6}{302400} + O(\tau^7);$$

$$r_{n,2} = -\frac{167x^{(7)}[t_n]\tau^6}{12600} + O(\tau^7);$$

$$r_{n,3} = -\frac{129x^{(7)}[t_n]\tau^6}{11200} + O(\tau^7);$$

$$r_{n,4} = -\frac{29x^{(7)}[t_n]\tau^6}{9450} + O(\tau^7).$$

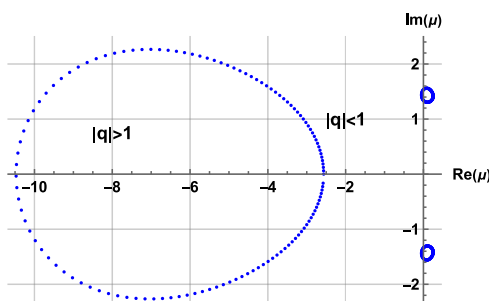


Рис. 7. Годограф стійкості багатокрокового методу, $s = 4$, $m = 3$ з порядком апроксимації $O(\tau^{s+m}) = O(\tau^7)$

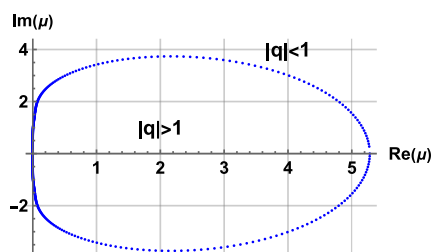


Рис. 8. Годограф стійкості багатокрокового методу, $s = 4$, $m = 3$ з порядком апроксимації $O(\tau^{s+m-1}) = O(\tau^6)$

Для допоміжного методу $(m+1) \times s$ також скоротимо на одиницю порядок точності, щоб перейти від умовно стійкого методу (рис. 9) до А-а стійкого (рис. 10) з величиною кута $\alpha > 80^\circ$:

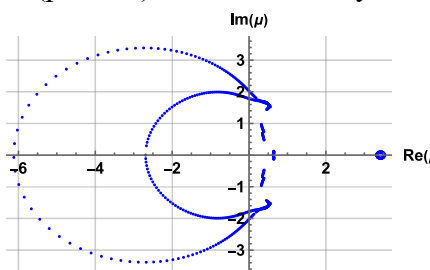


Рис. 9. Годограф стійкості багатокрокового методу, $s = 4$, $m = 4$ з порядком апроксимації $O(\tau^{s+m}) = O(\tau^8)$

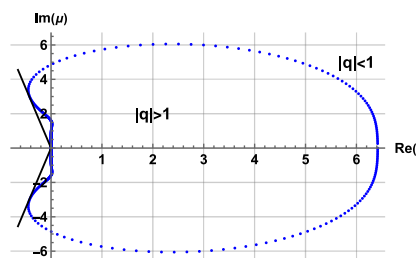


Рис. 10. Годограф стійкості багатокрокового методу, $s = 4$, $m = 3$ з порядком апроксимації $O(\tau^{s+m-1}) = O(\tau^7)$

Систему різницьових рівнянь для обчислення значень у кожній точці нового блоку допоміжним методом $(m+1) \times s$ згенеруємо у вигляді:

$$\begin{aligned}
 u_{n,1} &= u_{n,0} + \tau_n \left(\frac{10273u_{n,-3}}{705600} - \frac{3683u_{n,-2}}{37800} + \frac{26219u_{n,-1}}{100800} + \frac{68323u_{n,1}}{60480} - \right. \\
 &\quad \left. \frac{5263u_{n,2}}{12600} + \frac{12953u_{n,3}}{100800} - \frac{586u_{n,4}}{33075} \right); \\
 u_{n,2} &= u_{n,0} + \tau_n \left(\frac{167u_{n,-3}}{29400} - \frac{739u_{n,-2}}{18900} + \frac{461u_{n,-1}}{4200} + \frac{6191u_{n,1}}{7560} + \frac{167u_{n,2}}{2100} + \frac{127u_{n,3}}{4200} - \frac{166u_{n,4}}{33075} \right); \\
 u_{n,3} &= u_{n,0} + \\
 &\quad + \tau_n \left(\frac{387u_{n,-3}}{78400} - \frac{137u_{n,-2}}{4200} + \frac{961u_{n,-1}}{11200} + \frac{3337u_{n,1}}{6720} + \frac{403u_{n,2}}{1400} + \frac{1867u_{n,3}}{11200} - \frac{34u_{n,4}}{3675} \right); \\
 u_{n,4} &= u_{n,0} + \\
 &\quad + \tau_n \left(\frac{29u_{n,-3}}{22050} - \frac{107u_{n,-2}}{9450} + \frac{127u_{n,-1}}{3150} + \frac{839u_{n,1}}{1890} + \frac{233u_{n,2}}{3150} + \frac{1189u_{n,3}}{3150} + \frac{2459u_{n,4}}{33075} \right). \quad (7)
 \end{aligned}$$

