

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ОБОБЩЕННЫХ МЕТОДОВ РУНГЕ – КУТТА ПРИМЕНИТЕЛЬНО К НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫМ ЗАДАЧАМ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА. I. ЯВНЫЕ МЕТОДЫ

Разработан общий алгоритм исследования спектральной устойчивости обобщенных многостадийных методов Рунге – Кутта (МРК) разных порядков точности применительно к численному интегрированию по времени начально-краевой задачи для параболического уравнения второго порядка. Выражение для функции спектральной устойчивости получено в двух альтернативных формах: на основе матричных соотношений и в детерминантном виде. Исследована конкретная реализация разных явных обобщенных МРК и их спектральная устойчивость. Показано, что все явные обобщенные МРК обладают условной спектральной устойчивостью и свойством условной монотонности численного решения по времени, нарушение которого приводит к возникновению ложных осцилляций приближенного решения. Функция устойчивости для этих методов является полиномиальной. Продемонстрировано, что в случае использования двухстадийных явных обобщенных МРК получаются схемы типа предиктор-корректор, а в случае задачи нестационарной одномерной теплопроводности на базе одностадийного обобщенного МРК получается условно устойчивая классическая двухслойная явная конечно-разностная схема на четырехточечном шаблоне. Выявлено, что из всех исследованных явных обобщенных МРК наименее слабым условием спектральной устойчивости обладает пятистадийный обобщенный метод Рунге – Кутта – Мерсона.

Введение. Многие физические и механические процессы описываются уравнениями параболического типа: диффузия и теплопроводность твердых тел [2, 4, 5 и др.], стационарный теплоперенос в трубах (например, задача Гретца – Нуссельта [2, 4 и др.]), течение вязкой жидкости и газа [6, 13 и др.] и т.д.

Простейшим уравнением параболического типа является уравнение, описывающее нестационарную одномерную теплопроводность в твердом теле [2, 4, 5], а также спутное течение вязкого газа за крыловым профилем [6]. Это уравнение является модельным, позволяющим «отрабатывать» схемы численного интегрирования для более сложных уравнений и систем параболического типа, содержащих производные по времени первого порядка. Для численного интегрирования начально-краевых задач, соответствующих этому уравнению, используют как явные, так и неявные численные схемы. Из явных методов конечных разностей наибольшее распространение получили условно устойчивая двухслойная схема [2, 10] на четырехточечном шаблоне (рис. 1а) и безусловно устойчивая трехслойная схема Дюфорты – Франкеля [18], а также схема В. К. Саульева [12]. Из неявных методов наиболее часто используются безусловно устойчивые схемы с опережением: двухслойная (схема Лаасонена [19] на четырехточечном шаблоне (рис. 1б)) или различные трехслойные схемы [10], а также двухслойные схемы [10] на шеститочечном шаблоне (рис. 1в), например двухслойная симметричная шеститочечная схема Кранка – Николсона [11, 17].

Для численного интегрирования указанного модельного уравнения могут быть использованы и обобщенные методы Рунге – Кутта (МРК) [7 и др.]. В частности, в работе [7] было показано, что численные схемы, например, Лаасонена [19] и Кранка – Николсона [17] получаются как частные случаи обобщенных МРК при последовательной дискретизации соответствующей начально-краевой задачи сначала по времени, а затем по пространственной переменной. Однако в [7] не была доказана устойчивость произволь-

ных обобщенных МКР, а были рассмотрены лишь некоторые их реализации, для которых и изучалась устойчивость и свойство монотонности численного решения.

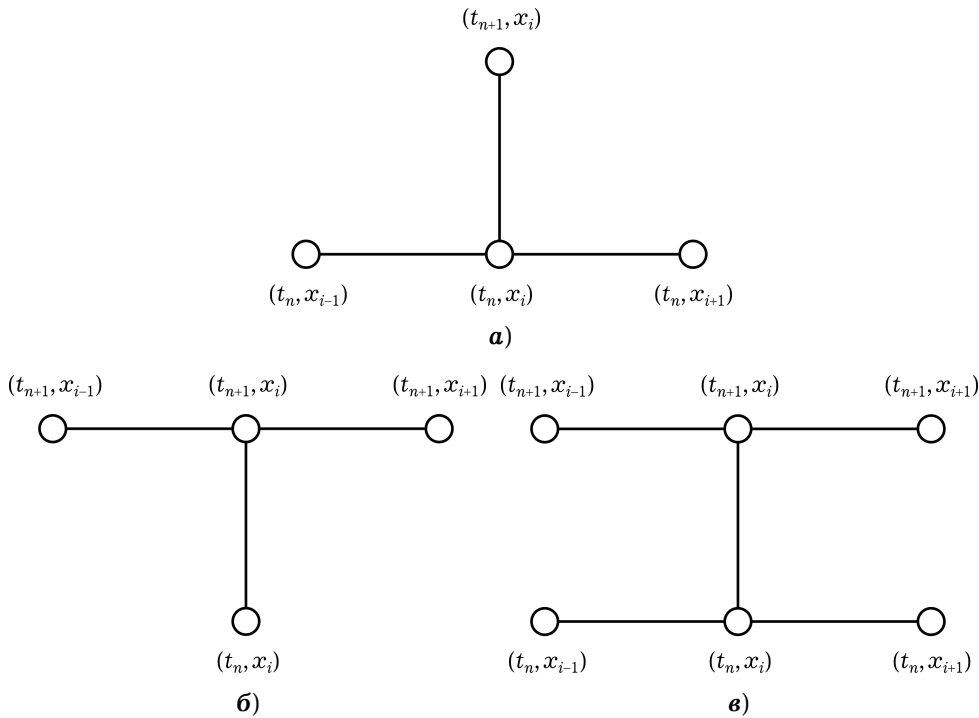


Рис. 1. Шаблоны для некоторых классических конечно-разностных схем: **а**) – явной; **б**) – Лаасонена; **в**) – Кранка – Николсона.

