

Московский физико-технический институт  
(государственный университет)  
Кафедра математического моделирования



**Дипломная работа на соискание степени магистра**  
**ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СХЕМ РОЗЕНБРОКА С**  
**КОМПЛЕКСНЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ НА**  
**ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ**

выполнил: Коконков Н.И., 571а гр.  
Руководитель: д.ф.-м.н. Аристова Е.Н.

Москва, 2011г.



## Содержание

1. Введение.....	4
1.1. Жёсткость.....	5
1.2. Элементы теории устойчивости.....	6
1.3. Схемы Рунге-Кутты и их конструирование.....	9
2. Метод прямых.....	10
3. Схемы Розенброка.....	12
3.1. Общий вид схем.....	12
3.2. Схемы с комплексными коэффициентами.....	14
3.3. Одностадийные схемы.....	15
3.4. Полуторастадийные схемы.....	17
3.5. Двустадийные схемы.....	19
4. Исследуемые схемы.....	21
5. Тестовая задача.....	24
5.1. Постановка разностной задачи.....	26
6. Результаты.....	28
6.1. $L_4$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	30
6.2. $L_3$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	33
6.3. $L_2$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	36
6.4. $L_1$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	39
6.5. $A$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	42
6.6. $L_1$ -устойчивая схема 3-го порядка.....	44
6.7. $L_2$ -устойчивая схема 2-го порядка.....	45
6.8. $L_1$ -устойчивая схема 2-го порядка.....	46
6.5. $L_3$ -устойчивая схема 3-го порядка.....	47
6.10. $L_2$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	48
6.11. $L_1$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	50
6.12. $L_1$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	51
6.13. $L_1$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	52
6.14. $L_4$ -устойчивая схема 4-го порядка.....	53
6.15. Классическая схема CROS.....	54
6.16. Полуторастадийная модификация CROS.....	57
6.17. “Безматричная” модификация CROS.....	59
6.18. “Двустадийная” модификация CROS.....	62
7. Выводы.....	65
8. Заключение.....	65
9. Благодарности.....	66
10. Литература.....	66
Приложение.....	68

## 1. Введение

Прикладные задачи, связанные с необходимостью численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), возникли в середине XIX века. Основными численными методами решения ОДУ до появления первых компьютеров оставались явные схемы, для которых были разработаны первые способы оценки точности расчётов и выбора шага. В результате вычислительных экспериментов на первых компьютерах выяснилось, что численное решение актуальных на тот момент прикладных задач, сводящихся к решению ОДУ, при помощи явных методов требует неприемлемо малых шагов, попытки считать с более крупным шагом приводят к срывам счёта.

При решении прикладных задач, сводящихся к решению дифференциальных уравнений в частных производных, возникла сходная ситуация необходимости неприемлемо малого шага по времени для удовлетворения условий устойчивости явных схем. Эту трудность удалось преодолеть переходом к расчётам при помощи *безусловно устойчивых* неявных схем. Безусловно устойчивой называют схему, для устойчивости которой не обязательно наличие связи между шагом по времени и шагом по пространству, таким образом шаг по времени можно выбирать лишь из соображений точности и/или попадания в область сходимости метода квазилинеаризации Ньютона при использовании неявных методов. Применение схожих по сути идей к системам ОДУ привело к выделению класса *жёстких систем* и доказательству непригодности явных схем для их расчёта. До сего момента не прекращаются изыскания, целью которых является сужение класса жёстких систем, выделение из него других классов систем с аналогичными или сходными трудностями численного решения, например, *плохо обусловленных систем*.

В общем случае, для решения системы ОДУ по неявной схеме Рунге-Кутты нужно решить систему нелинейных уравнений, размерность которой пропорциональна размерности исходной задачи и числу стадий используемой схемы. Диагонально-неявная схема Рунге-Кутты для решения системы ОДУ требует последовательного решения равного числу стадий используемой схемы количества систем (в общем случае) нелинейных уравнений той же размерности, что и исходная дифференциальная задача. Отталкиваясь от диагонально-неявных схем, можно построить семейство полуявных многостадийных схем. В основе предложенного в 1963 году Розенброком [1] подхода к построению данного семейства лежит использование одной ньютоновской итерации на каждой стадии диагонально-неявной схемы. Чтобы единственная итерация метода Ньютона не привела сильному расхождению, также строится способ выбора значения начального приближения для очередной стадии, на основе значений полученных в предыдущих стадиях. Это приводит, как минимум, к удвоению числа ко-

эффицентоф по сравнению с диагонально-неявными методами Рунге-Кутты.