Порядок апроксимації допоміжного методу у кожній точці нового блоку відповідає обраному значенню $O(\tau^7)$:

$$\begin{aligned}
 r_{n,1} &= -\frac{68323x^{(8)}[t_n]\tau^7}{4233600} + O(\tau^8); \\
 r_{n,2} &= -\frac{167x^{(8)}[t_n]\tau^7}{29400} + O(\tau^8);
 \end{aligned}$$

$$r_{n,3} = -\frac{2777x^{(8)}[t_n]\tau^7}{470400} + O(\tau^8);$$

$$r_{n,4} = \frac{53x^{(8)}[t_n]\tau^7}{66150} + O(\tau^8).$$

Відновлення нових точок в опорному блоці, здійснюване за допомогою інтерполяційного багаточлена Ерміта за основною розрахунковою схемою на множині розрахункових точок $m = 3$, забезпечує порядок апроксимації $O(\tau^6)$. Побудуємо, наприклад, багаточлен Ерміта для множини кратних вузлів опорного блоку основної розрахункової схеми (6)

$$\left(t_{n,-2}, f(t_{n,-2}), f'(t_{n,-2})\right), \left(t_{n,-1}, f(t_{n,-1}), f'(t_{n,-1})\right), \left(t_{n,0}, f(t_{n,0}), f'(t_{n,0})\right)$$

і спробуємо відновити значення в нових точках опорного блоку, якщо передбачається скорочення кроку, наприклад, для $q = 3$. Таке значення коефіцієнта скорочення вибрано винятково для того, щоб показати, що необхідно відновлювати нові значення у всіх опорних точках блоку за винятком $t_{n,0}$, а також для скорочення обсягу співвідношень, що виводяться. Відновлення значень у нових точках опорного блоку буде здійснюватися за допомогою наступних співвідношень, отриманих за допомогою інтерполяційних багаточленів Ерміта

$$u_{n,\frac{1}{3}} = \frac{1}{243} \left(18F_{-2+n} + 5(15F_{-1+n} + 30F_n + \tau F'_{-2+n} + 10\tau F'_{-1+n} - 5\tau F'_n) \right),$$

$$u_{n,\frac{2}{3}} = \frac{1}{243} \left(15F_{-2+n} + 4(48F_{-1+n} + 9F_n + \tau F'_{-2+n} + 16\tau F'_{-1+n} - 2\tau F'_n) \right).$$
(8)

Розбіжності між новообраними інтерполяційними значеннями в нових опорних точках і очікуваними не змінюють головного члена локальної похибки і дорівнюють, відповідно

$$x_{n,\frac{1}{3}} - u_{n,\frac{1}{3}} = \frac{5x^{(7)}[t_n]\tau^6}{26244} + O(\tau^7);$$

$$x_{n,\frac{2}{3}} - u_{n,\frac{2}{3}} = \frac{4x^{(7)}[t_n]\tau^6}{32805} + O(\tau^7).$$

Тобто, відновлення по наявних опорних точках нових опорних значень за допомогою інтерполяційного багаточлена, побудованого на сітці (4), забезпечує порядок апроксимації основної розрахункової схеми, на відміну від класичних багаточленів, які враховують тільки значення правих частин (1) у відповідності до сітки (2), і на тих же точках мають порядок апроксимації $O(\tau^3)$:

$$x_{n, \frac{1}{3}} - u_{n, \frac{1}{3}} = -\frac{5}{81} x^{(4)}[t_n] \tau^3 + O(\tau^4).$$

$$x_{n, \frac{2}{3}} - u_{n, \frac{2}{3}} = -\frac{4}{81} x^{(4)}[t_n] \tau^3 + O(\tau^4).$$

Таким чином, використання кратних вузлів для багаточлена Ерміта дозволяє продовжувати розрахунки із заданим порядком.

Тестування чисельних реалізацій

На основі згенерованих блокових багатокрокових методів (6) і (7), основного, з розмірностями блоків 3×4 , та додаткового, з розмірностями 4×4 , побудуємо алгоритми, що забезпечують адаптацію кроку інтегрування при реалізації жорстких завдань. Як індикатори успішності чисельних симуляцій оцінюватимуться такі показники, як норма глобальної помилки

$$MaxErr = \max_{1 \leq i \leq N} \|x(t_i) - u_i\|, \quad (9)$$

середньоквадратична помилка

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x(t_i) - u_i)^2}, \quad (10)$$

коефіцієнт прецизійності

$$precision = -\log_{10} \left(\max_{1 \leq i \leq N} \|x(t_i) - u_i\| \right). \quad (11)$$

Для розв'язання (1) використовувалися підходи як із фіксованим, так і зі змінним розміром кроку. Декілька чисельних експериментів обрані у формі жорстких диференціальних моделей [1, 15, 27] та згодом реалізовані

за допомогою запропонованих підходів. Перша модель [15, 27] описує процеси сингулярного збурення, які виникають у різних прикладних областях, таких як гідродинаміка, оптимальне керування, теорія хімічних реакторів тощо. Через наявність малого параметра класичні чисельні методи не дають задовільних чисельних результатів [15], тому доводиться використовувати спеціальні процедури, що дозволяють варіювати крок інтегрування.

Тестове завдання 1. Розглянемо наступну нелінійну жорстку модель для відновлення траєкторії кінетичної поведінки біосорбції [1, 27]. Жорсткість моделі обумовлена наявністю крутого градієнта розв'язання на початковому шарі.

$$\delta x'(t) = x(t) - x^3(t), \quad x(t_0) = \delta, \quad t \in [0, 0.5]. \quad (12)$$

Точний розв'язок (12) відомий і має вигляд

$$x(t) = \frac{\text{Exp}(t/\delta)}{\sqrt{99 + \text{Exp}(2t/\delta)}}, \quad \delta = 10^{-2}.$$

В якості результатів проведених обчислювальних експериментів з (12) отримано чисельні розв'язання (рис. 11) з варіативними допусками Eps на величини глобальних похибок (рис. 12 – 14), а також отримані оцінки норми глобальної помилки, середньоквадратичної помилки, коефіцієнту прецизійності (табл. 1).