Так как интерес к МКР не ослабевает [9, 16 и др.], то актуальной является проблема исследования устойчивости обобщенных МКР при численном интегрировании ими начально-краевых задач для уравнений математической физики. В связи с этим настоящая работа посвящена изучению спектральной устойчивости обобщенных МКР применительно к численному интегрированию начально-краевой задачи для уравнения параболического типа, содержащего частную производную по времени первого порядка (уравнение диффузии или теплопроводности твердого тела [2, 4, 5, 10]).

Общий алгоритм исследования спектральной устойчивости обобщенных МКР применительно к начально-краевой задаче для параболического уравнения второго порядка. Рассмотрим параболическое уравнение второго порядка

$$\frac{\partial y(t, \mathbf{x})}{\partial t} = L(y(t, \mathbf{x})), \quad \mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_r\}, \quad t \geq 0, \quad \mathbf{x} \in G, \quad (1)$$

где t – время; G – некоторая область r -мерного евклидова пространства; $L(\bullet)$ – линейный дифференциальный оператор второго порядка по пространственным переменным x_i , $i = 1, \dots, r$, эллиптического типа.

Если $L(y) = \sum_{i=1}^r \frac{\partial^2 y}{\partial x_i^2}$, то уравнение (1) описывает нестационарную r -

мерную теплопроводность однородного изотропного твердого тела с единичным коэффициентом температуропроводности [2, 4, 5] или задачу диффузии [10].

Пусть λ – собственное число, а $W(\mathbf{x})$ – соответствующая ему собственная функция оператора $L(\bullet)$, т. е. выполняется равенство

$$L(W(\mathbf{x})) + \lambda^2 W(\mathbf{x}) = 0. \quad (2)$$

Согласно методу разделения переменных [2, 4, 5, 14], частное решение уравнения (1) с учетом (2) имеет вид

$$y(t, \mathbf{x}) = C \exp(-\lambda^2 t) W(\mathbf{x}), \quad t \geq 0, \quad \mathbf{x} \in G, \quad (3)$$

где C – некоторая постоянная. Так как собственные числа λ оператора $L(\bullet)$ являются действительными [14], то при фиксированном \mathbf{x} равенство (3) определяет монотонную зависимость аналитического частного решения y от времени t .

Дискретизируем начально-краевую задачу для уравнения (1) по времени, т. е. будем разыскивать ее решение в моменты времени

$$t_{n+1} = t_n + \tau, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad t_0 = 0, \quad (4)$$

где τ – шаг по времени (возможно, переменный: $\tau = \tau_{n+1}$).

Далее будем изучать спектральную устойчивость приближенных решений уравнения (1), полученных разными обобщенными МРК в дискретные моменты времени (4).

Применение s -стадийного обобщенного МРК для интегрирования по времени начально-краевой задачи, соответствующей уравнению (1), в дискретные моменты времени (4) приводит к следующей системе дифференциальных уравнений по пространственным переменным \mathbf{x} [7]:

$$\mathbf{Y}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}y^n(\mathbf{x}) + \tau \mathbf{A}L(\mathbf{Y}(\mathbf{x})), \quad \mathbf{x} \in G, \quad (5)$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^n(\mathbf{x}) + \tau \mathbf{B}^*L(\mathbf{Y}(\mathbf{x})), \quad \mathbf{x} \in G, \quad (6)$$

где

$$\mathbf{Y}(\mathbf{x}) = \{Y_1(\mathbf{x}), Y_2(\mathbf{x}), \dots, Y_s(\mathbf{x})\}^*,$$

$$L(\mathbf{Y}) = \{L(Y_1), L(Y_2), \dots, L(Y_s)\}^*,$$

$$\mathbf{B} = \{b_1, b_2, \dots, b_s\}^*, \quad \mathbf{E} = \{1, 1, \dots, 1\}^*, \quad y^n(\mathbf{x}) \equiv y(t_n, \mathbf{x}), \quad (7)$$

$\mathbf{Y}(\mathbf{x})$ – s -компонентная вспомогательная вектор-функция; $\mathbf{A} = (a_{ij})$ – $s \times s$ -матрица Бутчера соответствующего МРК; \mathbf{B} – s -компонентный вектор-столбец, составленный из элементов последней строки матрицы Бутчера (см. (3.1.6) в [3]); \mathbf{E} – s -компонентный вектор-столбец, все элементы которого равны единице; звездочкой обозначена операция транспонирования.

Согласно [10, 11], для исследования спектральной устойчивости схемы (5), (6) с учетом (2), (7) представим ее частное решение в следующем виде:

$$y^n(\mathbf{x}) = z^n W(\mathbf{x}), \quad y^{n+1}(\mathbf{x}) = z^{n+1} W(\mathbf{x}), \quad \mathbf{Y}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}W(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in G, \quad (8)$$

где z^n , z^{n+1} – некоторые постоянные, причем z^n предполагается уже известной, а z^{n+1} подлежит определению в момент времени t_{n+1} ; \mathbf{U} – s -компонентный вектор-столбец, подлежащий определению.