### 1.1. Жёсткость

С прагматической точки зрения, жёсткими можно считать такие задачи, для которых неявные методы дают несравненно лучший результат, чем явные. То есть “жёсткими” называют некоторый класс задач, а корректного математического определения жёсткости не дано. Физически, явление жёсткости связано с большой разницей характерных времён физических процессов, происходящих в моделируемой системе и невозможностью пренебречь быстрыми или медленными процессами ввиду совершенной неясности их масштабов. Таким образом можно ввести “спектральное” определение жёсткости согласно [2].

*Задачу Коши*

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad \mathbf{y} \in \mathbb{R}^N \quad (1)$$

называют жёсткой, если спектр матрицы Якоби правой части  $\mathbf{f}_y(\mathbf{y})$  разделяется на две части:

1. Жесткий спектр с собственными значениями  $\Lambda_i : \operatorname{Re} \Lambda_i \leq -\Lambda_0$ ,  
 $|\operatorname{Im} \Lambda_i| < |\operatorname{Re} \Lambda_i|$
2. Мягкий спектр с собственными значениями  $\lambda_i : |\lambda_i| \leq \lambda_0 \ll \Lambda_0$ .

Также можно выделить *плохо обусловленный спектр*, с собственными значениями  $\Lambda_i$ ,  $\operatorname{Re} \Lambda_i \geq \Lambda_0$  (быстрое нарастание компоненты) или  $|\operatorname{Im} \Lambda_i| \geq |\operatorname{Re} \Lambda_i|$  (быстрая осцилляция компоненты), с качественно разным поведением компонент, но сходными трудностями численного решения [3]. Задачи, в спектре которых присутствуют плохо обусловленные компоненты, называют плохо обусловленными.

Указанные области спектров не смыкаются, и в промежутках между ними задачи обладают трудностями смежных типов. Нестрогость разграничения спектра приводит к тому, что жёсткими зачастую называют *немягкие* задачи. Отношение  $\Lambda_0/\lambda_0$  называют [2, 4] *показателем жёсткости системы*. Обычно считают  $\lambda_0 \approx 1$ . Ясно, что нелинейная система может обладать или не обладать свойством жёсткости (плохой обусловленности, немягкости) в различных частях фазового пространства.

Жёсткие задачи встречаются в тех областях науки, где присутствуют процессы с существенно различающимися скоростями протекания [3,6]. Из наиболее известных упомянем задачи климата (взаимодействие океана и атмосферы), радиоактивного распада тяжёлых элементов, химической кинетики, работы (широкополосной) радиоаппаратуры, колебательных процессов высокой частоты. Отдельного внимания заслуживают задачи, приводящие к уравнениям в частных производных. Системы уравнений в ча-

стных производных обладают как “физической жесткостью”, происходящей из различия скоростей рассматриваемых процессов, так и своеобразной “спектральной жесткостью”, связанной со способом пространственной аппроксимации задачи. А наличие у задачи в частных производных решения типа “бегущей волны” приводит к большим градиентам решения, что не способствует упрощению задачи.

## 1.2 Элементы теории устойчивости

Как уже было сказано выше, жёсткие задачи потребовали разработки новых классов численных методов, уточнения понятия устойчивости и введения дополнительных требований к надёжности численных схем. При численном решении жёстких задач необходимо позаботиться об убывании в процессе эволюции затухающих компонент, и обеспечить численному решению алгебраическое затухание. А также застраховать положительное численное решение от некорректной перемены знака.

Для начала опишем способ исследования численных методов на основе линейного однородного теста Далквиста [7]

$$\dot{u}(t) = \lambda u(t), \quad u(0) = u_0 \quad (2)$$

и полученные с его помощью результаты. Применение какой-либо разностной схемы для численного решения задачи (2) приводит к следующей формуле перехода на новый временной слой

$$y^{n+1} = R(\xi) y^n, \quad \xi = \lambda \tau, \quad (3)$$

где  $R(\xi)$  называют *функцией устойчивости* [8] данной схемы. При ограничении точного решения задачи (2)

$$u = u_0 e^{\lambda t} \quad (4)$$

на временную сетку переход проекции  $u^n$  на новый временной слой описывается формулой

$$u^{n+1} = e^{\xi} u^n, \quad \xi = \lambda \tau. \quad (5)$$

Для точного решения имеет место экспоненциальное затухание на каждом шаге.

Следующие результаты получены на основании сравнения поведения  $R(\xi)$  и  $e^{\xi}$  с учётом требований к поведению убывающих компонент численного решения, сформулированных выше.

Схему называют *A-устойчивой*, если  $|R(\xi)| \leq 1$  при  $\text{Re}(\xi) \leq 0$ .

Схему называют *Lq-устойчивой*, если она A-устойчива и при  $\xi \rightarrow -\infty$   $R(\xi) = O(\xi^{-q})$ .