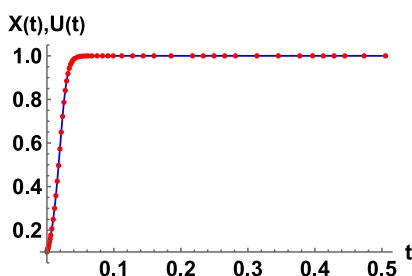


Рис. 11. Точний та числовий (багато-крокові блокові схеми 6-7) розв'язки (12)

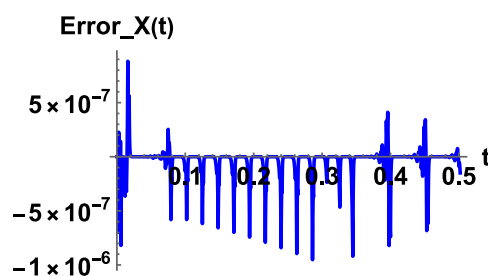


Рис. 12. Похибки числової реалізації (12) з фіксованим значенням $Eps = 1. \times 10^{-6}$

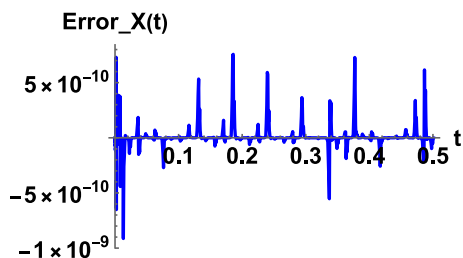


Рис. 13. Похибки числової реалізації
(12) з фіксованим значенням
 $Eps = 1. \times 10^{-9}$

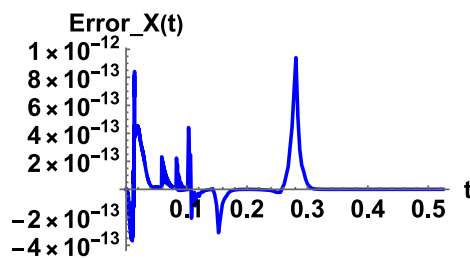


Рис. 14. Похибки числової реалізації
(12) з фіксованим значенням
 $Eps = 1. \times 10^{-12}$

Таблиця 1.

Числові результати для завдання (12), отримані багатокроковими методами (6 – 7) з варіацією кроку за схемою (рис. 2) з допусками Eps

	Eps	$MaxErr$	$Precision$	$RMSE$	$steps$
1	$1. \times 10^{-6}$	$9.7036. \times 10^{-7}$	6.01307	9.87158×10^{-8}	51
2	$1. \times 10^{-7}$	$9.17132. \times 10^{-8}$	7.03757	9.70628×10^{-9}	54
3	$1. \times 10^{-8}$	$8.44034. \times 10^{-9}$	8.07364	1.07929×10^{-9}	63
4	$1. \times 10^{-9}$	$8.62972. \times 10^{-10}$	9.064	1.06908×10^{-10}	69
5	$1. \times 10^{-10}$	$8.96376. \times 10^{-11}$	10.0475	2.00001×10^{-11}	98
6	$1. \times 10^{-11}$	$4.49019. \times 10^{-12}$	11.3477	7.8892×10^{-13}	106
7	$1. \times 10^{-12}$	$9.4047. \times 10^{-13}$	12.0267	2.16617×10^{-13}	163
8	$1. \times 10^{-13}$	8.1268×10^{-14}	13.0901	1.55803×10^{-14}	230
9	$1. \times 10^{-14}$	8.7708×10^{-15}	14.0569	2.32201×10^{-15}	323
10	$1. \times 10^{-15}$	8.9811×10^{-16}	15.3612	4.2170×10^{-16}	377

Для порівняння результатів тестових реалізацій використовувалися дані, наведені у [1]. Там для тестування використовувалися блокові методи 7-го та 8-го порядків, гібридний блоковий метод 7-го порядку на основі похідної 3-ого порядку, повністю неявний метод 6-го порядку типу Лобатто, а також повністю неявний метод 5-го порядку типу Рунге-Кутти.

На порівняних результатах (наприклад, за кількістю кроків) серед запропонованих у [1] блоковий метод з управлінням кроком для точності $Eps = 1 \times 10^{-10}$ використовує 177 кроків (проти 98 у табл. 1). Кращі показники [1] на виконаних результативних кроках (наприклад, на 100 кроках) дають наступні величини:

$$MaxErr = 3.5781 \times 10^{-8}, RMSE = 3.9675 \times 10^{-9}, Precision = 7.44.$$

Порівняння із найближчим показником числа кроків у табл. 1 (ті ж 98 кроків) дозволяє стверджувати, що результати проведених чисельних експериментів на запропонованих алгоритмах управління кроком з використанням для інтерполяції багаточлена Ерміта мають оцінки

$$MaxErr = 8.96376 \times 10^{-11}, RMSE = 2 \times 10^{-11}, Precision = 10.0475.$$

Найкращі показники в [1] на виконаних результативних кроках (1000 кроків) забезпечують значення:

$$MaxErr = 3.4633 \times 10^{-15}, RMSE = 3.7132 \times 10^{-16}, Precision = 14.46.$$

Приблизно такі ж показники (табл. 1) запропоновані методи забезпечують лише на 377 кроках. Отже, у порівнянні з чисельними результатами [1], отриманими для того ж завдання (12), запропоновані в даній статті алгоритми керування кроком мають значну перевагу.