Подставив равенства (8) в соотношения (5), (6), получим

$$\mathbf{U}W(\mathbf{x}) = \mathbf{E}z^n W(\mathbf{x}) + \tau(\mathbf{A}\mathbf{U})L(W(\mathbf{x})),$$

$$z^{n+1}W(\mathbf{x}) = z^n W(\mathbf{x}) + \tau(\mathbf{B}^*\mathbf{U})L(W(\mathbf{x})). \quad (9)$$

Учтем в (9) равенство (2) и сократим результат на $W(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{U} = z^n \mathbf{E} - \eta(\mathbf{A}\mathbf{U}), \quad (10)$$

$$z^{n+1} = z^n - \eta(\mathbf{B}^*\mathbf{U}), \quad \eta = \tau\lambda^2. \quad (11)$$

Из соотношения (10) следует матричное уравнение

$$(\mathbf{I} + \eta \mathbf{A})\mathbf{U} = z^n \mathbf{E}, \quad (12)$$

где правая часть по предположению известна; \mathbf{I} – единичная $s \times s$ -матрица. Решение системы s линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) (12) удобно представить в виде

$$\mathbf{U} = z^n \mathbf{V}, \quad (13)$$

где \mathbf{V} – s -компонентный вектор-столбец, определяемый согласно (12) из замкнутой СЛАУ

$$(\mathbf{I} + \eta \mathbf{A})\mathbf{V} = \mathbf{E},$$

откуда

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}(\eta) = (\mathbf{I} + \eta \mathbf{A})^{-1} \mathbf{E}. \quad (14)$$

Далее считаем, что вектор-функция $\mathbf{V} = \mathbf{V}(\eta)$ уже известна из матричного равенства (14).

Подставив представление (13) в равенство (11), получим

$$z^{n+1} = z^n - \eta(\mathbf{B}^* \mathbf{V})z^n = (1 - \eta \mathbf{B}^* \mathbf{V})z^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$

По аналогии с терминологией, принятой в [3], введем в рассмотрение функцию спектральной устойчивости $R(\eta)$ соответствующего обобщенного МРК применительно к начально-краевой задаче для уравнения (1):

$$R(\eta) = \frac{z^{n+1}}{z^n} = 1 - \eta \mathbf{B}^* \mathbf{V}(\eta), \quad \eta = \tau \lambda^2 \geq 0. \quad (16)$$

Следуя работам [20, 21], функция спектральной устойчивости обобщенного МРК может быть получена в форме, альтернативной (16). Действительно, уравнения (11), (12) можно записать в виде замкнутой СЛАУ

$$\begin{pmatrix} 1 + \eta a_{11} & \eta a_{12} & \dots & \eta a_{1s} & 0 \\ \eta a_{21} & 1 + \eta a_{22} & \dots & \eta a_{2s} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \eta a_{s1} & \eta a_{s2} & \dots & 1 + \eta a_{ss} & 0 \\ \eta b_1 & \eta b_2 & \dots & \eta b_s & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_s \\ z^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z^n \\ z^n \\ \vdots \\ z^n \\ z^n \end{pmatrix}, \quad \eta = \tau \lambda^2, \quad (17)$$

где U_i , $i = 1, \dots, s$, – компоненты вектора-столбца \mathbf{U} (см. (8)). Нетрудно видеть, что определитель матрицы в (17) имеет значение $\Delta = \det(\mathbf{I} + \eta \mathbf{A})$.

Используя правило Крамера, вычислим на основании (17) величину z^{n+1} , тогда получим

$$z^{n+1} = \Delta^{-1} \det(\mathbf{I} + \eta \mathbf{A} - \eta(\mathbf{E}\mathbf{B}^*))z^n, \quad (18)$$

где

$$\det(\mathbf{I} + \eta \mathbf{A} - \eta(\mathbf{E}\mathbf{B}^*)) = \det \begin{pmatrix} 1 + \eta a_{11} & \eta a_{12} & \dots & \eta a_{1s} & 1 \\ \eta a_{21} & 1 + \eta a_{22} & \dots & \eta a_{2s} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \eta a_{s1} & \eta a_{s2} & \dots & 1 + \eta a_{ss} & 1 \\ \eta b_1 & \eta b_2 & \dots & \eta b_s & 1 \end{pmatrix}.$$

На основании первого из равенств (16) с учетом (18) получаем альтернативное выражение для функции спектральной устойчивости:

$$R(\eta) = \frac{\det(\mathbf{I} + \eta \mathbf{A} - \eta(\mathbf{E}\mathbf{B}^*))}{\det(\mathbf{I} + \eta \mathbf{A})}, \quad \eta = \tau \lambda^2 \geq 0. \quad (19)$$

Согласно первому из равенств (16), при $|R| > 1$ обобщенный МРК спектрально неустойчив. Если же $|R| \leq 1$, то метод спектрально устойчив, причем при

$$0 \leq R < 1 \quad (20)$$

выполняется условие монотонности решения (в смысле особенности поведения частного аналитического решения (3) при фиксированном \mathbf{x}), а при

$$-1 \leq R < 0 \quad (21)$$

метод не обладает указанным свойством монотонности, т. е. частное численное решение (8) при фиксированном \mathbf{x} порождает ложные тепловые колебания, так как $\text{sgn}(z^{n+1}) = -\text{sgn}(z^n)$, $n = 0, 1, 2, \dots$.