Схему называют *монотонной*, если она A-устойчива и  $R(\xi) \geq 0$  при  $\xi \in \mathbb{R} \cap (-\infty, 0]$ .

Во всех приведённых выше определениях допускается нарушение  $A$ -устойчивости вблизи мнимой оси:  $\operatorname{Re}(\xi) \leq -a^2$  или/и  $\operatorname{Re}(\xi) \leq -ctg\alpha |\operatorname{Im}(\xi)|$ , последнее означает, что область устойчивости ограничена не мнимой осью, а лучами, исходящими из начала координат и образующими углы  $\alpha < \pi/2$  с отрицательной частью действительной оси.

Схему называют  $A(\alpha)$ -устойчивой, если ее область устойчивости  $|R(\xi) \leq 1|$  включает в себя область  $\operatorname{Re}(\xi) \leq -ctg\alpha |\operatorname{Im}(\xi)|$  при  $\operatorname{Re}(\xi) \leq 0$ .

Область  $A(\alpha)$ -устойчивости называют *конусом устойчивости*, таким образом,  $2\alpha$  – угол раствора конуса устойчивости. Схемы, для которых угол  $\alpha$  близок к нулю, называют *жёстко-устойчивыми*.

В связи с проблемой старта многошаговых методов всё более употребительными в вычислительной практике становятся одношаговые методы Рунге-Кутты. Безусловно, хотелось бы использовать явные методы, однако справедлива следующая

Теорема [7]. *Среди явных схем Рунге-Кутты нет  $A$ -устойчивых.*

Действительно, функция устойчивости  $R(\xi)$   $s$ -стадийной явной схемы Рунге-Кутты [5]

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \sum_{i=1}^s \beta_i \mathbf{k}_i, \quad (6a)$$

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{f} \left( \mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \mathbf{k}_j, t^n + \alpha_i \tau \right), \quad (6b)$$

полученная при её использовании для теста Далквиста (2), представляет собой многочлен степени  $s$ . Многочлен неограниченно растёт при  $\xi \rightarrow \infty$ , в том числе в левой полуплоскости комплексной плоскости, где экспонента точного решения не покидает единичного круга.

Теоретические построения, в основе которых лежит линейный однородный тест Далквиста (2), оказались весьма полезны для понимания характера поведения разностных схем, чёткого формулирования требований к разностным схемам, пригодным для решения жёстких систем, построения новых разностных схем, обладающих заданными свойствами. Однако наличие у схемы всех или одного из перечисленных свойств не гарантирует воспроизведения ею точного решения произвольной задачи Коши (1), а при невозможности предельного перехода  $\tau \rightarrow 0$  теорема «аппроксимация + устойчивость (A, L) => сходимость» не действует. В частности, при численном решении жёстких задач погрешность приближённого решения зависит и от шага  $\tau$ , и от показателя жёсткости системы. Теорема справедлива, но бесполезна.

Теория, оперирующая только в рамках порядка аппроксимации и  $A$ -устойчивости, принципиально не полна, так как не ограничивает погрешности округления, неизбежные при вычислениях, на каждом шаге. Далее

будут изложены результаты [2, 8, 9] специальной теории устойчивости численных методов для жёстких систем. В рамках построений данной специальной теории устойчивости изучается более общий класс задач Коши (1), предложенный Далквистом ([6] и приведённая там библиография), но полученные результаты куда менее конструктивны, хотя и более обширны.

Для начала выделим класс систем (1), таких, что правая часть  $\mathbf{f}$  удовлетворяет одностороннему условию Липшица с односторонней константой Липшица  $\lambda_0 = O(1)$ :

$$(\mathbf{f}(\mathbf{y}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}), \mathbf{y} - \mathbf{x}) \leq \lambda_0 \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2, \quad (7)$$

которое гарантирует, что множество траекторий системы (1) со временем не будет сильно расходиться. Система (1), удовлетворяющая условию (7), в котором  $\lambda_0 < 0$ , более известна как *диссипативная*. Нетрудно показать, что траектории диссипативной системы со временем сближаются, то есть обладают свойством *аттрактивности*.

Ещё одним новым объектом является погрешность согласования разностной схемы  $\gamma_{n+1} = \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n$ , т.е. разность между значением проекции точного решения на сетку  $\mathbf{u}^{n+1}$  и значением  $\mathbf{u}^n$ , полученным в результате расчета одного шага данной схемы из  $\mathbf{u}^n$ .