Завдання 2. В [15] розглянуто наступне нелінійне рівняння, яке використовується для опису часової еволюції адсорбції в нерівноважних умовах

$$\delta x'(t) = (1 - x(t))^2, \quad x(t_0) = 0.1, \quad t \in [0, 1]. \quad (13)$$

з точним розв'язком

$$x(t) = \frac{9t + \delta}{9t + 10\delta}, \quad \delta = 10^{-2}.$$

В якості результатів проведених обчислювальних експериментів з (13) отримано чисельні розв'язання (рис. 11) з варіативними допущами Eps на величини глобальних похибок (рис. 12 – 14), а також отримані

оцінки норми глобальної помилки, середньоквадратичної помилки, коефіцієнту прецизійності (табл. 2).

Таблиця 2.

Числові результати для завдання (13), отримані багатокроковими методами (6 – 7) з варіацією кроку за схемою (рис. 2) з допущами Eps

	Eps	$MaxErr$	$Precision$	$RMSE$	$steps$
1	1×10^{-6}	5.37874×10^{-9}	8.26932	1.23281×10^{-9}	45
2	1×10^{-7}	5.37874×10^{-10}	8.26932	1.10395×10^{-9}	46
3	1×10^{-8}	6.02492×10^{-10}	9.22005	1.52092×10^{-10}	55
4	1×10^{-9}	7.03118×10^{-11}	10.153	1.97107×10^{-11}	75
5	1×10^{-10}	1.96062×10^{-11}	10.7076	4.71855×10^{-12}	127
6	1×10^{-11}	7.24532×10^{-13}	12.1399	2.7028×10^{-13}	165
7	1×10^{-12}	6.67771×10^{-13}	12.1754	1.57069×10^{-13}	358
8	1×10^{-13}	1.15463×10^{-14}	13.9376	4.53581×10^{-13}	369
9	1×10^{-14}	9.60343×10^{-15}	14.0176	2.30205×10^{-15}	598
10	1×10^{-15}	9.99201×10^{-16}	15.0003	4.01089×10^{-16}	708

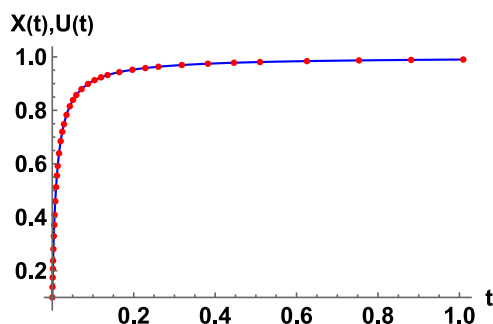


Рис. 15. Точний та числовий (багатокрокові схеми 6-7) розв'язки (13)

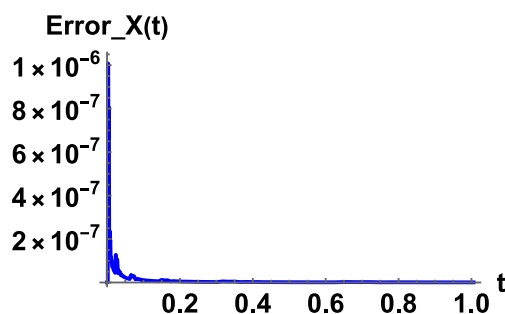


Рис. 16. Похибки числової реалізації (13) з фіксованим значенням $Eps = 1 \times 10^{-6}$

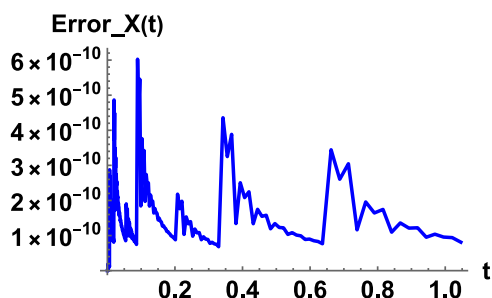


Рис. 17. Похибки числової реалізації (13), $Eps = 1 \times 10^{-9}$

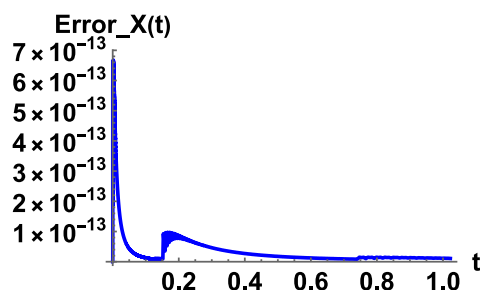


Рис. 18. Похибки числової реалізації (13), $Eps = 1 \times 10^{-12}$

Для порівняння результатів тестових реалізацій використовувалися дані, наведені у [15]. Там тестування здійснювалося нестандартними алгоритмами на однорідних та неоднорідних сітках з роздільною здатністю шарів. В якості рівномірної сітки підбиралася експоненціальна різницева схема, а в якості неоднорідної – зворотна схема Ейлера на кусково-рівномірних сітках Шишкіна [14, 22], що суттєво ускладнювало обчислювальний процес.

