А. П. Янковский

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

Рассмотрены конкретные реализации разных неявных обобщенных методов Рунге – Кутта (МРК) применительно к численному интегрированию по времени начально-краевой задачи для параболического уравнения второго порядка и исследована их спектральная устойчивость. Показано, что все неявные обобщенные МРК безусловно спектрально устойчивы, но некоторые из них обладают свойством условной монотонности численного решения по времени. Функции спектральной устойчивости неявных обобщенных МРК являются рациональными. Проведено сравнение аналитического решения задачи нестационарной одномерной теплопроводности с ее численными решениями, полученными разными неявными обобщенными МРК. Продемонстрировано, что в этом случае применение одностадийных методов Радо с последующей дискретизацией задачи по пространственной переменной приводит к классической конечноразностной схеме с опережением (схеме Лаасонена), а использование одностадийного метода Гаусса – Лежандра – к шеститочечной симметричной схеме (схеме Кранка – Николсона). Показано, что диагонально неявные обобщенные методы Нёрсетта и Барриджа реализуются примерно так же, как и одностадийные методы Радо и Гаусса – Лежандра, но имеют точность по временному шагу на один – три порядка большую. На основе сопоставления численных и аналитических решений установлено, что для получения практически пригодных численных решений без какихлибо ограничений на шаг по времени целесообразно использовать одно- и трехстадийные обобщенные методы Радо или двух- и четырехстадийные методы Лобатто IIIĆ. Все остальные явные и неявные обобщенные МРК требуют введения ограничений на шаг по времени.

Введение. В работе [9] был разработан общий алгоритм исследования спектральной устойчивости обобщенных многостадийных методов Рунге – Кутта (МРК) применительно к численному интегрированию по времени начально-краевой задачи для параболического уравнения второго порядка, рассмотрены некоторые конкретные реализации явных обобщенных МРК и исследованы условия их спектральной устойчивости. Настоящая работа посвящена изучению особенностей конкретных реализаций некоторых неявных обобщенных МРК применительно к решению указанной проблемы и обсуждению результатов расчетов задачи нестационарной одномерной теплопроводности (диффузии), полученных численно этими методами.

1. Особенности реализации некоторых неявных обобщенных МРК. Простейшая неявная схема численного интегрирования начально-краевой задачи для уравнения $(1)^1$ получается на базе одностадийных (s = 1) методов Радо IA и Радо IIA (далее, как и в [4], для краткости будем говорить: «воспользуемся таким-то методом», используя названия, принятые в [2], и коэффициенты соответствующей этому методу матрицы Бутчера) – неявного метода Эйлера, имеющего точность $O(\tau)$. Уравнения (5), (6) при этом принимают вид

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \tau L(Y_{1}(\mathbf{x})),$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \tau L(Y_{1}(\mathbf{x})), \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots,$$
(55)

откуда следует

102 ISSN 0130-9420. Мат. методи та фіз.-мех. поля. 2016. - 59, № 3. - С. 102-119.

¹ В настоящем исследовании для удобства изложения продолжается сквозная нумерация формул, начатая в [9].

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^n(\mathbf{x}) + \tau L(y^{n+1}(\mathbf{x})), \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots.$$
(56)

Исследование спектральной устойчивости схемы (55) (или (56)) по алгоритму (8)-(16) приводит к функции устойчивости следующего вида:

$$R(\eta) = (1 + \eta)^{-1}, \qquad \eta = \tau \lambda^2 > 0.$$
 (57)

Из соотношения (57) вытекает, что при $\eta > 0$ выполняются неравенства (20), т. е. схема (55) (или (56)) безусловно устойчива и обладает свойством безусловной монотонности.

Если оператор $L(\bullet)$ имеет вид (28) и аппроксимируется соотношением (31) на равномерной сетке (30), то для сеточной функции (29) на основании (56) получим неявную конечноразностную схему

$$\frac{\tau}{h^2} (y_{i+1}^{n+1} - 2y_i^{n+1} + y_{i-1}^{n+1}) - y_i^{n+1} = -y_i^n, \quad 2 \le i \le N - 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$
(58)

которая является схемой Лаасонена [12] (схемой с опережением [7]) и реализуется на четырехточечном шаблоне, изображенном на рис. 1*а.* Согласно (57) схема (58) абсолютно устойчива и безусловно монотонна (что совпадает с результатами, полученными ранее другим путем в [6, 7]) и имеет порядок точности $O(\tau + h^2)$ [6, 7].



Рис. 1. Шаблоны для двухслойных неявных конечноразностных схем: *a*) – Лаасонена (схема с опережением); *б*) – Кранка – Николсона.

Двухстадийный (s = 2) обобщенный метод Радо IA (третий порядок точности по τ) реализуется следующим образом (см. (5)–(7) и [2]):

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{4} [L(Y_{1}) - L(Y_{2})],$$

$$Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{12} [3L(Y_{1}) + 5L(Y_{2})],$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{4} [L(Y_{1}) + 3L(Y_{4})], \quad \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$
(59)

Исследование спектральной устойчивости схемы (59) по алгоритму (8)-(16) или (17)-(19) приводит к функции устойчивости

$$R(\eta) = (6 - 2\eta)(6 + 4\eta + \eta^2)^{-1}, \qquad \eta = \tau\lambda^2 > 0.$$
(60)

Анализ поведения функции (60) при $\eta > 0$ показывает, что |R| < 1, т. е. схема (59) безусловно устойчива, но неравенства (20) выполняются лишь при

$$0 < R < 1:$$
 $0 < \eta < 3,$ $\eta = \tau \lambda^2,$ (61)

т. е. схема (59) обладает свойством условной монотонности.

Двухстадийный обобщенный метод Радо IIA (также имеющий точность $O(\tau^3)$) приводит к уравнениям

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{12} [5L(Y_{1}) - L(Y_{2})],$$

$$Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{4} [3L(Y_{1}) + L(Y_{2})],$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{4} [3L(Y_{1}) + L(Y_{4})] \implies y^{n+1}(\mathbf{x}) = Y_{2}(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots.$$
(62)

Исследование спектральной устойчивости схемы (62) показало, что ее функция устойчивости определяется равенством (60), т. е. схема (62) безусловно устойчива, но обладает свойством условной монотонности, которое определяется неравенствами (61).

Численное исследование по алгоритму (5)–(16) спектральной устойчивости трехстадийных (s = 3) обобщенных методов Радо IA и Радо IIA (пятый порядок точности по τ) показало, что при $\eta > 0$ ($\eta = \tau \lambda^2$) выполняются неравенства (20), т. е. оба метода безусловно устойчивы и обладают свойством безусловной монотонности. (Конкретные реализации этих методов применительно к уравнению (1) здесь не приводятся, так как коэффициенты матрицы Бутчера для них являются достаточно громоздкими дробями, содержащими радикалы (см. (3.3.11) и (3.3.16) в [2]).)

В качестве следующего подкласса обобщенных МРК рассмотрим методы Гаусса – Лежандра. Одностадийный (s = 1) обобщенный метод Гаусса – Лежандра (метод средней точки [2], имеющий второй порядок точности по τ) приводит к таким уравнениям (см. (5)–(7)):

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2}L(Y_{1}(\mathbf{x})),$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \tau L(Y_{1}(\mathbf{x})), \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots.$$
(63)

Функция устойчивости схемы (63) имеет вид (см. (8)-(16) или (17)-(19)):

$$R(\eta) = (2 - \eta)(2 + \eta)^{-1}, \qquad \eta = \tau \lambda^2 > 0.$$
 (64)

Согласно (64) схема (63) безусловно устойчива (|R| < 1 при $\eta > 0$), но неравенства (20) выполняются лишь при

$$0 < R < 1:$$
 $0 < \eta < 2,$ $\eta = \tau \lambda^2,$ (65)

т. е. схема (63) обладает свойством условной монотонности.