Разностная схема называется *B-согласованной* порядка  $p$ , если для погрешности согласования установлена равномерная на всём классе (7) изучаемых систем (1) оценка

$$\|\gamma_n\| \leq C_1 \tau^{p+1}. \quad (8)$$

Разностная схема называется *B-устойчивой*, если для двух решений  $\{\mathbf{y}^n\}$  и  $\{\mathbf{x}^n\}$  системы (1) из класса (7) установлено соотношение

$$\|\mathbf{y}^{n+1} - \mathbf{x}^{n+1}\| \leq (1 + C_2 \tau) \|\mathbf{y}^n - \mathbf{x}^n\|. \quad (9)$$

*B-сходимость* и *B-аппроксимация* схем определяются аналогично общему случаю, равномерно для класса (7) систем (1). Необходимо особо подчеркнуть, что в определениях все  $C = O(1) \ll \Lambda_0 \approx \|\mathbf{f}_y\|$  зависят от односторонней константы Липшица  $\lambda_0$  и не зависят от “жёсткости” системы  $\Lambda_0$ . Прямым следствием сделанных предположений является теорема «*B-согласованность + B-устойчивость => B-сходимость*».

Таким образом, построена достаточно тривиальная теория, одним из следствий которой является *B-устойчивость* схем Рунге-Кутты интерполяционного типа с гауссовыми узлами, а другим – сложность построения на её основе каких-либо конкретных схем. Поэтому, при выборе схемы для численного решения задачи (1) руководствуются следующими более простыми требованиями:

а) схема должна аппроксимировать дифференциальное уравнение в обычном смысле,



- б) обладать А-устойчивостью, степенным затуханием на линейных задачах и монотонностью,
- в) пройти практическую проверку решением ряда общепринятых и/или оригинальных задач-тестов.

### 1.3. Схемы Рунге-Кутты и принципы их конструирования

В основе методов Рунге-Кутты, одной из наиболее распространённых в современности вычислительных практик интегрирования (систем) ОДУ, лежит ряд Тейлора. Точное решение задачи (1) на следующем шаге разлагается в ряд Тейлора относительно значения на текущем шаге:

$$u^{n+1} = u(t_n + \tau) = u^n + \tau \cdot \frac{du^n}{dt} + \dots + \frac{\tau^k}{k!} \cdot \frac{d^k u^n}{dt^k} + O(\tau^{k+1}). \quad (10)$$

Аналогично для численного решения, но с отброшенным остаточным членом:

$$y^{n+1} = y^n + \tau \cdot \frac{dy^n}{dt} + \dots + \frac{\tau^k}{k!} \cdot \frac{d^k y^n}{dt^k}. \quad (11)$$

Получение указанного отрезка ряда Тейлора и даст нам вычислительную схему.

В методах Рунге-Кутты строится способ вычисления отрезка ряда Тейлора, требующий лишь вычисления значений правой части в разных точках, являющихся приближениями первого порядка к решению дифференциального уравнения. Методика построения указанного способа вычисления отрезка ряда Тейлора заключается в разложении значений функции  $\mathbf{f}$  в разных точках в ряд Тейлора относительно значений функции из правой части дифференциального уравнения (1) на текущем шаге  $\mathbf{f}(y^n)$ .

Сопоставление линейной комбинации полученных разложений точных значений функции  $\mathbf{f}$  в разных точках с отрезком ряда (11) с учётом дифференциального уравнения (1) приводит нас к так называемым *условиям порядка* ([5-6, 9] и приведённая там библиография).

Не будем подробно останавливаться на непосредственно самом процессе получения условий порядка посредством громоздкого математического аппарата и красивых приёмов его реализации в духе деревьев Бутчера [9]. Также не будем обращаться к идее автоматизированных алгоритмов построения и разрешения условий порядка. Скажем лишь, что условия порядка накладываются на коэффициенты таблицы Бутчера [9] для данной схемы, но при этом условия порядка не единственные возможные ограничения на коэффициенты метода.

В основе конструирования разностных схем лежит не только разрешение условий порядка, отвечающих за аппроксимацию дифференциальной задачи разностной (см. пункт а) из конца предыдущего параграфа). Также на коэффициенты метода накладываются дополнительные ограничения, связанные с наличием у конструируемого метода желательных