Таким образом, на основании соотношений (8)–(21) можно численно или аналитически исследовать спектральную устойчивость обобщенных МРК разных порядков точности применительно к уравнению (1). Для этого необходимо лишь использовать компоненты матрицы Бутчера соответствующего МРК [1, 3, 15] и проварьировать величину $\eta = \tau\lambda^2$ (см. (11)) от нуля до бесконечности (машинной бесконечности).

Ненулевые компоненты матрицы Бутчера A явных МРК расположены под главной диагональю [1, 7], поэтому компоненты $Y_m(\mathbf{x})$, $1 \leq m \leq s$, вектора $\mathbf{Y}(\mathbf{x})$ (см. (7)) вычисляются последовательно из уравнений системы (5) без необходимости обращения матричного оператора $\mathbf{AL}(\mathbf{Y}(\mathbf{x}))$ (что и характеризует эти методы как явные). Исследование явных обобщенных МРК, компоненты матриц Бутчера которых приведены в [1], показало, что все они обладают условной спектральной устойчивостью и, как следствие, свойством условной монотонности (20), причем для s -стадийных обобщенных МРК с четным количеством стадий ($s = 2k$) условия устойчивости и монотонности совпадают. Согласно (19) функция $R(\eta)$ для явных обобщенных МРК является полиномиальной.

Численное исследование по схеме (5)–(21) неявных обобщенных МРК, матрицы Бутчера которых приведены в [3], показало, что все они безусловно спектрально устойчивы, но некоторые из них обладают свойством условной монотонности. В частности, диагонально неявные обобщенные МРК являются условно монотонными. Из (19) следует, что функция $R(\eta)$ для неявных обобщенных МРК является рациональной.

В настоящем исследовании нигде не использовалось требование, что оператор $L(\bullet)$ в (1) содержит частные производные по пространственным переменным x_i не выше, чем второго порядка. В действительности же все проведенные выше рассуждения остаются справедливыми, если оператор $L(\bullet)$ содержит частные производные по x_i , $i = 1, \dots, r$, выше второго порядка. Необходимо лишь, чтобы выполнялось уравнение (2) с положительным множителем при втором слагаемом (в (2) это $\lambda^2 > 0$). В частности, $L(\bullet)$ может быть бигармоническим оператором, тогда во всех полученных выше соотношениях необходимо λ заменить на λ^2 .

Все приведенные выше выкладки справедливы и в случае, когда уравнение (1) имеет матричный вид (т. е. представляет собой систему дифференциальных уравнений). При этом под y , W , y^n следует понимать вектор-функции, а под $L(\bullet)$ – матричный оператор.

Все проведенные выше рассуждения остаются справедливыми и в том случае, когда оператор $L(\bullet)$ в (1) является не дифференциальным, а конечно-разностным [11]. При этом уравнение (1) представляет собой результат

применения метода прямых для приближенного решения соответствующей начально-краевой задачи [3]. Следовательно, алгоритм (8)–(21), где под W , Y_m , $m = 1, \dots, s$, нужно понимать сеточные функции, может быть использован и для исследования спектральной устойчивости соответствующих конечно-разностных схем, основанных на применении МРК для численного интегрирования уравнения (1), где $L(\cdot)$ – конечно-разностный оператор [3, 11].

Все обобщенные МРК относятся к разряду двухслойных по времени схем, для которых из спектральной устойчивости следует устойчивость по начальным данным [11].

Особенности реализации некоторых явных обобщенных МРК. Рассмотрим реализацию некоторых конкретных явных обобщенных МРК применительно к интегрированию начально-краевой задачи для уравнения (1).

Простейшая явная схема основывается на формуле Эйлера

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^n(\mathbf{x}) + \tau \left. \frac{\partial y}{\partial t} \right|_{t=t_n}, \quad \mathbf{x} \in G. \quad (22)$$

Исключим из (22) за счет (1) производную $\partial y / \partial t$, тогда получим искомого явную схему обобщенного МРК:

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^n(\mathbf{x}) + \tau L(y^n(\mathbf{x})), \quad \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (23)$$

Для исследования спектральной устойчивости этой схемы используем представление решения в виде (8) и учтем равенство (2), тогда после сокращения на $W(\mathbf{x})$ будем иметь

$$z^{n+1} = z^n - \tau \lambda^2 z^n = (1 - \eta) z^n, \quad \eta = \tau \lambda^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (24)$$

На основании первого из равенств (16) из (24) следует

$$R(\eta) = 1 - \eta, \quad \eta > 0. \quad (25)$$

Условие спектральной устойчивости схемы (23) с учетом (25) имеет вид

$$|R(\eta)| < 1: \quad 0 < \eta < 2, \quad (26)$$

а из (20) на основании (25) вытекает условие монотонности схемы (23):

$$0 < R(\eta) < 1: \quad 0 < \eta < 1. \quad (27)$$

Согласно (27) условие монотонности численного решения (23) для явного метода Эйлера является более сильным, чем условие спектральной устойчивости (26).