Из равенств (63) следует

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} [L(y^{n}(\mathbf{x})) + L(y^{n+1}(\mathbf{x}))],$$

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} [y^{n}(\mathbf{x}) + y^{n+1}(\mathbf{x})], \quad \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots.$$
(66)

Если оператор $L(\cdot)$ в (1) имеет вид (28) и аппроксимируется соотношением (31), то из первого равенства (66) получим неявную конечноразностную схему Кранка – Николсона [11]:

$$\frac{\tau}{2h^2} \left(y_{i+1}^{n+1} - 2y_i^{n+1} + y_{i-1}^{n+1} \right) - y_i^{n+1} = -\frac{\tau}{2h^2} \left(y_{i+1}^n - 2y_i^n + y_{i-1}^n \right) - y_i^n ,$$

$$2 \le i \le N - 1 , \qquad (67)$$

которая реализуется на шеститочечном шаблоне, изображенном на рис. 16 (шеститочечная симметричная схема [7]). Согласно (64) с учетом (33) получаем, что схема (67) абсолютно устойчива и имеет порядок точности $O(\tau^2 + h^2)$ [7, 11]. На основании же (65) и (33) получаем условие монотонности схемы (67):

$$0 < R < 1: \quad 0 < \tau/h^2 < 1/2.$$
(68)

Насколько известно автору, условие монотонности (68) для схемы (67) ранее получено не было (см. [6, 7, 11]).

Двухстадийный (s = 2) обобщенный метод Гаусса – Лежандра (четвертый порядок точности по τ) применительно к уравнению (1) реализуется так (см. (5)–(7)):

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{24} \Big[6L(Y_{1}(\mathbf{x})) + (6 - 4\sqrt{3})L(Y_{2}(\mathbf{x})) \Big],$$

$$Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{24} \Big[(6 + 4\sqrt{3})L(Y_{1}(\mathbf{x})) + 6L(Y_{2}(\mathbf{x})) \Big],$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} \Big[L(Y_{1}(\mathbf{x})) + L(Y_{2}(\mathbf{x})) \Big], \quad \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots.$$
(69)

Исследование схемы (69) по алгоритму (8)-(16) или (17)-(19) приводит к функции устойчивости

$$R(\eta) = (12 - 6\eta + \eta^2)(12 + 6\eta + \eta^2)^{-1}, \qquad \eta = \tau \lambda^2 > 0.$$
(70)

Дискриминант числителя дроби в (70) равен – 12, поэтому при $\eta > 0$ для функции устойчивости (70) выполняются неравенства (20). Следовательно, схема (69) является безусловно устойчивой и обладает свойством безусловной монотонности (20).

Численное исследование по алгоритму (5)–(16) спектральной устойчивости трехстадийного (s = 3) обобщенного метода Гаусса – Лежандра (шестой порядок точности по τ) показало, что этот метод безусловно устойчив (|R| < 1 при $\eta > 0$), но обладает свойством условной монотонности, которая определяется неравенствами (см. (20))

$$0 < R < 1:$$
 $0 < \eta < 4.645,$ $\eta = \tau \lambda^2.$ (71)

Конкретная реализация этого метода здесь не приведена, так как коэффициенты матрицы Бутчера для него являются достаточно громоздкими дробями, содержащими радикалы (см. (3.3.7) в [2]).

Исследуем далее спектральную устойчивость обобщенных методов Лобатто [2] применительно к интегрированию по времени уравнения (1). Согласно (5)–(7) двухстадийный (s = 2) обобщенный метод Лобатто IIIA (второй порядок точности по τ) реализуется так:

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}), \qquad Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} [L(Y_{1}(\mathbf{x})) + L(Y_{2}(\mathbf{x}))],$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} [L(Y_{1}(\mathbf{x})) + L(Y_{2}(\mathbf{x}))] \implies y^{n+1}(\mathbf{x}) = Y_{2}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in G.$$
(72)

Систему (72) можно преобразовать к формуле трапеций (66), функция устойчивости которой имеет вид (64). Следовательно, схема (72) является безусловно устойчивой и обладает свойством условной монотонности (20), которое характеризуется неравенствами (65). Если оператор $L(\cdot)$ имеет вид (28) и аппроксимируется формулой (31), то схема (72) сводится к конечноразностной схеме Кранка – Николсона (67).

Двухстадийный обобщенный метод Лобатто IIIB (точность $O(\tau^2)$) характеризуется равенствами (см. (5)–(7))

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2}L(Y_{1}(\mathbf{x})), \qquad Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2}L(Y_{1}(\mathbf{x})),$$
$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2}[L(Y_{1}(\mathbf{x})) + L(Y_{2}(\mathbf{x}))], \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots.$$
(73)

Из первых двух равенств (73) следует $Y_2(\mathbf{x}) = Y_1(\mathbf{x})$, поэтому из (73) получается система (63), функция устойчивости которой имеет выражение (64), а условие монотонности (20) определяется неравенствами (65). Систему равенств (73), тем самым, также можно преобразовать к формуле трапеций (66).

Двухстадийный обобщенный метод Лобатто IIIC (точность $O(\tau^2)$) приводит к равенствам (см. (5)–(7) и [2])

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} [L(Y_{1}) - L(Y_{2})], \quad Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} [L(Y_{1}) + L(Y_{2})],$$

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} [L(Y_{1}) + L(Y_{2})] \implies y^{n+1}(\mathbf{x}) = Y_{2}(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots.$$
(74)

Исследование спектральной устойчивости схемы (74) по алгоритму (8)-(16) или (17)-(19) показало, что функция устойчивости в этом случае имеет вид

$$R(\eta) = 2(2 + 2\eta + \eta^2)^{-1}, \qquad \eta = \tau \lambda^2 > 0.$$
(75)

Из равенства (75) следует, что при $\eta > 0$ выполняются неравенства (20), т. е. схема (74) является безусловно устойчивой и обладает свойством безусловной монотонности.

Таким образом, из всех рассмотренных выше обобщенных МРК второго порядка точности по т как явных (см. (36), (38), (39)), так и неявных (см. (63), (72)-(74), (64), (65)), согласно (75), только двухстадийный обобщенный метод Лобатто IIIC обладает свойством безусловной монотонности (20).

Рассмотрим теперь трехстадийные (s = 3) обобщенные методы Лобатто, имеющие четвертый порядок точности по τ [2]. Трехстадийный обобщенный метод Лобатто IIIA, основанный на формуле Симпсона [1, 2], реализуется так:

$$\begin{aligned} Y_{1}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}), \qquad Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{24} \big[5L(Y_{1}) + 8L(Y_{2}) - L(Y_{3}) \big], \\ Y_{3}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \big[L(Y_{1}) + 4L(Y_{2}) + L(Y_{3}) \big], \\ y^{n+1}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \big[L(Y_{1}) + 4L(Y_{2}) + L(Y_{3}) \big] \implies y^{n+1}(\mathbf{x}) = Y_{3}(\mathbf{x}), \\ \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots. \end{aligned}$$
(76)

Исследование спектральной устойчивости схемы (76) по алгоритму (8)-(16) или (17)-(19) приводит к функции устойчивости (70). Следовательно, схема (76) безусловно устойчива и обладает свойством безусловной монотонности (20).

Трехстадийный обобщенный метод Лобатто IIIВ характеризуется уравнениями

$$\begin{aligned} Y_{1}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \Big[L(Y_{1}) - L(Y_{2}) \Big], \quad Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \Big[L(Y_{1}) + 2L(Y_{2}) \Big], \\ Y_{3}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \Big[L(Y_{1}) + 5L(Y_{2}) \Big], \\ y^{n+1}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \Big[L(Y_{1}) + 4L(Y_{2}) + L(Y_{3}) \Big]. \end{aligned}$$
(77)

Функция устойчивости, определенная по алгоритму (8)-(16) с учетом системы равенств (77), также имеет вид (70), поэтому схема (77) является безусловно устойчивой и обладает свойством безусловной монотонности (20).