свойств устойчивости и монотонности. Простым способом наложения таких ограничений на коэффициенты схемы является естественное требование, чтобы функция устойчивости схемы  $R(\xi)$  аппроксимировала экспоненту  $e^\xi$ . Так как функция устойчивости неявной схемы представляет собой дробно-рациональную функцию (см. [6] и приведённую там библиографию), можно требовать, чтобы  $R(\xi)$  была Паде-аппроксимацией экспоненты [8, 6]. То есть такую дробно-рациональную аппроксимацию функции, что при заданных степенях числителя и знаменателя порядок аппроксимации максимален. Общая формула Паде-аппроксимации экспоненты порядка  $p+r$  (см. [8, 6] и приведённую там библиографию), имеет вид

$$R_{pr}(z) = \frac{P_{pr}(z)}{P_{rp}(-z)}, \quad (12a)$$

$$P_{pr}(z) = 1 + \sum_{j=1}^p \frac{z^j}{j!} \prod_{k=0}^{p-j} \frac{\ell_p(k)}{\ell_{p+r}(k)}, \quad (12b)$$

$$\ell_p(k) = p - k, \quad (12c)$$

где  $R_{pr}(z) - e^z = O(z^{p+r+1})$ . Для обеспечения хорошей  $Lq$ -устойчивости схемы Рунге-Кутты обычно требуют, чтобы функция устойчивости была Паде-аппроксимацией экспоненты порядка  $q$ .

Не последнюю роль играют пожелания к трудоёмкости схемы (зануление или равенство друг другу некоторых коэффициентов). Всё сказанное выше справедливо также для методов Розенброка.

Важно помнить, что порядок аппроксимации схем, основанных на разложении в ряд Тейлора, зависит от гладкости функции  $\mathbf{f}$  из правой части дифференциального уравнения (1), заявленный порядок схемы обеспечивается только при наличии у  $\mathbf{f}$  ограниченных производных вплоть до данного порядка включительно. В случае недостатка гладкости правой части дифференциального уравнения (1), порядок аппроксимации методов на основе ряда Тейлора в лучшем случае будет ограничен порядком ограниченных производных функции  $\mathbf{f}$ .

## 2. Метод прямых

Численное решение уравнений в частных производных требует дискретизации более чем одной переменной. Очевидный способ дискретизации заключается во введении в расчётной области многомерной сетки и связанной с ней сеточной функции численного решения задачи, замена в каждом узле введённой сетки дифференциальных операторов конечными разностями значений в ближайших точках. Получающиеся разностные уравнения называют разностной схемой. Решение полученных уравнений позволяет найти приближённое (разностное, численное) значение искомой функции в узлах сетки.

Метод прямых заключается в последовательной разностной дискретизации уравнения в частных производных. Сетка вводится только для части переменных, и они начинают рассматриваться как дискретные, а одна переменная (обычно время) остаётся непрерывной. Полученная система дифференциальных уравнений может решаться методами, разработанными для (систем) ОДУ.

Рассмотрим функцию  $u$ , ограничение её на сетку  $v_n$ , вторую производную от неё  $u_{xx}$  и её разностный аналог  $(v_{n-1} - 2v_n + v_{n+1})/h^2$  в области  $[0, l]$ . Собственные значения дифференциального оператора второй производной

$$\mu_k = -\left(\frac{\pi}{l}k\right)^2, \quad 1 \leq k \leq \infty, \quad (13)$$

собственные значения разностного аналога оператора второй производной

$$\lambda_m = -\left(\frac{N}{l}2\sin\left(\frac{\pi m}{2N}\right)\right)^2, \quad 1 \leq m \leq N, \quad (14)$$

где  $N \cdot h = l$ . Таким образом, при применении метода прямых к одномерному параболическому уравнению

$$u_t = u_{xx} \quad (15)$$

в той же области  $[0, l]$  с тем же равномерным разбиением области по пространству  $x_j = j \cdot h$  получим систему  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{v}_n = \frac{v_{n-1} - 2v_n + v_{n+1}}{h^2}, \quad n = 1, \dots, N \quad (16)$$

(с граничными условиями, заданными в точках  $x_1$  и  $x_N$ ). Полученная система дифференциальных уравнений оказывается плохо обусловленной (хотя иногда говорят, что полученная система дифференциальных уравнений жёсткая, что не совсем верно ввиду отсутствия в рассматриваемом случае чёткого разделения спектра) с показателем жёсткости (числом обусловленности)

$$\frac{\Lambda_0}{\lambda_0} \approx \left(\frac{2}{\pi}N\right)^2, \quad (17)$$

много больше единицы при больших  $N$ , и для дискретизации по оставшейся переменной (времени) требует уже схем высокой надёжности. То есть схем, обладающих хорошими свойствами устойчивости, монотонностью и порядком аппроксимации, достаточным для частичной компенсации последствий снижения порядка на жёстких задачах вне зависимости от величин выбранных шагов дискретизации. Наличие решения типа “бегущей волны” приводит к большим градиентам решения, и к необходимости

тщательно строить пространственную аппроксимацию на основе интегро-интерполяционных методов.

Наиболее полно указанные требования к схемам сформулированы в работе [10]:

- Надёжность даже при большой жесткости задачи,
- Выполнение всех вычислений без срывов счёта,
- Сохранение основных качественных свойств точного решения,
- Нечувствительность к величине шагов по времени и пространству,
- Безытерационность,
- Отсутствие искусственного разделения компонент по жесткости.