Порівняння отриманих в табл. 2 значень з чисельними результатами, наведеними для однорідних сіток в [15], взагалі не викликає інтересу, бо отримані в цій роботі показники для $MaxErr$, як правило, на декілька порядків вище, ніж регламентовані значення Eps в [15]. Так, на максимальній кількості кроків $steps = 256$ мінімальна регламентована величина Eps складає 10^{-6} . В той же час найближча за кількістю кроків ($steps = 165$) оцінка в цій роботі відповідає $Eps = 1 \times 10^{-11}$ і $MaxErr = 7.24532 \times 10^{-13}$, що свідчить про значну перевагу розроблених алгоритмів.

Висновки. Дослідження, проведені в роботі, були спрямовані на побудову, обґрунтування, програмну реалізацію і тестування інтеграторів, які базуються на багатокрокових блокових методах і орієнтовані на розв'язання жорстких диференціальних рівнянь та їх систем у формі Коші. Розглянуто сучасні підходи до адаптації кроку інтегрування під час симуляції динамічних процесів.

Для подолання основної проблеми, пов'язаної з використанням багатокрокових методів при необхідності зміни кроку інтегрування, було запропоновано декілька підходів, що ґрунтуються на відновленні нових точок опорного блоку з порядком апроксимації, що не суперечить порядку основного розрахункового методу. Формування нового опорного блоку здійснювалося із залученням інтерполяційних багаточленів з кратними вузлами, порядок апроксимації яких відповідав порядкам основних різницевої композиції. Для генерування коефіцієнтів основних розрахункових різницевої схем, різницевої схем відновлення значень у опорних блоках, проведення аналізу стійкості, оцінювання порядків апроксимації було розроблено програмні застосунки. На підставі розроблених алгоритмів управління кроком інтегрування було проведено

чисельні реалізації для жорстких задач з варіативними параметрами жорсткості.

В якості індикаторів успішності чисельних симуляцій оцінювалися такі показники, як норма глобальної помилки, середньоквадратична помилка, коефіцієнт прецизійності, кількість результативних кроків. Отримані показники продемонстрували ефективність запропонованих алгоритмів у порівнянні з традиційними методами, а також можливість застосування багатокрокових блокових інтеграторів для розв'язання жорстких завдань.

Наукова новизна полягає у побудові і обґрунтуванні інтеграторів, що базуються на багатокрокових блокових методах з високими порядками апроксимацій і орієнтовані на відновлення траєкторій поведінки динамічних об'єктів, які описуються жорсткими диференціальними рівняннями та їх системами. Для ефективного управління кроком інтегрування і відновлення значень в новому опорному блоці запропоновано використання інтерполяційних багаточленів з кратними вузлами, порядок апроксимації яких відповідає порядкам основних розрахункових схем.

Практична значимість полягає у розробці програмної підсистеми для генерування коефіцієнтів основних розрахункових різницевих схем, різницевих схем відновлення значень у опорних блоках, проведення аналізу стійкості, оцінювання порядків апроксимації, візуалізації отриманих результатів.

Список літератури:

1. Qureshi S. Numerical integration of stiff problems using a new time-efficient hybrid block solver based on collocation and interpolation techniques/ S. Qureshi, H. Ramos, A. Soomro// *Mathematics and Computers in Simulation*. – 2024. – Vol. 220. – P. 237-252. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2024.01.001>.
2. Kansch G. Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations/ G. Kansch, R. Scheichl. – 2021. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://na.uni-tuebingen.de/~lubich/chap6.pdf>.
3. Nasarudin A. On the Integration of Stiff ODEs Using Block Backward Differentiation Formulas of Order Six/ A. Nasarudin, Z. Ibrahim, H. Rosali// *Symmetry*. – 2020. – Vol. 12(6), №952. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3390/sym12060952>.