Трехстадийный обобщенный метод Лобатто IIIC, согласно (5)-(7) и [2], задается уравнениями

$$\begin{split} Y_{1}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \Big[L(Y_{1}) - 2L(Y_{2}) + L(Y_{3}) \Big], \\ Y_{2}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{12} \Big[2L(Y_{1}) + 5L(Y_{2}) - L(Y_{3}) \Big], \\ Y_{3}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \Big[L(Y_{1}) + 4L(Y_{2}) + L(Y_{3}) \Big], \\ y^{n+1}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{6} \Big[L(Y_{1}) + 4L(Y_{2}) + L(Y_{3}) \Big] \Rightarrow y^{n+1}(\mathbf{x}) = Y_{3}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in G. \end{split}$$
(78)

Функция устойчивости схемы (78), определенная на основе соотношений (8)-(16) или (17)-(19), имеет вид

$$R(\eta) = (24 - 6\eta)(24 + 18\eta + 6\eta^2 + \eta^3)^{-1}, \qquad \eta = \tau\lambda^2 > 0.$$
(79)

Анализ поведения функции (79) при $\eta > 0$ показывает, что схема (78) безусловно устойчива (|R| < 1), но неравенства (20) выполняются лишь при

$$0 < R < 1$$
: $0 < \eta < 4$, $\eta = \tau \lambda^2$, (80)

т. е. схема (78) обладает свойством условной монотонности.

Численное исследование спектральной устойчивости по алгоритму (5)– (16) четырехстадийных (s = 4) обобщенных методов Лобатто IIIA и Лобатто IIIB (шестой порядок точности по τ) показало, что эти методы безусловно устойчивы (|R| < 1 при $\eta > 0$), но обладают свойством условной монотонности (20), которая определяется неравенствами (71). Исследование же устойчивости четырехстадийного обобщенного метода Лобатто IIIC (точность $O(\tau^6)$) позволило установить, что этот метод является безусловно устойчивым и обладает свойством безусловной монотонности (20). Конкретная реализация этих методов здесь не приводится, так как коэффициенты матрицы Бутчера для них являются достаточно громоздкими дробями, содержащими радикалы (см. (3.3.21), (3.3.24), (3.3.27) в [2]).

Среди неявных обобщенных МРК особое место занимают диагональные методы, так как для них ненулевые компоненты матрицы **A** (см. (5)) расположены на главной диагонали и под ней, что позволяет обращать операторы $L(Y_m(\mathbf{x}))$ в системе (5) последовательно на каждой m-й стадии. Это существенно упрощает процедуру интегрирования системы (5) по сравнению с другими многостадийными неявными обобщенными МРК. Продемонстрируем это, но сначала для удобства дальнейшего сравнения преобразуем некоторые полученные выше уравнения.

Как было показано ранее, одностадийные методы Радо IA и Радо IIA приводят к уравнению (56), которое перепишем в следующем виде:

$$L(y^{n+1}(\mathbf{x})) - \frac{1}{\tau} y^{n+1}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\tau} y^n(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots,$$
(81)

где в момент времени t_{n+1} (см. (4)) правая часть — известная функция. Если оператор $L(\cdot)$ является оператором Лапласа (в частности, имеет вид (28)), то оператор, стоящий в левой части уравнения (81), является оператором Гельмгольца [8].

Таким образом, для численного интегрирования по времени начальнокраевой задачи для уравнения (1) одностадийными методами Радо IA и Радо IIA в каждый момент времени необходимо решить граничную задачу для уравнения (81) (в частности, это может быть двухточечная граничная задача для схемы Лаасонена (58)).

Покажем, что к уравнению, качественно аналогичному (81), приводит и одностадийный обобщенный метод Гаусса – Лежандра (63), а также двухстадийные обобщенные методы Лобатто IIIA (72) и Лобатто IIIB (73). Действительно, как было показано выше, эти методы в каждый момент времени t_{n+1} сводятся к уравнению (66) (формула трапеций). Преобразуем (66)

так, чтобы исключить из него оператор $L(y^n(\mathbf{x}))$. С этой целью введем в рассмотрение функции

$$F^{n}(\mathbf{x}) = L(y^{n}(\mathbf{x})) - \frac{2}{\tau}y^{n}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$
(82)

Уравнение (66) с учетом (82) примет вид

$$L(y^{n+1}(\mathbf{x})) - \frac{2}{\tau} y^{n+1}(\mathbf{x}) = F^{n+1}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots,$$
(83)

где правая часть, согласно (66), (82), вычисляется по рекуррентной формуле

$$F^{n+1}(\mathbf{x}) = -F^n(\mathbf{x}) - \frac{4}{\tau} y^n(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$
 (84)

На основании (82) в начальный момент времени $t=t_0$ (при n=0) имеем

$$F^{0}(\mathbf{x}) = L(y^{0}(\mathbf{x})) - \frac{2}{\tau} y^{0}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in G,$$
(85)

где функция $y^0(\mathbf{x})$ известна из начального условия, задаваемого для однозначного интегрирования уравнения (1).

Согласно формулам (84), (85), в момент времени t_{n+1} правая часть в уравнении (83) — известная функция. При соответствующих переобозначениях уравнение (83) формально совпадает с (81), но уравнение (83) приводит к численному решению, точность которого на порядок по τ больше точности решения уравнения (81).

Таким образом, при реализации одностадийных обобщенных методов Радо и Гаусса – Лежандра, а также двухстадийных обобщенных методов Лобатто IIIА и Лобатто IIIВ в каждый момент времени необходимо проинтегрировать граничную задачу лишь для одного дифференциального уравнения (81) или (83) с учетом (84), (85). Реализация же других неявных обобщенных МРК связана с необходимостью решения в момент времен
и t_{n+1} граничных задач для систем связанных дифференциальных уравнений относительно функций $Y_m(\mathbf{x}), m = 1, ..., s$, (см. (59), (62), (69), (74), (76)–(78)), что существенно усложняет алгоритм численного решения начально-краевой задачи для уравнения (1) этими методами по сравнению с уравнениями (81) или (83). Как уже отмечалось, исключение составляют лишь многостадийные диагонально неявные обобщенные МРК, реализация которых приводит к необходимости решения на каждой стадии граничной задачи лишь для одного уравнения, аналогичного (81) или (83). При этом точность диагональных методов может быть выше точности схем (81) или (83)-(85). Продемонстрируем это.

Для двухстадийного (s = 2) диагонально неявного метода (метода Нёрсетта [13]) получаем уравнения (см. (5)-(7) и [2])

$$Y_{1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \tau \gamma L(Y_{1}(\mathbf{x})),$$

$$Y_{2}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \tau (1 - 2\gamma) L(Y_{1}(\mathbf{x})) + \tau \gamma L(Y_{2}(\mathbf{x})),$$
(86)

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} \left[L(Y_{1}(\mathbf{x})) + L(Y_{2}(\mathbf{x})) \right], \quad \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$
(87)

где γ — некоторая постоянная. При $\gamma = 0.5 + \sqrt{3}/6$ получаем точность третьего порядка по τ , при остальных значениях γ — второго [2, 13]. Из равенств (86) следует

$$L(Y_1(\mathbf{x})) - \frac{1}{\tau \gamma} Y_1(\mathbf{x}) = F_1^{n+1}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in G,$$
(88)

$$L(Y_2(\mathbf{x})) - \frac{1}{\tau \gamma} Y_2(\mathbf{x}) = F_2^{n+1}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in G,$$
(89)

где

$$F_1^{n+1}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\tau\gamma} y^n(\mathbf{x}), \qquad F_2^{n+1}(\mathbf{x}) = F_1^{n+1}(\mathbf{x}) - \frac{1-2\gamma}{\tau\gamma^2} \Big[Y_1(\mathbf{x}) - y^n(\mathbf{x}) \Big].$$
(90)

Исключив из (87) за счет (88), (89) операторы L(•), получим

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau}{2} \left[F_{1}^{n+1} + F_{2}^{n+1} \right] - \frac{1}{2\gamma} \left[Y_{1}(\mathbf{x}) + Y_{2}(\mathbf{x}) \right],$$

$$\mathbf{x} \in G, \qquad n = 0, 1, 2, \dots.$$
(91)

Следовательно, при использовании обобщенного метода Нёрсетта в каждый момент времени необходимо последовательно решать соответствующую граничную задачу для двух дифференциальных уравнений (88), (89). После решения граничной задачи для уравнения (88) по второй формуле (90) определяется правая часть уравнения (89), а после интегрирования уравнения (89) по формуле (91) вычисляется приближенное решение уравнения (1) в момент времени t_{n+1} . Дифференциальные уравнения (88), (89) при этом формально совпадают с уравнением (81) или (83), поэтому не будем останавливаться на их обсуждении более подробно.