Два последних требования нуждаются в пояснениях. Безытерационность даже для нелинейных задач нужна, чтобы счёт не зависел от сходимости итерационного процесса вкупе со сходимостью самой разностной схемы. Необходимость сходимости итераций может существенно ограничивать величину шага по времени. Отсутствие искусственного разделения компонент по жесткости не только не требует проведения специального исследования для каждой конкретной задачи, но и позволяет делать алгоритмически простые вычислительные процессы, не включающие в себя проверки того, в какой части фазового пространства находится задача на данном шаге по времени. Хотя разделение процессов по спектру (по скорости) видится естественным, корректной его реализации мешает другое естественное соображение о наличии скорости изменения спектра.

### 3. Схемы Розенброка

Схемы Розенброка – перспективное семейство разностных схем для решения жестких задач. Некоторые схемы из этого семейства обладают повышенной надёжностью. По устойчивости они не уступают неявным, но переход на следующий временной слой находится из решения линейной системы уравнений за конечное число действий. Изначально они были предложены Розенброком в 1963 году [1], чтобы обойти проблему сходимости итерационного процесса, и с тех пор интерес к ним не угасает.

Далее по тексту рассматриваются лишь схемы для автономных задач Коши (1), ввиду тривиальности их неавтономного обобщения.

#### 3.1 Общий вид схем

Классический метод Розенброка задаётся формулами [3,6]:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \sum_{i=1}^s \beta_i \mathbf{k}_i, \quad (18a)$$

$$\left( \mathbf{E} - \tau \cdot \gamma_i \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \left( \mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \mathbf{k}_j \right) \right) \mathbf{k}_i = \mathbf{f} \left( \mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \mathbf{k}_j \right). \quad (18b)$$

В общем виде  $s$ -стадийные методы Розенброка содержат добавочные линейные комбинации произведений матриц Якоби  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$  и  $\mathbf{k}_i$  [6,12]:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \sum_{i=1}^s \beta_i \mathbf{k}_i, \quad (19a)$$

$$\begin{aligned} & \left( \mathbf{E} - \tau \gamma_i \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \left( \mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \mathbf{k}_j \right) \right) \mathbf{k}_i = \\ & = \mathbf{f} \left( \mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \mathbf{k}_j \right) + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \pi_{ij} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \left( \mathbf{y}^n + \tau \sum_{p=1}^j \delta_{jp} \mathbf{k}_p \right) \mathbf{k}_j. \end{aligned} \quad (19b)$$

Также существуют предложенные Ваннером схемы (так называемые схемы Розенброка-Ваннера), где на каждом шаге матрица Якоби вычисляется только один раз [6]:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \sum_{i=1}^s \beta_i \mathbf{k}_i, \quad (20a)$$

$$\left( \mathbf{E} - \tau \cdot \gamma_i \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} (\mathbf{y}^n) \right) \mathbf{k}_i = \mathbf{f} \left( \mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \mathbf{k}_j \right) + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} (\mathbf{y}^n) \tau \sum_{j=1}^{i-1} \pi_{ij} \mathbf{k}_j. \quad (20b)$$

Большое количество определяющих коэффициентов методов Розенброка общего вида (19) нужно для одновременного обеспечения высокой точности и устойчивости. Но “общие” схемы (19) можно назвать избыточными: даже “классические” (18) и “ваннеровские” (20) схемы допускают набор параметров, обеспечивающих высокий порядок точности и надёжности. Увеличение количества определяющих метод параметров приведёт лишь к увеличению количества свободных параметров, не увеличив существенно числа степеней свободы. Наименее трудоёмкие методы Розенброка имеют вид (18) и  $\gamma_1 = \dots = \gamma_s = \gamma$ , их реализация требует на каждом шаге одного вычисления матрицы Якоби  $\partial \mathbf{f}(\mathbf{y}^n) / \partial \mathbf{y}$  и одного обращения матрицы типа матрицы Якоби  $(\mathbf{E} - \tau \cdot \gamma \partial \mathbf{f}(\mathbf{y}^n) / \partial \mathbf{y})$ , такие методы называются однократными [8].