Если оператор $L(\cdot)$ в (23) имеет простейший вид

$$L(y) = \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}, \quad (28)$$

то, введя в рассмотрение сеточную функцию

$$y_i^n = y^n(x_i) = y(t_n, x_i), \quad 1 \leq i \leq N, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (29)$$

на равномерной сетке с узлами

$$x_{i+1} = x_i + h, \quad h = \text{const} > 0, \quad 1 \leq i \leq N - 1, \quad (30)$$

получим его конечно-разностную аппроксимацию порядка $O(h^2)$:

$$L(y^n) = \frac{d^2 y^n}{dx^2} \approx \frac{y_{i+1}^n - 2y_i^n + y_{i-1}^n}{h^2}, \quad 2 \leq i \leq N - 1, \quad (31)$$

где N – количество узлов сетки.

Подставив (31) в равенство (23), получим явную конечно-разностную схему на четырехточечном шаблоне (см. рис. 1а) [2, 10, 11]:

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \frac{\tau}{h^2}(y_{i+1}^n - 2y_i^n + y_{i-1}^n), \quad 2 \leq i \leq N-1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (32)$$

Если в крайних узлах $i = 0$, $i = N$ граничные условия таковы, что значения $y_i^n = 0$, то собственные числа оператора (31) имеют значения [11]

$$\lambda_k^2 = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{\pi h k}{2}, \quad 1 \leq k \leq N-2, \quad \lambda_{N-1}^2 = \frac{4}{h^2} \cos^2 \frac{\pi h}{2}. \quad (33)$$

Так как $0 \leq \sin^2 \varphi \leq 1$, $0 \leq \cos^2 \varphi \leq 1$, то на основании равенства $\eta_k = \tau \lambda_k^2$, $1 \leq k \leq N-1$, с учетом (33) из неравенств (26) получим общеизвестное условие спектральной устойчивости схемы (32) [10, 11]:

$$\frac{\tau}{h^2} < \frac{1}{2}, \quad (34)$$

а из (27) с учетом (33) следует условие монотонности схемы (32):

$$\frac{\tau}{h^2} < \frac{1}{4}, \quad (35)$$

которое является более сильным, чем условие устойчивости (34).

В силу того, что формула Эйлера имеет точность $O(\tau)$ [1], а аппроксимация оператора (31) – порядок $O(h^2)$, то получаем общеизвестный результат: в целом схема (32) при выполнении условия (34) (или (35)) имеет точность порядка $O(\tau + h^2)$ [10, 11].

Рассмотрим один из двухстадийных ($s = 2$) явных обобщенных МРК второго порядка точности по τ , для которого уравнения (5), (6) с учетом (7) и коэффициентов матрицы Бутчера из [1] имеют вид

$$\begin{aligned} Y_1(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}), & Y_2(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \tau L(Y_1(\mathbf{x})), \\ y^{n+1}(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2}[L(Y_1(\mathbf{x})) + L(Y_2(\mathbf{x}))], & \mathbf{x} \in G, \quad n &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (36)$$

По-прежнему представим решение системы (36) в виде (8), тогда с учетом (2) после сокращения на $W(\mathbf{x})$ получим

$$\begin{aligned} U_1 &= z^n, & U_2 &= z^n - \eta U_1 = (1 - \eta)z^n, \\ z^{n+1} &= z^n - \frac{\eta}{2}(U_1 + U_2) = \left(1 - \eta + \frac{1}{2}\eta^2\right)z^n, \\ & & \eta &= \tau \lambda^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (37)$$

Из первого из равенств (16) с учетом (37) получаем выражение для функции устойчивости

$$R(\eta) = 1 - \eta + \frac{1}{2}\eta^2, \quad \eta > 0. \quad (38)$$

Отсюда следует, что для схемы (36) условие монотонности (20) и спектральной устойчивости совпадают и определяются неравенствами

$$|R(\eta)| < 1, \quad 0 < R(\eta) < 1: \quad 0 < \eta < 2, \quad \eta = \tau \lambda^2. \quad (39)$$

Если оператор $L(\bullet)$ имеет вид (28) и аппроксимируется конечной разностью (31), то справедливы равенства (33). В этом случае условия спектральной устойчивости и монотонности (39) схемы (36) совпадают с неравенствами (34).

Схему (36) можно переписать в следующем виде:

$$Y(\mathbf{x}) = y^n(\mathbf{x}) + \tau L(y^n(\mathbf{x})), \quad (40)$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2}[L(y^n(\mathbf{x})) + L(Y(\mathbf{x}))], \quad \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (41)$$

Согласно соотношениям (40), (41), схема (36) – это явная численная схема типа предиктор-корректор, причем этап предиктора определяется равенством (40), которое формально полностью совпадает с явным методом Эйлера (23), а этап корректора – равенством (41).

Анализ других двухстадийных ($s = 2$) явных обобщенных МРК, коэффициенты матриц Бутчера которых приведены в [1] и которые также относятся к схемам типа предиктор-корректор и имеют второй порядок точности по τ , показал, что условия спектральной устойчивости и монотонности для них также совпадают и определяются неравенствами (39). Если оператор $L(\bullet)$ имеет вид (28) и аппроксимируется равенством (31) на равномерной сетке (30), то при выполнении неравенств (39) все двухстадийные явные обобщенные МРК имеют точность $O(\tau^2 + h^2)$, что на порядок по τ больше, чем у явного метода Эйлера (23). При этом условие монотонности явного метода Эйлера (27) является более сильным по сравнению с аналогичным условием (39) для двухстадийных явных обобщенных МРК.