Таким образом, на каждом шаге по времени вычислительные затраты при реализации метода Нёрсетта примерно вдвое больше, чем для схемы с опережением (81) (в частности, схемы Лаасонена (58)) или метода средней точки (83)-(85) (в частности, схемы Кранка – Николсона (67)). Если же при использовании метода Нёрсетта шаг по времени взять вдвое большим, чем в схеме с опережением и в методе средней точки, то вычислительные затраты в этих трех методах станут примерно одинаковыми, однако при $\gamma = 0.5 + \sqrt{3}/6$ метод Нёрсетта имеет на порядок по т большую точность, чем метод средней точки (83)-(85), и на два порядка по т большую точность, чем схема с опережением (81).

Исследование спектральной устойчивости схемы (86), (87) (или, что то же самое, схемы (88)-(91)) по алгоритму (5)-(16) или (17)-(19) привело к функции устойчивости следующего вида:

$$R(\eta) = \frac{1}{2} \left(2 - 2(1 - 2\gamma)\eta + (1 - 4\gamma + 2\gamma^2)\eta^2 \right) (1 + \gamma\eta)^{-2}, \qquad \eta = \tau\lambda^2 > 0.$$
 (92)

Анализ поведения функции (92) в случае $\gamma = 0.5 + \sqrt{3}/6$ (третий порядок точности по τ) показал, что при $\eta > 0$ она монотонно убывает от 1.0 до – 0.732 при $\eta \to \infty$, т. е. |R| < 1, и схема (86), (87) или (88)–(91) является безусловно устойчивой, условие же её монотонности (20) определяется неравенствами

$$0 < R < 1:$$
 $0 < \eta < 2.245,$ $\eta = \tau \lambda^2.$ (93)

Таким образом, обобщенный метод Нёрсетта применительно к уравнению (1) является безусловно устойчивым и обладает свойством условной монотонности, причем условие его монотонности (93) является менее слабым, чем у метода средней точки (см. (65)).

При использовании трехстадийного (*s* = 3) диагонально неявного метода (метода Барриджа [10]) из системы (5), (6) получим уравнения [2, 10]

$$\begin{split} \mathbf{Y}_{1}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \tau \gamma L\big(\mathbf{Y}_{1}(\mathbf{x})\big), \\ \mathbf{Y}_{2}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \tau (0.5 - \gamma) L\big(\mathbf{Y}_{1}(\mathbf{x})\big) + \tau \gamma L\big(\mathbf{Y}_{2}(\mathbf{x})\big), \\ \mathbf{Y}_{3}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + 2\tau \gamma L\big(\mathbf{Y}_{1}(\mathbf{x})\big) + \tau (1 - 4\gamma) L\big(\mathbf{Y}_{2}(\mathbf{x})\big) + \tau \gamma L\big(\mathbf{Y}_{3}(\mathbf{x})\big), \\ y^{n+1}(\mathbf{x}) &= y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\tau \beta}{3}\big(\mathbf{Y}_{1}(\mathbf{x})\big) + \tau (1 - \beta) L\big(\mathbf{Y}_{2}(\mathbf{x})\big) + \frac{\tau \beta}{3} L\big(\mathbf{Y}_{3}(\mathbf{x})\big), \\ \mathbf{x} \in G. \end{split}$$

$$(94)$$

откуда по аналогии с (88)-(91) следует

$$L(Y_i(\mathbf{x})) - \frac{1}{\tau \gamma} Y_i(\mathbf{x}) = F_i^{n+1}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in G, \qquad i = 1, 2, 3,$$
(95)

$$y^{n+1}(\mathbf{x}) = y^{n}(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{3\gamma} \Big[\tau \gamma \Big(F_{1}^{n+1}(\mathbf{x}) + F_{3}^{n+1}(\mathbf{x}) \Big) + Y_{1}(\mathbf{x}) + Y_{3}(\mathbf{x}) \Big] + \frac{1-\beta}{\gamma} \Big[\tau \gamma F_{2}^{n+1}(\mathbf{x}) + Y_{2}(\mathbf{x}) \Big], \quad \mathbf{x} \in G, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$
(96)

где

$$F_{1}^{n+1}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\tau\gamma} y^{n}(\mathbf{x}), \quad F_{2}^{n+1}(\mathbf{x}) = F_{1}^{n+1}(\mathbf{x}) - \frac{1-2\gamma}{2\tau\gamma^{2}} [\tau\gamma F_{1}^{n+1}(\mathbf{x}) + Y_{1}(\mathbf{x})],$$

$$F_{3}^{n+1}(\mathbf{x}) = F_{1}^{n+1}(\mathbf{x}) - \frac{2}{\tau\gamma} [\tau\gamma F_{1}^{n+1} + Y_{1}] - \frac{1-4\gamma}{\tau\gamma^{2}} [\tau\gamma F_{2}^{n+1} + Y_{2}],$$

$$\beta = \frac{1}{12(0.5-\gamma)^{2}}, \quad (97)$$

γ – по-прежнему некоторая постоянная. При

$$\gamma = \frac{1}{2} + \frac{1}{3}\sqrt{3}\cos\frac{\pi}{18}$$
(98)

метод (95), (96) имеет четвертый порядок точности по τ, а при других значениях γ – третий [2, 10].

Следовательно, при использовании метода Барриджа на каждом шаге по времени необходимо последовательно решить соответствующую граничную задачу для трех дифференциальных уравнений (95). После решения граничной задачи для первого (i = 1) из уравнений (95) по второй из формул (97) определяется правая часть для второго (i = 2) из уравнений (95). Если граничная задача для этого уравнения проинтегрирована, то по третьей из формул (97) вычисляется правая часть для третьего (i = 3) из уравнений (95), после интегрирования которого по формуле (96) можно определить решение уравнения (1) в момент времени t_{n+1} . (Дифференциальные уравнения (95) формально полностью совпадают с уравнениями (81), (83), (88), (89), поэтому не будем обсуждать их более подробно.)

Таким образом, в каждый момент времени вычислительные затраты при реализации обобщенного метода Барриджа примерно втрое больше, чем для схемы с опережением (81) или метода средней точки (83)-(85). Если же при использовании метода Барриджа шаг по времени т взять втрое большим, чем в схеме с опережением и в методе средней точки, то вычислительные затраты в этих трех методах станут примерно одинаковыми, однако при выполнении равенства (98) метод Барриджа имеет на три порядка по т большую точность, чем схема с опережением (81), и на два порядка большую точность, чем метод средней точки (83)-(85).

Исследование спектральной устойчивости схемы (94) (или, что то же самое, схемы (95)–(97)) по алгоритму (5)–(16) или (17)–(19) приводит к функции устойчивости следующего вида:

$$R(\eta) = (1 + \gamma \eta)^{-3} \left[1 - (1 - 3\gamma)\eta + \left(\frac{1}{2} - 3\gamma + 3\gamma^2\right) \eta^2 - \left(\frac{1}{6} - \frac{3}{2}\gamma + 3\gamma^2 - \gamma^3\right) \eta^3 \right],$$

$$\eta = \tau \lambda^2 > 0.$$
(99)

Анализ поведения функции (99) в случае (98) (четвертый порядок точности по τ) показал, что при $\eta > 0$ она монотонно убывает от 1.0 до – 0.6304 при $\eta \to \infty$, т. е. |R| < 1, и схема (94) (или (95)–(97)) является безусловно устойчивой; условие же её монотонности (20) определяется неравенствами

 $0 < R < 1: \qquad 0 < \eta < 2.375, \qquad \eta = \tau \lambda^2. \tag{100}$

Таким образом, обобщенный метод Барриджа применительно к уравнению (1) является безусловно устойчивым и обладает свойством условной монотонности, причем в случае (98) условие его монотонности (100) является менее слабым, чем у метода средней точки (см. (65)) и метода Нёрсетта (см. (93)).