-
4. *Hairer E.* Solving ordinary differential equations II. Stiff and differential-algebraic problems/ *E. Hairer, G. Wanner*// Springer Series in Computational Mathematics. – 2010. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:117014104>.
 5. *Sundnes J.* Stable Solvers for Stiff ODE Systems/ *J. Sundnes*// Simula SpringerBriefs on Computing. – 2024. – Vol 15. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: https://doi.org/10.1007/978-3-031-46768-4_3.
 6. A Self-Starting Five-Step Eight-Order Block Method for Stiff Ordinary Differential Equations/ [*Raymond D., Donald J., Michael A., Ajileye G.*]// Journal of Advances in Mathematics and Computer Science. – 2018. – Vol. 26(4). – P. 1-9. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.9734/JAMCS/2018/18909>.
 7. *Ibrahim Z.* A Class of Hybrid Multistep Block Methods with A–Stability for the Numerical Solution of Stiff Ordinary Differential Equations/ *Z. Ibrahim, A. Nasarudin*// Mathematics. – 2020. – Vol. 8(6), №914. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3390/math8060914>.
 8. Numerical Integration of Stiff Differential Systems Using Non-Fixed Step-Size Strategy/ [*Sunday J., Shokri A., Kwanamu J., Nonlaopon K.*]// Symmetry. – 2022. – Vol. 14(8), №1575. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3390/sym14081575>.
 9. *Fronk C.* Training stiff neural ordinary differential equations with implicit single-step methods/ *C. Fronk, L. Petzold*// Chaos. – 2024. – Vol. 34(12), №123147. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/5.0243382>.
 10. Personalized Algorithm Generation: A Case Study in Learning ODE Integrators/ [*Guo Y., Dietrich F., Bertalan T., Doncevic D., Dahmen M., Kevrekidis I., Li Q.*]// SIAM Journal on Scientific Computing. – 2022. – Vol. 44, №4. – P. 1911-1933. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1137/21M1418629>.
 11. *Kloberdanz E.* S-Solver: Numerically Stable Adaptive Step Size Solver for Neural ODEs/ *E. Kloberdanz, W. Le*// Artificial Neural Networks and Machine Learning. – 2023. – Vol. 14262. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: https://doi.org/10.1007/978-3-031-44201-8_32.
 12. *Zhang Y.* Unveiling LLM mechanisms through neural ODEs and control theory/ *Y. Zhang, Q. Dong.* – 2024. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2406.16985>.
 13. *Gunasingam S.* Order Seven Block Integrator Method for the Solution of First Order Ordinary Differential Equation/ *S. Gunasingam, A. Azmi*// Aip Conference Proceedings. – 2021. – Vol. 2423(020021). [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/5.0075509>.
 14. *Kumar S.* A high order convergent numerical method for singularly perturbed time dependent problems using mesh equidistribution/ *S. Kumar, S. Sumit, J. Vigo-Aguiar*// Mathematics and Computers in Simulation. – 2022. – Vol. 199. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2022.03.025>.
 15. *Ramos H.* Numerical solution of nonlinear singularly perturbed problems on nonuniform meshes by using a non-standard algorithm/ *H. Ramos, J. Vigo-Aguiar, S. Natesan*// Journal of Mathematical Chemistry. – 2010. – Vol. 48. – P. 38–54. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1007/s10910-009-9625-2>.

-
- 16.** *Duromola M.K.* Single-Step Block Method of P-Stable for Solving Third-Order Differential Equations (IVPs): Ninth Order of Accuracy/ *M.K. Duromola*// *American Journal of Applied Mathematics and Statistics*. – 2022. – Vol. 10, №1. – P. 4-13. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://pubs.sciepub.com/ajams/10/1/2>.
- 17.** Parallel multiple blocked methods of Bickart type. Proceedings of SPI. Photonics Applications in Astronomy, Communications/ [*Bashkov Y., Dmitrieva O., Huskova N., Michalska M., Amirgaliyev Y.*]// *Industry and High-Energy Physics Experiments* – 2019. – Vol. 11176(1). [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1117/12.2536798>.
- 18.** *Дмитрієва О.А.* Методи композиції різницевих апроксимацій моделювання динамічних процесів/ *О.А. Дмитрієва*// *Інформатика та моделювання*. – 2023, № 1(9-10). – С. 5-26. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.20998/2411-0558.2023.01.01>.
- 19.** *Satar N.* The Performance of Fixed Step Size and Adaptive Step Size Numerical Methods for Solving Deterministic Cell-Growth Models/ *N. Satar, N. Ariffin*// *WSEAS Transactions on mathematics*. – 2024. – Vol. 23. – P. 757-764. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.37394/23206.2024.23.79>.
- 20.** Adaptive time step selection for Spectral Deferred Correction/ [*Baumann T., Götschel S., Lunet T., Ruprecht D., Speck R.*]. – 2024. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2403.13454>.
- 21.** *Saleh M.* Adaptive step size controllers based on Runge-Kutta and linear-neighbor methods for solving the non-stationary heat conduction equation/ *M. Saleh, E. Kovacs, N. Kallur*// *Networks and Heterogeneous Media*. – 2023. – Vol. 18(3). – P. 1059-1082. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3934/nhm.2023046>.
- 22.** *McGovern S.* Adaptive Step Selection for a Filtered Implicit Method/ *S. McGovern*// *Journal of Scientific Computing*. – 2025. – Vol. 103. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1007/s10915-025-02861-w>.
- 23.** *Ranjan K.R.* Uniformly convergent NIPG method for singularly perturbed convection diffusion problem on Shishkin type meshes/ *K.R. Ranjan, S. Gowrisankar*// *Applied Numerical Mathematics*. – 2022. – Vol.179. – P. 125-148. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2022.04.015>.
- 24.** *Bayleyegn T.* On the convergence of multiple Richardson extrapolation combined with explicit Runge–Kutta methods/ *T. Bayleyegn, I. Farago, A. Havasi*// *Periodica Mathematica Hungarica*. – 2024. – Vol. 88. – P. 335–353. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1007/s10998-023-00557-y>.
- 25.** Stability of the Richardson Extrapolation combined with some implicit Runge–Kutta methods/ [*Zlatev Z., Dimov I., Farago I., Georgiev K, Havasi A.*]// *Journal of Computational and Applied Mathematics*. – 2017. – Vol. 310. – P. 224-240. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2016.03.018>.
- 26.** *Дмитрієва О.А.* Застосування багаточленів Лежандра для підвищення порядку апроксимації блокових методів/ *О.А. Дмитрієва, В.Г. Гуськова*// *Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка*. – 2024. - №1 (38). - С. 4-11. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31474/1996-1588-2024-1-38-4-11>.

27. Liu Y. A general rate law equation for biosorption/ Y. Liu, L. Shen// Biochemical Engineering Journal. – 2008. – Vol. 38, №3. – P. 390-394. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.bej.2007.08.003>.