Нет предела совершенству, и даже схемы общего вида (19) можно обобщить до неузнаваемости, введя в них сколь угодно большое количество коэффициентов. Введение сколь угодно большого количества коэффициентов – самый простой и естественный ответ на переопределённость системы уравнений относительно коэффициентов метода, полученной из условий порядка. В данной работе не преследуются фундаментальные цели обобщения полувывных схем до абсурда, но сам способ такого обобщения стоит упомянуть за присущую ему последовательность. Суть способа заключается в линейном приближении значений  $\mathbf{f}$  (и  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$ ) в (19b), то есть замене их значений на каждой стадии линейными комбинациями значений  $\mathbf{f}$  (и  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$ ) в по-разному сдвинутых относительно  $\mathbf{y}^n$  точках для каждого элемента линейной комбинации на каждой стадии:

$$\mathbf{f}\left(\mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{ij} \mathbf{k}_j\right) \rightarrow \sum_{l=1}^L a_l^l \mathbf{f}\left(\mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{ij}^l \mathbf{k}_j\right), \quad (21a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\left(\mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{l-1} \gamma_{ij} \mathbf{k}_j\right) \rightarrow \sum_{l=1}^J g_l^l \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\left(\mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{l-1} \gamma_{ij}^l \mathbf{k}_j\right). \quad (21b)$$

### 3.2. Схемы с комплексными коэффициентами

Выше подразумевалось, что коэффициенты схем – действительные числа, но это требование не является строгим. Строгим требованием к коэффициентам схемы является действительность значений аргументов функции  $\mathbf{f}$  из правой части уравнения (1) и её якобиана  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$ , а также действительность значений искомой действительной сеточной функции на каждом шаге интегрирования. Требования, касающиеся  $\mathbf{f}$  (и  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$ ) продиктованы тем, что она может не быть аналитической функцией своих аргументов. Естественный способ удовлетворить этим требованиям – взять действительную часть сдвигов аргументов функции  $\mathbf{f}$  и её якобиана  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$  и действительную часть сдвига на каждом шаге интегрирования:

$$\mathbf{f}\left(\mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{ij} \mathbf{k}_j\right) \rightarrow \mathbf{f}\left(\mathbf{y}^n + \tau \operatorname{Re}\left(\sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{ij} \mathbf{k}_j\right)\right), \quad (22a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\left(\mathbf{y}^n + \tau \sum_{j=1}^{l-1} \gamma_{ij} \mathbf{k}_j\right) \rightarrow \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\left(\mathbf{y}^n + \tau \operatorname{Re}\left(\sum_{j=1}^{l-1} \gamma_{ij} \mathbf{k}_j\right)\right), \quad (22b)$$

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \sum_{l=1}^s \beta_l \mathbf{k}_l \rightarrow \mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \operatorname{Re}\left(\sum_{l=1}^s \beta_l \mathbf{k}_l\right). \quad (22c)$$

Введение комплексных коэффициентов – нетривиальный способ получения схем с лучшей точностью и устойчивостью по сравнению со схемами с действительными коэффициентами. При этом количество параметров схем фактически удваивается. С другой стороны, схема с комплексными коэффициентами может обладать порядком аппроксимации, превышающим число стадий, и обладать  $A$ -устойчивостью с превышающим число стадий порядком затухания на бесконечности на линейных задачах. За возможность воспользоваться всей этой роскошью придётся заплатить увеличением вычислительных затрат, связанных с использованием комплексной арифметики: удвоением вычислительных затрат на сложение, увеличением в пять раз затрат на умножение, предварением деления двумя такими пятикратными умножениями, удвоением требований к количеству используемой памяти.

При этом все свойства схем с комплексными коэффициентами, и свойства схем с действительными коэффициентами гарантированно будут выполняться на линейных задачах. На нелинейных или жёстких задачах будет наблюдаться то же снижение порядка аппроксимации и столь же

плохое затухание на бесконечности, какими бы замечательными эти показатели не были на линейных и нежёстких задачах.

Также важно лишний раз отметить, что  $L$ -затухание – степенное, а не экспоненциальное, как у точного решения (4) задачи Далквиста (2). Следовательно, даже для линейной задачи поведение точного решения и его численной реконструкции используемой схемой могут не различаться существенно по величине, при этом принципиально различаясь характером асимптотического поведения. Исходя из этого, можно предположить, что численная реконструкция особенностей поведения точного решения нелинейной, жёсткой или плохо обусловленной задачи, “обеспечиваемая” свойством  $L$ -затухания данной схемы, может быть довольно грубой. В таких случаях крайне полезно знать непосредственно качественную характеристику перехода численного решения на следующий слой для используемой схемы. Знание об общих свойствах функции устойчивости данной схемы должно помочь прогнозировать результаты численных экспериментов и реальных расчётов, выполненных с её помощью. Именно таким полезным свойством численного метода решения задач Коши (1), является монотонность, гарантирующая одинаковую эволюцию компонент численного решения для всего спектра.