Сопоставление неравенств (27), (39), (46), (50), (54), (61), (65), (71), (80), (93), (100) показывает, что из всех явных и неявных условно монотонных обобщенных МРК наименее слабым условием монотонности (20) обладают трехстадийный метод Гаусса – Лежандра и четырехстадийные методы Лобатто IIIA и Лобатто IIIB (см. неравенства (71)), имеющие шестой порядок точности по т. Однако при использовании этих методов на каждом шаге по времени необходимо интегрировать граничную задачу для системы (5), состоящей из трех связанных между собой дифференциальных уравнений, что значительно усложняет практическую реализацию этих методов.

Следующими за (71) по степени усиления условия монотонности идут неравенства (80), характеризующие монотонность трехстадийного метода Лобатто IIIC (78), имеющего четвертый порядок точности по т. Однако при использовании этого метода в каждый момент времени также необходимо интегрировать граничную задачу для системы (5), состоящей из трех связанных уравнений. В то же время двухстадийный метод Гаусса – Лежандра (69) и трехстадийные методы Лобатто IIIA (76) и Лобатто IIIB (77), также имеющие точность $O(\tau^4)$, в каждый момент времени требуют интегрирования граничной задачи для системы (5), состоящей только из двух связанных уравнений, т. е. эти методы реализуются проще трехстадийного метода Лобатто IIIC, имеют ту же точность, но при этом обладают свойством безусловной монотонности (см. функцию устойчивости (70)). В связи с этим из всех перечисленных обобщенных МРК четвертого порядка точности по τ предпочтение следует отдавать схемам (69), (76), (77).

Следующими за (71) и (80) по степени усиления условия монотонности выступают неравенства (61), характеризующие монотонность двухстадийных методов Радо IA (59) и Радо IIA (62), имеющих третий порядок точности по τ . Однако при использовании этих методов в каждый момент времени необходимо интегрировать граничную задачу для системы (5), состоящей из двух связанных уравнений, т. е. сложность реализации этих методов примерно такая же, что и обобщенных МРК (69), (76) и (77), но последние имеют на порядок по τ большую точность и являются безусловно монотонными, поэтому схемам (69), (76) и (77) следует отдавать предпочтение перед двухстадийными обобщенными методами Радо (59), (62).

Следующими за (71), (80) и (61) по степени усиления условия монотонности идут неравенства (50), характеризующие устойчивость и монотонность четырехстадийных явных обобщенных МРК (например, схемы (47)), имеющих точности $O(\tau^4)$. Ограничения (50) являются менее слабыми, чем условия монотонности для диагонально неявных методов (см. (93), (100)), имеющих такую же или даже меньшую точность.

2. Обсуждение результатов расчетов. Для исследования особенностей численных решений начально-краевой задачи для уравнения (1), полученных на основе разработанных выше обобщенных МРК, рассмотрим задачу нестационарной одномерной теплопроводности, описываемую уравнением (1) с учетом (28) ($|x| \le 1$) при граничных условиях $y(t,\pm 1) = 0$ ($t \ge 0$) и при начальном условии

$$y(t,x) = y^0(x) = a(1-x^{2\ell}), \qquad t = t_0 = 0, \qquad |x| \le 1,$$
 (101)

где *а* – некоторая константа; *l* – некоторое натуральное число.

Согласно методу разделения переменных [3, 8], аналитическое решение такой начально-краевой задачи имеет вид

$$y(t,x) = \sum_{m=0}^{M} z_m^0 \exp\left(-\lambda_m^2 t\right) W_m(x), \quad t \ge 0, \quad |x| \le 1, \quad M \to \infty, \quad (102)$$

где

$$W_m(x) = \cos(\lambda_m x), \qquad \lambda_m = \frac{\pi}{2}(2m+1), \qquad m = 0, 1, 2, \dots$$
 (103)

На основании (8), (15) с учетом (103) в момент времен
и t_n все исследованные выше методы дают численно-аналитическое решение рассматриваемой начально-краевой задачи в виде

$$y^{n}(x) = \sum_{m=0}^{M} z_{m}^{n} W_{m}(x), \qquad |x| \le 1, \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$
 (104)

При переходе к следующему моменту времени t_{n+1} (см. (4)) коэффициенты z_m^n в разложении (104) вычисляются по формуле (15), где $\eta = \eta_m = \tau \lambda_m^2 > 0$ (см. (103)). В начальный момент времени $t = t_0 = 0$ на основании соотношений (101), (104) имеем [5]

$$z_m^0 = \frac{2a}{\lambda_m} \left[(-1)^m - \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^{m+k} \frac{(2\ell)!}{(2\ell - 2k)!} \right], \qquad m = 0, 1, 2, \dots, M.$$
(105)

На рис. 2 изображены зависимости $y^n(x)$, рассчитанные разными неявными обобщенными МРК на базе соотношений (15), (103)-(105) в моменты времени $t = t_n = n\tau_*$, n = 0, 1, 2, 3. Номера кривых на рис. 2 соответствуют номеру шага по времени п. Штриховые кривые определены согласно аналитическому решению (102), (103), (105) исследуемой задачи в указанные моменты времени t_n , а сплошные линии, номера которых помечены штрихом, характеризуют численно-аналитическое решение (103)-(105), (15) при использовании соответствующего обобщенного МРК. На основании (101), (103) получаем, что в фиксированные моменты времени t_n точное (102) и приближенное (104) решения являются симметричными функциями пространственной переменной x, поэтому на рис. 2 изображены лишь правые половины зависимостей $y^n(x)$, $0 \le x \le 1$. Приведенные на рис. 2 кривые определяют, кроме того, решения задачи нестационарной одномерной теплопроводности стержня, когда левый его конец (x = 0) теплоизолирован $(\partial y/\partial x = 0)$, а на правом конце (x = 1) задана температура y = 0 $(t \ge 0)$. В расчетах принято: a = 1, $\ell = 9$, M = 50, $\tau = \tau_* = 0.1$. При этом графики аналитического решения (102) и численно-аналитических решений (103), (104) при n=0 (т. е. при коэффициентах (105)) визуально не отличаются от графика начального условия (101), поэтому на рис. 2 сплошные кривые с номером θ' не приведены, так как они не отличаются от штриховых кривых с номером 0.

Сплошные кривые на рис. 2*a* определены на основе одностадийных обобщенных методов Радо (55) или (56) (функция устойчивости при этом характеризуется равенством (57)). Так как эти методы имеют только первый порядок точности по τ , то при достаточно грубом заданном шаге по времени $\tau = \tau_* = 0.1$ приближенное решение (см. сплошные кривые 1'-3') существенно отличается от аналитического решения (см. штриховые линии 1-3). Если оператор (28) в рассматриваемой задаче аппроксимировать соотношением (31), то придем к схеме Лаасонена (58). При шаге по пространственной переменной h = 0.01 (см. (30)) численное решение по схеме (58) приводит к кривым, которые визуально не отличаются от сплошных линий 1'-3', изображенных на рис. 2*a*. Дальнейшее уточнение численного решения возможно лишь за счет уменьшения шага по времени τ .