References:

1. Qureshi, S., Ramos, H. and Soomro, A. (2024). "Numerical integration of stiff problems using a new time-efficient hybrid block solver based on collocation and interpolation techniques". *Mathematics and Computers in Simulation*. Vol. 220, available at: <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2024.01.001>.
2. Kanschat, G. and Scheichl, R. (2021). "Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations", available at: <https://na.uni-tuebingen.de/~lubich/chap6.pdf>.
3. Nasarudin, A., Ibrahim, Z. and Rosali, H. (2020). "On the Integration of Stiff ODEs Using Block Backward Differentiation Formulas of Order Six". *Symmetry*. Vol. 12(6), №952, available at: <https://doi.org/10.3390/sym12060952>.
4. Hairer, E. and Wanner, G. (2010). "Solving ordinary differential equations II. Stiff and differential-algebraic problems". *Springer Series in Computational Mathematics*, available at: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:117014104>.
5. Sundnes, J. (2024). "Stable Solvers for Stiff ODE Systems". *Simula SpringerBriefs on Computing*. Vol 15, available at: https://doi.org/10.1007/978-3-031-46768-4_3.
6. Raymond, D., Donald, J., Michael, A. and Ajileye, G., (2018). "A Self-Starting Five-Step Eight-Order Block Method for Stiff Ordinary Differential Equations". *Journal of Advances in Mathematics and Computer Science*. Vol. 26(4), available at: <https://doi.org/10.9734/JAMCS/2018/18909>.
7. Ibrahim, Z. and Nasarudin, A. (2020). "A Class of Hybrid Multistep Block Methods with A–Stability for the Numerical Solution of Stiff Ordinary Differential Equations". *Mathematics*. Vol. 8(6), available at: <https://doi.org/10.3390/math8060914>.
8. Sunday, J., Shokri, A., Kwanamu, J. and Nonlaopon, K. (2022). "Numerical Integration of Stiff Differential Systems Using Non-Fixed Step-Size Strategy". *Symmetry*. Vol. 14(8), available at: <https://doi.org/10.3390/sym14081575>.
9. Fronk, C. and Petzold, L. (2024). "Training stiff neural ordinary differential equations with implicit single-step methods". *Chaos*. Vol. 34(12), available at: <https://doi.org/10.1063/5.0243382>.
10. Guo, Y., Dietrich, F., Bertalan, T., Doncevic, D., Dahmen, M., Kevrekidis, I. and Li, Q. (2022). "Personalized Algorithm Generation: A Case Study in Learning ODE Integrators". *SIAM Journal on Scientific Computing*. Vol. 44, available at: <https://doi.org/10.1137/21M1418629>.
11. Klobardanz, E. and Le, W. (2023). "S-Solver: Numerically Stable Adaptive Step Size Solver for Neural ODEs". *Artificial Neural Networks and Machine Learning*. Vol. 14262, available at: https://doi.org/10.1007/978-3-031-44201-8_32.
12. Zhang, Y. and Dong, Q. (2024). "Unveiling LLM mechanisms through neural ODEs and control theory", available at: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2406.16985>.

-
13. Gunasingam, S. and Azmi, A. (2021). "Order Seven Block Integrator Method for the Solution of First Order Ordinary Differential Equation". *Aip Conference Proceedings*. Vol. 2423(020021), available at: <https://doi.org/10.1063/5.0075509>.
14. Kumar, S., Sumit, S. and Vigo-Aguiar, J. (2022). "A high order convergent numerical method for singularly perturbed time dependent problems using mesh equidistribution". *Mathematics and Computers in Simulation*. Vol. 199, available at: <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2022.03.025>.
15. Ramos H., Vigo-Aguiar, J. and Natesan, S. (2010). "Numerical solution of nonlinear singularly perturbed problems on nonuniform meshes by using a non-standard algorithm". *Journal of Mathematical Chemistry*. Vol. 48, available at: <https://doi.org/10.1007/s10910-009-9625-2>.
16. Duromola, M.K. (2022). "Single-Step Block Method of P-Stable for Solving Third-Order Differential Equations (IVPs): Ninth Order of Accuracy". *American Journal of Applied Mathematics and Statistics*. – 2022. – Vol. 10, №1, available at: <https://pubs.sciepub.com/ajams/10/1/2>.
17. Bashkov, Y., Dmitrieva, O., Huskova, N., Michalska, M. and Amirgaliyev, Y. (2019). "Parallel multiple blocked methods of Bickart type. Proceedings of SPI. Photonics Applications in Astronomy, Communications". *Industry and High-Energy Physics Experiments*. – 2019. – Vol. 11176(1), available at: <https://doi.org/10.1117/12.2536798>.
18. Dmitrieva, O. and Huskova, V. (2023). "Methods of composition of difference approximations for simulation dynamic processes". *Information Science and Modelling*. Vol. 1(9-10), available at: <https://doi.org/10.20998/2411-0558.2023.01.01>.
19. Satar, N. and Ariffin, N. (2024). "The Performance of Fixed Step Size and Adaptive Step Size Numerical Methods for Solving Deterministic Cell-Growth Models". *WSEAS Transactions on mathematics*. Vol. 23, available at: <https://doi.org/10.37394/23206.2024.23.79>.
20. Baumann, T., Götschel, S., Lunet, T., Ruprecht, D. and Speck, R. (2024). "Adaptive time step selection for Spectral Deferred Correction", available at: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2403.13454>.
21. Saleh, M., Kovacs, E. and Kallur, N. (2023). "Adaptive step size controllers based on Runge-Kutta and linear-neighbor methods for solving the non-stationary heat conduction equation". *Networks and Heterogeneous Media*. Vol. 18(3), available at: <https://doi.org/10.3934/nhm.2023046>.
22. McGovern, S. (2025). "Adaptive Step Selection for a Filtered Implicit Method". *Journal of Scientific Computing*. Vol. 103, available at: <https://doi.org/10.1007/s10915-025-02861-w>.
23. Ranjan, K.R. and Gowrisankar S. (2022). "Uniformly convergent NIPG method for singularly perturbed convection diffusion problem on Shishkin type meshes". *Applied Numerical Mathematics*. Vol. 179, available at: <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2022.04.015>.
24. Bayleyegn, T. Farago I. and Havasi A. (2024). "On the convergence of multiple Richardson extrapolation combined with explicit Runge–Kutta methods". *Periodica Mathematica Hungarica*. Vol. 88, available at: <https://doi.org/10.1007/s10998-023-00557-y>.
25. Zlatev, Z., Dimov, I., Farago, I., Georgiev, K and Havasi, A. (2017). "Stability of the Richardson Extrapolation combined with some implicit Runge–Kutta methods". *Journal of*