Рассмотрим один из трехстадийных ($s = 3$) явных обобщенных МРК третьего порядка точности по τ , для которого уравнения (5), (6) с учетом (7) и коэффициентов матрицы Бутчера из [1] имеют вид

$$\begin{aligned} Y_1(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}), & Y_2(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2}L(Y_1), \\ Y_3(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \tau[2L(Y_2) - L(Y_1)], \\ y^{n+1}(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6}[L(Y_1(\mathbf{x})) + 4L(Y_2(\mathbf{x})) + L(Y_3(\mathbf{x}))], \\ & \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (42)$$

Представим решение системы (42) в виде (8). Тогда с учетом (2) после сокращения на $W(\mathbf{x})$ получим

$$\begin{aligned} U_1 &= z^n, & U_2 &= z^n - \frac{\eta}{2}U_1 = \left(1 - \frac{\eta}{2}\right)z^n, \\ U_3 &= z^n - \eta(2U_2 - U_1) = [1 - \eta(1 - \eta)]z^n, \\ z^{n+1} &= z^n - \frac{\eta}{6}(U_1 + 4U_2 + U_3) = \left[1 - \frac{\eta}{6}(6 - 3\eta + \eta^2)\right]z^n, \\ & \eta = \tau\lambda^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (43)$$

Из первого равенства (16) с учетом (43) получаем

$$R(\eta) = 1 - \frac{\eta}{6}(6 - 3\eta + \eta^2), \quad \eta > 0. \quad (44)$$

Исследование поведения функции (44) показало, что условия спектральной устойчивости для схемы (42) определяется неравенствами

$$|R(\eta)| < 1: \quad 0 < \eta < 2.5125, \quad \eta = \tau\lambda^2, \quad (45)$$

а условие монотонности характеризуется более сильными ограничениями:

$$0 < R(\eta) < 1: \quad 0 < \eta < 1.595, \quad \eta = \tau\lambda^2. \quad (46)$$

Анализ других трехстадийных ($s = 3$) явных обобщенных МРК, коэффициенты матриц Бутчера которых приведены в [1], показал, что условия их спектральной устойчивости и монотонности также определяются неравенствами (45) и (46) соответственно.

Рассмотрим один из четырехстадийных ($s = 4$) явных обобщенных МРК, точность которого имеет порядок $O(\tau^4)$, а уравнения (5), (6) с учетом (7) и коэффициентов матрицы Бутчера из [1] имеют вид:

$$\begin{aligned} Y_1(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}), & Y_2(\mathbf{x}) &= y^n + \frac{\tau}{2}L(Y_1), \\ Y_3(\mathbf{x}) &= y^n + \frac{\tau}{2}L(Y_2), & Y_4(\mathbf{x}) &= y^n + \tau L(Y_3), \\ y^{n+1}(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6}[L(Y_1) + 2L(Y_2) + 2L(Y_3) + L(Y_4)], \\ \mathbf{x} &\in G, & n &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (47)$$

Представив решение системы (47) в виде (8) и учитывая (2), после сокращения на $W(\mathbf{x})$ получим

$$\begin{aligned} U_1 &= z^n, & U_2 &= z^n - \frac{\eta}{2}U_1, \\ U_3 &= z^n - \frac{\eta}{2}U_2, & U_4 &= z^n - \eta U_3, \\ z^{n+1} &= z^n - \frac{\eta}{6}(U_1 + 2U_2 + 2U_3 + U_4), & \eta &= \tau\lambda^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (48)$$

На основании первого равенства (16) с учетом (48) можно получить выражение для функции устойчивости $R(\eta)$, которая представляет собой полином четвертого порядка относительно η . Исследование выполнимости условий спектральной устойчивости или монотонности (20) схемы (47) с использованием такой сложной функции $R(\eta)$ возможно только численно (как это уже потребовалось для более простой функции (44)), поэтому, не получая конкретного вида функции $R(\eta)$, выполнимость неравенств (20), (21) можно проверить численно непосредственно на основании соотношений (48). Действительно, все величины в (48) (z^{n+1} , U_i , $i = 1, \dots, 4$) пропорциональны z^n , а значит, согласно первому из равенств (16) имеем

$$R(\eta) = z^{n+1}(\eta) \quad \text{при} \quad z^n = 1, \quad (49)$$

что соответствует представлению вектор-столбца \mathbf{U} в виде (13).

Вычисления, проведенные по формуле (49) с учетом (48), показали, что для схемы (47) условия спектральной устойчивости и монотонности совпадают и определяются неравенствами

$$|R(\eta)| < 1, \quad 0 < R(\eta) < 1: \quad 0 < \eta < 2.785, \quad \eta = \tau\lambda^2. \quad (50)$$

Анализ других четырехстадийных ($s = 4$) явных обобщенных МРК, коэффициенты матриц Бутчера которых приведены в [1], показал, что для них условия спектральной устойчивости и монотонности также совпадают и определяются неравенствами (50). Точность всех этих схем по τ по-прежнему имеет порядок $O(\tau^4)$.