Сплошные кривые на рис. 2б рассчитаны на основе одностадийного обобщенного метода Гаусса – Лежандра (63) (функция устойчивости имеет вид (64)). Кривые 1'-3' характеризуют также решения, получаемые двухстадийными обобщенными методами Лобатто IIIA (72) и Лобатто IIIB (73). Если оператор (28) аппроксимируется равенством (31), то все эти методы приводят к схеме Кранка – Николсона (67). При шаге h = 0.01 численное решение по схеме (67) приводит к кривым, которые визуально не отличаются от сплошных линий на рис. 2б. Несмотря на то, что схема Кранка -Николсона (67) имеет на порядок по т большую точность, чем схема Лаасонена (58) [6], сплошные кривые 1'-3' на рис. 2б хуже согласуются с точным решением (см. штриховые линии 1-3), чем на рис. 2а. Объясняется это тем, что схема Кранка – Николсона, как абсолютно устойчивая, обладает свойством условной монотонности (20). При заданных значениях $\tau = \tau_* = 0.1$, h = 0.01 условие монотонности не выполняется (см. (65) с учетом (33)), поэтому решение, полученное по схеме (67), обладает ложными осцилляциями в окрестности граничных точек $x = \pm 1$ (см. правые участки кривых 1'-3' на рис. 26). Схема же Лаасонена (58) обладает свойством



безусловной монотонности (см. функцию устойчивости (57)), поэтому приближенное решение на рис. 2a (см. кривые 1'-3') качественно лучше согласуется с точным решением (см. штриховые линии 1-3), чем на рис. 26.

Рис. 2. Зависимости температуры от продольной координаты в дискретные моменты времени, полученные в задаче нестационарной одномерной теплопроводности аналитически (штриховые кривые) и численно (сплошные линии) разными неявными обобщенными МРК: *a*) – одностадийными методами Радо;

б) – одностадийным методом Гаусса – Лежандра; *в*) – методом Барриджа; *г*) – двухстадийным методом Гаусса – Лежандра; *д*) – двухстадийным методом Гаусса – Лежандра; *д*) – двухстадийным методом Гаусса – Лежандра;

Как было показано в предыдущем разделе, диагонально неявные обобщенные МРК реализуются практически так же, как одностадийный обобщенный метод Гаусса – Лежандра, но имеют большую точность по τ , поэтому на рис. 2*в* для сравнения приведены результаты расчетов, полученные обобщенным методом Барриджа (95)–(97) при условии (98) (порядок точности $O(\tau^4)$). Так как метод Барриджа обладает свойством условной монотонности (см. (100)), то при заданном значении $\tau = \tau_*$ численное решение, полученное этим методом, также обладает свойством ложной осцилляции (см. правые участки кривых 1'-3' на рис. 2e), хотя амплитуды этих осцилляций существенно меньше, чем на рис. 26, что является следствием более высокой точности метода Барриджа и менее слабым условием монотонности (ср. (100) с (65)). Однако, как уже отмечалось, при одинаковых шагах по времени т реализация трехстадийного метода Барриджа (95) требует примерно втрое больших вычислительных затрат, чем реализация одностадийного метода Гаусса – Лежандра (63), поэтому был проведен дополнительный расчет по схеме (63) с шагом $\tau = \tau_*/3$. Кривые 1" на рис. 26 и рис. 26 характеризуют это приближенное решение в момент времени $t = \tau_* = 0.1$. Сравнение кривых 1' и 1" на рис. 2в показывает, что примерно при одинаковых вычислительных затратах кривая 1" количественно лучше согласуется с точным решение (линия 1), чем кривая 1'. И это несмотря на то, что линия 1' была получена методом Барриджа, который при условии (98) имеет точность на два порядка по т большую, чем одностадийный метод Гаусса – Лежандра. Сравнение же кривых 1' и 1" на рис. 2б свидетельствует о том, что уменьшение шага по времени т приводит к существенному уточнению численного решения, определенного одностадийным методом Гаусса – Лежандра. Однако и при τ = τ_{*}/3 условие монотонности (65) для этого метода не выполняется, поэтому приближенное решение по-прежнему обладает свойством ложной осцилляции (см. правые участки кривых 1" на рис. 26 и рис. 26), хотя амплитуда этих осцилляций существенно меньше, чем при $\tau = \tau_{\star}$ (см. правый участок кривой 1' на рис. 26).

Из всех обобщенных МРК, имеющих четвертый порядок точности по т, безусловно монотонными (см. (20)) являются двухстадийный метод Гаусса – Лежандра (69) и трехстадийные методы Лобатто IIIA (76) и Лобатто IIIB (77), функция устойчивости которых имеет вид (70). Поэтому на рис. 2г для сравнения с методом Барриджа (рис. 2в) приведены кривые 1'-3', полученные двухстадийным методом Гаусса – Лежандра. Поведение кривых 1'-3' на рис. 2г свидетельствует о том, что в случае выполнения условия монотонности (см. (20)), которому удовлетворяет этот метод, в численном решении отсутствуют ложные осцилляции. Однако правые участки кривых 1'-3' указывают на то, что численное решение при заданном шаге по времени $\tau = \tau_* = 0.1$ в окрестностях граничных точек $x = \pm 1$ качественно отличается от аналитического решения (см. линии 1-3), т. е. в рассматриваемой задаче не выполняется условие монотонности численного решения по пространственной переменной при $x \in [0,1]$ (или $x \in [-1,0]$), свойственное аналитическому решению в фиксированные моменты времени. Следовательно, свойство монотонности (20) не гарантирует получения качественно верного решения даже для обобщенных МРК высоких порядков точности по т.

Дополнительные расчеты показали, что из всех обобщенных МРК, удовлетворяющих условиям (20), качественно верное решение рассматриваемой задачи дает двухстадийный метод Лобатто IIIC (74), имеющий второй порядок точности по τ (численное решение, полученное этим методом, характеризуется кривыми $1'^{-3'}$ на рис. 2 ∂), и трехстадийные методы Радо IA и Радо IIA, имеющие точность $O(\tau^5)$ (кривые $1'^{-3'}$ на рис. 2e характеризуют приближенные решения, полученные этими двумя методами, которые (численные решения) полностью совпадают). На рис. 2e сплошные и штриховые кривые визуально практически неразличимы (за исключением правых участков кривых 1 и 1'), что определяется высоким порядком точности трехстадийных методов Радо. Сравнение же сплошных и штриховых кривых на рис. 2 ∂ свидетельствует о том, что только на первом шаге по времени (n = 1, $t = \tau_*$) наблюдается визуальное различие численного и аналитического решений (см. кривые 1 и 1'). Это объясняется вторым порядком точности по τ двухстадийного метода Лобатто IIIC.

Таким образом, согласно рис. 2, для получения надежных и качественно верных результатов расчетов температурного поля в рассматриваемой задаче при задании произвольных шагов по времени т следует использовать либо одностадийные обобщенные методы Радо (55) (см. рис. 2*a*), либо двухстадийный метод Лобатто IIIC (74) (см. рис. 2*d*), либо трехстадийные методы Радо (см. рис. 2*e*). Однако при этом нужно учитывать, что на каждом шаге по времени при использовании одностадийных методов Радо необходимо решать соответствующую граничную задачу только для одного дифференциального уравнения (56) (или его конечноразностного аналога, например, (58)), при использовании же двухстадийного метода Лобатто IIIC необходимо решать граничную задачу уже для системы двух связанных уравнений (см. первые два равенства (74)), а при реализации трехстадийных методов Радо требуется интегрирование соответствующей граничной задачи для системы трех связанных уравнений (выше в силу громоздкости они не были приведены).

Для объяснения особенностей поведения сплошных кривых 1'-3' на рис. 2г, рассчитанных двухстадийным обобщенным методом Гаусса – Лежандра (69), обладающим свойством безусловной монотонности (20) (см. функцию устойчивости (70)), рассмотрим более подробно зависимости функций устойчивости R от спектрального параметра η (см. (16) или (19)).

Согласно (3), (7) для точного частного решения уравнения (1) имеет место равенство

$$y^{n+1}(x) = E(\eta)y^n(x), \qquad \eta = \tau\lambda^2, \qquad n = 0, 1, 2, \dots,$$
 (106)

где

$$E(\eta) = \exp\left(-\eta\right) \tag{107}$$

— функция перехода [6] от решения в момент времен
и t_n к решению в момент времени t_{n+1} .