Computational and Applied Mathematics. Vol. 310, available at: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2016.03.018>.

26. Dmytriyeva, O. and Huskova, V. (2024). "Application of Legendre polynomials to increase the order of approximation of block methods". *Informatics, cybernetics and computer technology*. Vol.1 (38), available at: <https://doi.org/10.31474/1996-1588-2024-1-38-4-11>.

27. Liu, Y. and Shen, L. (2008). "A general rate law equation for biosorption". *Biochemical Engineering Journal*. Vol. 38, available at: <https://doi.org/10.1016/j.bej.2007.08.003>.

Статтю представив д-р техн. наук, проф. Національного технічного університету "Харківський політехнічний інститут" С.Ю. Леонов.

Надійшла (received) 29.04.2025

Dmytriyeva Olga^{1,2}, Dr.Sci.Tech, Professor

¹National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute",
av. Beresteyska, 37, Kyiv, Ukraine, 03056

²Institute for modelling hydraulic and environmental systems, University of Stuttgart,
Pfaffenwaldring 5a, Stuttgart, Germany, 70569

Tel.: +49 (160) 598-72-88, e-mail: olga.dmytriyeva@iws.uni-stuttgart.de

ORCID ID: 0000-0001-8921-8433

УДК 519.62

Побудова блокових інтеграторів для жорстких динамічних завдань із узгодженням порядків апроксимації при адаптації кроку / Дмитрієва О.А. // Вісник НТУ "ХПІ". Серія: Інформатика та моделювання. – Харків: НТУ "ХПІ". – 2025. – № 2 (14). – С. 4 – 29.

У статті подано новий підхід до побудови і програмної реалізації блокових інтеграторів, орієнтованих на розв'язання жорстких динамічних завдань. Основну увагу приділено методам адаптації кроку інтегрування, у яких використовується відновлення значень в опорних блоках за допомогою Ермітової інтерполяції. Застосування інтерполантів з кратними вузлами забезпечує збереження порядку апроксимації відновлених значень, який відповідає порядку основної розрахункової схеми. Для контролю кроку запропоновано кілька алгоритмів, заснованих на оцінці локальних похибок в точках розрахункового блоку, що збігаються. Порівняння значень у співпадаючих точках дозволяє точно регулювати крок інтегрування, мінімізуючи помилку при збереженні необхідної точності. Розглянуто основні теоретичні аспекти, включаючи узгодження порядків апроксимації при адаптації кроку, а також обчислювальні переваги застосування методу для жорстких завдань. Наведено результати чисельних експериментів, що демонструють ефективність запропонованих алгоритмів у порівнянні з традиційними методами, а також можливість їх застосування для вирішення жорстких завдань з високим ступенем точності. Іл.: 18. Табл.: 2. Бібліогр.: 27 назв.

Ключові слова: блоковий інтегратор, жорстка задача, порядок апроксимації, адаптація кроку, Ермітова інтерполяція

UDC 519.62

Construction of block integrators for hard dynamic problems with coordination of approximation order during step adaptation/ Dmytriyeva O. // Herald of the National Technical University "KhPI". Series of "Informatics and Modeling". – Kharkov: NTU "KhPI". – 2025. – № 2 (14). – P. 4 – 29.

The article presents a new approach to the construction of integrators based on the use of multi-step block methods, aimed at solving hard dynamic problems. The main focus is on integration step adaptation schemes, where the restoration of new values in the support blocks is performed using Hermitian interpolation. The use of interpolants with multiple nodes ensures the preservation of the approximation orders of the restored values, corresponding to the orders of the main computational scheme. Several algorithms for step control are proposed, based on the estimation of local errors at coinciding points within the computational block. Comparison of values at these coinciding points allows for accurate adjustment of the integration step, minimizing error while maintaining the required accuracy. The main theoretical aspects are discussed, including the coordination of approximation orders during step adaptation and the computational advantages of applying the method to hard problems. Results of numerical experiments are presented, demonstrating the effectiveness of the proposed algorithms compared to traditional methods, as well as their applicability to solving hard problems with a high degree of accuracy. Figs.: 18. Tabl.: 2. Refs.: 27 item.

Keywords: block integrator, hard problem, approximation order, step adaptation, Hermitian interpolation