Исследуем спектральную устойчивость пятистадийного ($s = 5$) явного обобщенного метода Рунге – Кутты – Мерсона, также имеющего четвертый порядок точности по τ [8]. В этом случае уравнения (5), (6) с учетом (7) имеют вид

$$\begin{aligned}
Y_1(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}), & Y_2(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{3}L(Y_1), \\
Y_3(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6}[L(Y_1) + L(Y_2)], \\
Y_4(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{8}[L(Y_1) + 3L(Y_3)], \\
Y_5(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2}[L(Y_1) - 3L(Y_3) + 4L(Y_4)], \\
y^{n+1}(\mathbf{x}) &= y^n(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6}[L(Y_1) + 4L(Y_4) + L(Y_5)], \quad \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (51)
\end{aligned}$$

Представим решение системы (51) в виде (8). Тогда с учетом (2) после сокращения на функцию $W(\mathbf{x})$ получим

$$\begin{aligned}
U_1 &= z^n, & U_2 &= z^n - \frac{\eta}{3}U_1, & U_3 &= z^n - \frac{\eta}{6}(U_1 + U_2), \\
U_4 &= z^n - \frac{\eta}{8}(U_1 + 3U_3), & U_5 &= z^n - \frac{\eta}{2}(U_1 - 3U_3 + 4U_4), \\
z^{n+1} &= z^n - \frac{\eta}{6}(U_1 + 4U_4 + U_5), & \eta &= \tau\lambda^2. \quad (52)
\end{aligned}$$

На основании формулы (49) с учетом (52) численно было установлено, что условие спектральной устойчивости схемы (51) определяется неравенствами

$$|R(\eta)| < 1: \quad 0 < \eta < 3.5475, \quad \eta = \tau\lambda^2, \quad (53)$$

а условие монотонности (20) характеризуется более сильными ограничениями

$$0 < R(\eta) < 1: \quad 0 < \eta < 2.415, \quad \eta = \tau\lambda^2. \quad (54)$$

Сравнение неравенств (26), (39), (45), (50), (53) показывает, что наименее слабым является условие спектральной устойчивости (53) явного обобщенного метода Рунге – Кутта – Мерсона (51). Сопоставление же неравенств (27), (39), (46), (50), (54) свидетельствует о том, что наименее слабым является условие монотонности (50) для четырехстадийных явных обобщенных МРК (например для схемы (47)), имеющих по τ тот же порядок точности, что и метод Рунге – Кутта – Мерсона [1, 8].

Таким образом, из всех рассмотренных выше явных обобщенных МРК для численного интегрирования начально-краевой задачи, соответствующей уравнению (1), предпочтение, по-видимому, следует отдавать четырехстадийным ($s = 4$) обобщенным МРК, условие спектральной устойчивости и монотонности которых определяется неравенствами (50), если, конечно, входные данные этой задачи обеспечивают необходимые дифференциальные свойства ее решения, позволяющие корректно применять указанные методы [1, 7, 14].

Заключение. Предложенный алгоритм позволяет изучать спектральную устойчивость и свойство монотонности обобщенных МРК применительно к численному интегрированию начально-краевой задачи для параболического уравнения с первой производной по времени. Проведенные исследования показали, что все явные обобщенные МРК обладают условной спектральной устойчивостью и условной монотонностью по времени. Функция спектральной устойчивости для явных обобщенных МРК является полиномиальной по спектральному параметру. Для многостадийных явных обобщенных МРК с четным количеством стадий условия спектральной устойчивости и монотонности совпадают, а для МРК с нечетным количеством стадий требование монотонности решения по времени является более сильным, чем условие спектральной устойчивости. Наименее слабым условием спектральной устойчивости обладает пятистадийный явный обобщенный метод Рунге – Кутта – Мерсона, имеющий четвертый порядок точности по временному шагу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 14-01-00102-а).

1. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений: В 2 т. – Т. II. – Москва: Физматгиз, 1962. – 639 с.
2. Грёбер Р., Эрк С. Основы учения о теплообмене. – Москва – Ленинград: ОНТИ, 1936. – 327 с.
То же: Gröber H., Erk S. Die Grundgesetze der Wärmeübertragung. – Berlin: Verlag von Julius Springer, 1933. – xii+259 S.
3. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге – Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. – Москва: Мир, 1988. – 334 с.
То же: Dekker K., Verwer J. G. Stability of Runge – Kutta methods for stiff nonlinear differential equations. – Amsterdam: North-Holland, 1984. – ix+307 p.
4. Исаченко В. П., Осипова В. А., Сукомел А. С. Теплопередача. – Москва: Энергия, 1969. – 440 с.
5. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. – Москва: Наука, 1964. – 488 с.
То же: Carslaw H. S., Jaeger J. C. Conduction of heat in solids. – Oxford: Clarendon Press, 1959. – 510 p.
6. Маслов А. А., Миронов С. Г., Поплавская Т. В. Введение в динамику вязкого газа. – Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2010. – 168 с.
7. Немировский Ю. В., Янковский А. П. Численное интегрирование начально-краевых задач с большими градиентами решения обобщенными методами Рунге – Кутта // Мат. методы та физ.-мех. поля. – 2004. – **47**, № 1. – С. 43–62.
8. Новиков Е. А. Явные методы для жестких систем. – Новосибирск: Наука, 1997. – 195 с.
9. Окуонгае Р. И., Ихиле М. Н. О. $L(\alpha)$ -устойчивые неявные методы Рунге – Кутты переменного порядка со второй производной // Сиб. журн. вычисл. математики. – 2014. – **17**, № 4. – С. 373–387.
То же: Okuonghae R. I., Ikhile M. N. O. $L(\alpha)$ -stable variable-order implicit second derivative Runge-Kutta methods // Numer. Analys. Appl. – 2014. – **7**, No. 4. – P. 314–327.
10. Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. – Москва: Мир, 1972. – 418 с.
То же: Richtmyer R. D., Morton K. W. Difference methods for initial-value problems. – New York: Intersci. Publ., 1967. – xiv + 405 p.
11. Самарский А. А. Теория разностных схем. – Москва: Наука, 1989. – 616 с.
12. Саульев В. К. Об одном способе численного интегрирования уравнений диффузии // Докл. АН СССР. – 1957. – **115**, № 6. – С. 1077–1080.
13. Семенов В. П. Основы механики жидкости: Учеб. пос. – Москва: Флинта, 2013. – 376 с.
14. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. – Москва: Наука, 1977. – 735 с.
15. Butcher J. C. Numerical methods for ordinary differential equations. – Chichester: Wiley, 2008. – 482 p.
16. Butcher J. C. Trees and numerical methods for ordinary differential equations // Numer. Algor. – 2010. – **53**, No. 2-3. – P. 153–170.
17. Crank J., Nicolson P. A practical methods for numerical integration of solutions of partial differential equations of heat-conduction type // Proc. Camb. Philos. Soc. – 1947. – **43**, No. 1. – P. 50–67.
18. Du Fort E. C., Frankel S. P. Stability conditions in the numerical treatment of parabolic differential equations // Math. Tables and other Aids to Computation (Math. Comput.). – 1953. – **7**, No. 43. – P. 135–152.
<http://www.ams.org/journals/mcom/1953-07-043/S0025-5718-1953-0059077-7/>
19. Laasonen P. Über eine Methode zur Lösung der Wärmeleitungs-gleichung // Acta Math. – 1949. – **81**, No. 1. – P. 309–317.
20. Scherer R. A necessary condition for B-stability // BIT. Numer. Math. – 1979. – **19**, No. 1. – P. 111–115.
21. Stetter H. J. Analysis of discretization methods for ordinary differential equation. – Berlin – Heidelberg – New York: Springer-Verlag, 1973. – xvi + 390 p.

**ДОСЛІДЖЕННЯ СПЕКТРАЛЬНОЇ СТІЙКОСТІ УЗАГАЛЬНЕНИХ МЕТОДІВ РУНГЕ – КУТТА
СТОСОВНО ПОЧАТКОВО-КРАЙОВИХ ЗАДАЧ ДЛЯ РІВНЯНЬ ПАРАБОЛІЧНОГО ТИПУ.
І. ЯВНІ МЕТОДИ**

Розроблено загальний алгоритм дослідження спектральної стійкості узагальнених багатостадійних методів Рунге – Кутта (МРК) різних порядків точності стосовно числового інтегрування за часом початково-крайової задачі для параболічного рівняння другого порядку. Вираз для функції спектральної стійкості отримано в альтернативних формах: на основі матричних співвідношень або в детермінантному вигляді. Досліджено конкретну реалізацію різних явних узагальнених МРК і їх спектральну стійкість. Показано, що всі явні узагальнені МРК мають властивість умовної спектральної стійкості, а також умовної монотонності числового розв'язку за часом, порушення якої призводить до виникнення помилкових осциляцій наближеного розв'язку. Функція стійкості для цих методів є поліноміальною. Продемонстровано, що у випадку використання двостадійних явних узагальнених МРК отримуються схеми типу предиктор-коректор, а у випадку задачі нестационарної одновимірної теплопровідності на основі одностадійного узагальненого МРК отримується умовно стійка класична двошарова явна скінченно-різницева схема на чотирьохточковому шаблоні. Виявлено, що серед усіх досліджених явних узагальнених МРК найслабшу умову спектральної стійкості має п'ятистадійний узагальнений метод Рунге – Кутта – Мерсона.

**STUDY OF THE SPECTRAL STABILITY OF GENERALIZED RUNGE – KUTTA METHODS APPLIED
TO INITIAL-BOUNDARY VALUE PROBLEMS FOR EQUATIONS OF PARABOLIC TYPE.
I. EXPLICIT METHODS**

General algorithm to study the spectral stability of the generalized multi-stage Runge – Kutta methods (RK methods) of different orders of accuracy for numerical time integration of initial-boundary value problem for parabolic equation of second order is developed. The expression for the function of the spectral stability is obtained in two alternative forms: on the basis of the matrix ratios and in determinant form. A specific implementation of the different generalized explicit RK methods and their spectral stability are investigated. It is shown that all the explicit generalized RK methods have property of conditional spectral stability as well as the property of conditional monotonicity of the numerical solution in time, the violation of which leads to the occurrence of false oscillations of the approximate solution. The stability function for these methods is polynomial. It is shown that in the case of two-stage generalized explicit RK methods the schemes of predictor-corrector type are obtained. The classical two-layer conditionally stable explicit finite-difference scheme on the four-point pattern is obtained in the case of the one-dimensional nonstationary heat conduction problem on the basis of one-stage generalized RK method. It is revealed that the five-stage generalized method Runge – Kutta – Merson has the least weak spectral stability condition in comparison with all investigated explicit generalized RK methods.

Ин-т теорет. и прикл. механики
им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия

Получено
29.01.16