На основании соотношений (8), (15), (16) получаем, что в случае построения численно-аналитического решения рассматриваемой задачи функция перехода совпадает с функцией устойчивости. Следовательно, чтобы численно-аналитическое решение без каких-либо ограничений обладало свойствами, качественно аналогичными свойствам точного решения (3) или (106), необходимо, чтобы и функция устойчивости соответствующего обобщенного МРК качественно вела себя аналогично поведению функции (107). Согласно формуле (107), функция перехода $E(\eta)$ при $\eta > 0$ монотонно убывает от 1.0 (при $\eta \rightarrow +0$) до 0 (при $\eta \rightarrow \infty$). Это означает, что в силу равенств (103) высшие гармоники в аналитическом решении (106) (в частности, в (102)) затухают по времени быстрее, чем низшие. Естественно, было бы желательно, чтобы таким же свойством обладало и приближенное численно-аналитическое решение (104).

На рис. 3 изображены зависимости $E(\eta)$ и $R(\eta)$ для некоторых неявных (рис. 3*a*) и явных (рис. 3*б*) обобщенных МРК. Кривые 1 на рис. 3 характеризуют поведение функции перехода $E(\eta)$ (см. (107)), остальные линии – функций устойчивости $R(\eta)$ разных МРК. Так, кривая 2 на рис. 3*a* определяется соотношением (70) и соответствует функции устойчивости двухстадийного обобщенного метода Гаусса – Лежандра (69). Расчеты по формуле (70) показали, что линия 2 при $\eta \rightarrow \infty$ асимптотически приближается снизу к горизонтальной прямой R = 1 (т. е. lim $R(\eta) = 1 - 0$). Кривая 3 на рис. 3*a*

рассчитана по формуле (57) и характеризует функцию устойчивости одностадийных обобщенных методов Радо (55) или (56). При $\eta \to \infty$ линия 3, как

и кривая 1, монотонно убывает, приближаясь асимптотически сверху к горизонтальной прямой R = 0 (т. е. $\lim_{\eta \to \infty} R(\eta) = +0$). Кривая 4 определена по формуле (75) и соответствует функции устойчивости двухстадийного обобщенного метода Лобатто IIIC (74). Линия 4 также монотонно убывает и асимптотически стремится сверху к горизонтальной прямой R = 0. Кривая 5 на рис. За характеризует поведение функции устойчивости $R(\eta)$ трехстадийных обобщенных методов Радо (соответствующие численные схемы выше выписаны не были, но результаты расчетов температурного поля в стержне представлены на рис. 2*e*). Поведение кривой 5 немонотонно, но расчеты показали, что при $\eta \to \infty$ эта кривая асимптотически стремится сверху к горизонтальной прямой R = 0 примерно с той же скоростью, что и линия 3.



Рис. 3. Зависимости функции перехода и функций устойчивости от спектрального параметра для некоторых обобщенных МРК: *a*) – неявных; *б*) – явных.

Кривая 6 на рис. За соответствует функции устойчивости $R(\eta)$ четырехстадийного обобщенного метода Лобатто IIIC, имеющего точность шестого порядка по τ (соответствующая численная схема в силу ее громоздкости выше приведена не была). Эта линия также ведет себя немонотонно, но при $\eta \to \infty$ она асимптотически стремится сверху к горизонтальной прямой R = 0 примерно с той же скоростью, что и кривая 4.

Из всех кривых 2-6, изображенных на рис. За и характеризующих поведение функций устойчивости $R(\eta)$ разных неявных обобщенных MPK, обладающих свойством безусловной монотонности (20), хуже всего аппроксимирует кривую 1, графически изображающую функцию перехода $E(\eta)$ (107), линия 2, соответствующая функции устойчивости (70) двухстадийного обобщенного метода Гаусса – Лежандра (69). При $\eta > 3.45$ кривая 2 имеет возрастающую ветвь (dR/dη > 0). Это означает, что при достаточно больших значениях собственных чисел λ_k (см., например, (103)) и «неудачно» заданном шаге по времени τ (при не очень малом шаге τ) значения $\eta_{\scriptscriptstyle h}$ = $= \tau \lambda_k^2$ могут оказаться больше $\eta_{\min}=3.45$ (где η_{\min} — значение η соответствующее минимуму на кривой 2). Для таких значений η_k (> η_{\min}) точки кривой 2 будут лежать правее и выше точки её минимума ($R(\eta_k) > R(\eta_{\min})$). В силу этого соответствующие гармоники $W_k(x)$ (см., например, (103)) по времени будут затухать медленнее, чем низшие гармоники, для которых $\eta_m \approx \eta_{\min}$ (*m* < *k*), что противоречит свойствам точного решения (3) или (106). Именно этим и объясняются особенности поведения сплошных кривых 1'-3' на рис. 2r в окрестности граничной точки x = 1.

Кривая 5 на рис. 3a также имеет возрастающий участок при $4.8 < \eta < 17.7$, но вариация функции $R(\eta)$ на этом участке мала, поэтому такая особенность поведения кривой 5, характеризующей функцию устойчивости $R(\eta)$ трехстадийных обобщенных методов Радо, почти не отразилась на численном решении рассмотренной выше модельной задачи (см. сплошные 1'-3' и штриховые 1-3 кривые на рис. 2e). Однако наличие этого возрастающего участка явилось причиной того, что правые участки кривых 1 и 1' на рис. 2e визуально всё же различаются. Еще меньшей вариацией на возрастающем участке обладает функция устойчивости $R(\eta)$ четырехстадийного обобщенного метода Лобатто IIIC; на кривой 6 рис. 3a этот участок (6.3 < $\eta \leq 12.3$) визуально практически незаметен.

В силу того, что наличие возрастающей ветви функции $R(\eta)$ может служить причиной получения качественно неверного численного результата, целесообразно построить графики зависимостей $R(\eta)$ и для явных обобщенных МРК, так как, например, функция устойчивости (38) непосредственно указывает на наличие у нее возрастающей ветви при $\eta > 0$.

Кривая 1 на рис. 3б по-прежнему характеризует зависимость $E(\eta)$ (см. (107)). Линия 2 рассчитана по формуле (25), кривая 3 – по формуле (38), а линия 4 – по формуле (44). Кривая 5 определена на основе соотношения (49) с учетом (48), а линия 6 – на базе равенств (49), (52).

Согласно предыдущему исследованию, желательно, чтобы функция устойчивости $R(\eta)$ конкретного обобщенного МРК обладала тем же основным свойством, что и функция перехода $E(\eta)$, — монотонным убыванием. Исходя из этого, на кривых 3 и 5 рис. Зб следует рассматривать только левые убывающие ветви, но тогда для явных обобщенных МРК второго порядка точности по τ (например, (36)) вместо условия устойчивости и монотонности (39) следует использовать более сильное ограничение

$$0 < \eta < 1, \qquad \eta = \tau \lambda^2 , \qquad (108)$$

а для явных MPK четвертого порядка точности по τ (например, (47)) вместо аналогичных условий (50) нужно использовать неравенства

 $0 < \eta < 1.595, \qquad \eta = \tau \lambda^2.$ (109)

Однако условия (108) и (109) полностью совпадают с неравенствами (27) и (46) соответственно. Таким образом, согласно поведению кривых 2-6 на рис. Зб и неравенствам (27), (46), (54), (108) и (109), наименее слабым условием монотонности из всех рассмотренных выше явных обобщенных МРК обладает метод Рунге – Кутта – Мерсона (51) (см. кривую 6 на рис. Зб и ограничения (54)). Именно ему, по-видимому, и целесообразно отдавать предпочтение при решении рассматриваемых задач явными обобщенными МРК.

Согласно же поведению кривой 2 на рис. 3*a*, из тех же соображений целесообразно рассматривать только её левую убывающую ветвь, что приводит к необходимости введения ограничения на спектральный параметр

$$0 < \eta < \eta_{\min} = 3.45, \qquad \eta = \tau \lambda^2,$$
 (110)

при использовании двухстадийного неявного обобщенного метода Гаусса – Лежандра (69) или трехстадийных неявных методов Лобатто IIIA (76) и Лобатто IIIB (77).

Ограничения (110) ненамного слабее неравенств (54), (93), (100), характеризующих монотонность (20) диагонально неявных обобщенных МРК (Нёрсетта (88)-(91) и Барриджа (95)-(97)). Следовательно, вместо достаточно сложно реализуемых многостадийных методов (69), (76) и (77) целесообразнее использовать диагонально неявные методы (88)-(91) и (95)-(97) либо безусловно устойчивые и безусловно монотонные одно- и трехстадийные обобщенные методы Радо (см. кривые 3 и 5 на рис. 3*a*), либо двух- и четырехстадийные методы Лобатто IIIC (см. кривые 4 и 6 на рис. 3*a*), либо явный обобщенный метод Рунге – Кутта – Мерсона (51).

Заключение. Проведенные исследования показали, что применительно к численному интегрированию начально-краевой задачи для параболического уравнения с первой производной по времени все явные обобщенные МРК обладают условной спектральной устойчивостью, неявные же обобщенные МРК безусловно спектрально устойчивы. Для получения качест-

венно верных численных результатов необходимо выполнение трех условий: **1°**) спектральная устойчивость обобщенного МРК; **2°**) положительность функции устойчивости обобщенного МРК; **3°**) монотонно убывающая зависимость функции устойчивости обобщенного МРК от спектрального параметра $\eta = \tau \lambda^2$ (где τ – шаг по времени; λ – собственное число рассматриваемой задачи).

Нарушение условия 2° приводит к возникновению ложных осцилляций по времени в численном решении. Нарушение же условия 3° может привести к существенным локальным искажениям численного решения в фиксированные моменты времени, т. е. к качественно неверным результатам, несмотря даже на то, что такое решение монотонно убывает по времени без ложных осцилляций.

Из всех рассмотренных в настоящей работе обобщенных МРК всем трем указанным условиям без каких-либо ограничений на спектральный параметр η удовлетворяют лишь одностадийные методы Радо (в одномерном случае им соответствует конечноразностная схема Лаасонена - схема с опережением, имеющая первый порядок точности по т) и двухстадийных метод Лобатто IIIC (второй порядок точности по т). Приемлемые с практической точки зрения результаты дают и трехстадийные методы Радо (четвертый порядок точности пот), а также четырехстадийный метод Лобатто IIIС (шестой порядок точности по т), даже несмотря на то, что условие 3° для них не вполне выполняется (функции устойчивости имеют возрастающие участки, но их вариации на этих участках пренебрежимо малы). Для всех остальных неявных обобщенных МРК, несмотря на их безусловную устойчивость, условия 2° и 3° накладывают достаточно сильные ограничения на величину спектрального параметра η. Анализ этих ограничений показывает, что из всех явных и оставшихся неявных обобщенных МРК, для которых имеют место ограничения на величину η, наиболее удобным для численного решения рассматриваемой начально-краевой задачи является пятистадийный явный обобщенный метод Рунге – Кутта – Мерсона, имеющий четвертый порядок точности по т.

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. І. Москва: Физматгиз, 1966. 632 с.
- 2. 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 р. 3. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. – Москва: Наука, 1964. –
- 488 c. To me: Carslaw H. S., Jaeger J. C. Conduction of heat in solids. – Oxford: Clarendon Press, 1959. – 510 p.
- 4. *Немировский Ю. В., Янковский А. П.* Численное интегрирование начально-краевых задач с большими градиентами решения обобщенными методами Рунге Кутта // Мат. методи та фіз.-мех. поля. 2004. **47**, № 1. С. 43–62.
- Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. Элементарные функции. – Москва: Наука, 1981. – 798 с.
 То ука: Prudnikan A. P. Bruchkan Yu. A. Mariahan O. I. Integrals and Series.
 - To же: Prudnikov A. P., Brychkov Yu. A., Marichev O. I. Integrals and Series. Vol. 1. Elementary Functions. – New York: Gordon & Breach Sci. Publ., 1986.
- 6. 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
- ro жe: Richtmyer R. D., Morton K. W. Difference methods for initial-value problems. New York: Intersci. Publ., 1967. xiv + 405 p.
- 7. Самарский А. А. Теория разностных схем. Москва: Наука, 1989. 616 с.
- 8. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. Москва: Наука, 1977. 735 с.
- Янковский А. П. Исследование спектральной устойчивости обобщенных методов Рунге – Кутта применительно к начально-краевым задачам для уравнений параболического типа. І. Явные методы // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2016. – 59, № 1. – С. 99–110.

- 10. Burrage K. A special family of Runge Kutta methods for solving stiff differential equations // BIT. Numer. Math. 1978. 18, No. 1. P. 22-41.
- 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.
- 12. Laasonen P. Über eine Methode zur Lösung der Wärmeleitungs-gleichung // Acta Math. 1949. **81**, No. 1. P. 309–317.
- Nørsett S. P. Runge Kutta methods with a multiple real eigenvalue only // BIT Numer. Math. - 1976. - 16, No. 4. - P. 388-393.

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

Розглянуто конкретні реалізації різних неявних узагальнених методів Рунге – Кутта (МРК) стосовно числового інтегрування за часом початково-крайової задачі для параболічного рівняння другого порядку і досліджено їх спектральну стійкість. Показано, що всі неявні узагальнені МРК є безумовно спектрально стійкими, але деякі з них мають властивість умовної монотонності числового розв'язку за часом. Функції спектральної стійкості неявних узагальнених МРК є раціональними. Проведено порівняння аналітичного розв'язку нестаціонарної одновимірної задачі теплопровідності з її числовими розв'язками, отриманими різними неявними узагальненими МРК. Продемонстровано, що в цьому випадку застосування одностадійних методів Радо з наступною дискретизацією задачі за просторовою змінною приводить до класичної скінченнорізницевої схеми з випередженням (схеми Лаасонена), а використання одностадійного методу Гаусса -Лежандра – до шеститочкової симетричної схеми (схеми Кранка – Ніколсона). Показано, що діагонально неявні узагальнені методи Нерсетта і Барріджа реалізуються приблизно так само, як і одностадійні методи Радо і Ґаусса – Лежандра, але мають точність за часовим кроком на один-три порядки більшу. На основі співставлення числових і аналітичних розв'язків встановлено, що для отримання практично придатних числових розв'язків без будь-яких обмежень на крок за часом доцільно використати одно- і тристадійні узагальнені методи Радо або дво- і чотиристадійні методи Лобатто IIIC. Усі інші явні та неявні узагальнені МРК потребують введення обмежень на крок за часом.

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

Specific implementations of the different implicit generalized Runge - Kutta methods (RK methods) are considered for the numerical time integration of initial-boundary value problem for second order parabolic equation and their spectral stability is investigated. It is shown that all implicit generalized RK methods are unconditionally spectrally stable, but some of them have the property of conditional monotonicity of the numerical solution in time. The spectral stability functions of the generalized implicit RK methods are rational functions. The comparison of the analytical solution for the onedimensional problem of nonstationary heat conduction with numerical solutions, obtained by different generalized implicit RK methods, is performed. It is demonstrated that in this case the using of the one-stage Radau methods with subsequent discretization of the problem in the spatial variable leads to a classical finite-difference scheme ahead (to the Laasonen scheme), and the use of single-stage method of Gauss - Legendre leads to six-point symmetric scheme (to the Crank - Nicolson scheme). It is shown that the diagonally implicit generalized Nørsett and Burrage methods are realized approximately in the same way as one-step Radau and Gauss - Legendre methods, but they have the accuracy in time step on one to three orders of magnitude more. It is established on the basis of a comparison of numerical and analytical solutions that to obtain practically suitable numerical solutions without any restriction on the time step it is advisable to use one- and three-stage generalized Radau methods or two- and four-stage Lobatto IIIC methods. All other implicit and explicit generalized RK methods require the imposing restrictions on the time step.

Ин-т теорет. и прикл. механики	Получено
им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия	29.01.16