### 3.3. Одностадийные схемы

При  $s=1$  метод Розенброка с комплексными коэффициентами принимает следующий вид:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \operatorname{Re}(\beta \mathbf{k}), \quad (23a)$$

$$\left( \mathbf{E} - \tau \cdot \gamma \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n) \right) \mathbf{k} = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n). \quad (23b)$$

Выпишем условия порядка для данного семейства методов:

$$O(\tau): \quad 1 = \operatorname{Re} \beta; \quad (24a)$$

$$O(\tau^2): \quad \frac{1}{2} = \operatorname{Re}(\beta \cdot \gamma); \quad (24b)$$

$$O(\tau^3): \quad \frac{1}{6} = 0, \quad (24c)$$

$$\frac{1}{6} = \operatorname{Re}(\beta \cdot \gamma^2). \quad (24d)$$

Из условий порядка легко видеть, что одностадийный метод Розенброка не может иметь порядок аппроксимации выше второго (схема Рунге-Кутты имеет порядок  $p$ , если  $\|u_h - y\| = O(h^{p+1})$ ). Применяя одностадийную схему (23) к тесту Далквиста (2) получим функцию устойчивости метода (23)

$$R(\xi) = \frac{1 + (1 - 2 \operatorname{Re} \gamma) \xi + (|\gamma|^2 - \operatorname{Re} \gamma) \xi^2}{1 + (-2 \operatorname{Re} \gamma) \xi + |\gamma|^2 \xi^2}. \quad (25)$$

Исследование аппроксимации и устойчивости даёт следующие результаты:

- Схема имеет аппроксимацию не хуже  $O(\tau)$  при  $\text{Re}(\beta) = 1$ ,
- Схема имеет аппроксимацию не хуже  $O(\tau^2)$  при  $\text{Re}(\gamma) = 1/2$ ,
- Схема  $A$ -устойчива при  $\text{Re}(\gamma) \geq 1/2$ ,
- Схема  $L1$ -устойчива на полуокружности  $\gamma = (1 + e^{i\varphi})/2$ ,  $|\varphi| \leq \pi/2$
- Схема  $L2$ -устойчива и монотонна на концах этой полуокружности  $\gamma = (1 \pm i)/2$ ,

Оптимальным подбором параметров мы можем получить  $L2$ -устойчивую монотонную схему второго порядка аппроксимации:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \text{Re}(\mathbf{k}), \quad (26a)$$

$$\left( \mathbf{E} - \tau \cdot \frac{1 \pm i}{2} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n) \right) \mathbf{k} = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n), \quad (26b)$$

хорошо известную, как комплексная схема Розенброка, CROS. Знак перед мнимой единицей в коэффициенте  $\gamma$  не имеет значения. Функция устойчивости метода (26)

$$R(\xi) = \frac{1}{1 - \xi + \xi^2/2} \quad (27)$$

представляет собой Паде-аппроксимацию экспоненты.

Эта схема была предложена ещё Розенброком [1] в числе первых представителей семейства, как своего рода экзотика, ведь за все выдающиеся свойства этой схемы нужно заплатить вычислительными затратами на комплексную арифметику. Исследование этой схемы и развитие продолжается с начала 1980-х [11] до сих пор. Например, работе [12] схема была обобщена на случай неавтономных задач, а в [13] была предложена её итерационная модификация. В последнее время было предложено обобщение схемы (26), позволяющее эффективно оценивать точность метода [14], и на основании полученных оценок [15] строить алгоритм выбора шага [16]. Также продолжительное время обсуждается вопрос рациональной организации вычислений по методу CROS и его модификациям, например «заморозка якобиана» на несколько шагов и/или построение «безматричного» метода.

Схема CROS весьма успешно использовалась для решения задач химической кинетики и уравнений в частных производных [17-20]. На жёстких задачах схема показала высокую надёжность, а характерные для метода вычислительные трудности, отмеченные в процессе вычислительных экспериментов, позволили с большей чёткостью сформулировать претензии к классической схеме и направления её развития. Из недостатков схемы наиболее существенным является отсутствие простой оценки локальной погрешности и, как результат, сложность выбора шага интегрирования



для получения решения с заданной точностью. Также CROS оказался чувствительным к точности обращения матрицы типа матрицы Якоби  $\left(\mathbf{E} - \tau \cdot \frac{1 \pm i}{2} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{y}^n)}{\partial \mathbf{y}}\right)$  и для сохранения им своих уникальных свойств монотонности на каждом шаге по времени требуется точное обращение указанной матрицы (по методу Гаусса).

### 3.4. Полуторастадийные схемы

Полуторастадийными можно условно назвать двустадийные методы, первая стадия которых – явная схема Эйлера, а следующая – схема Розенброка с комплексными коэффициентами. Почти очевидно, что явных схем Рунге-Кутты с комплексными коэффициентами для интегрирования задач Коши (1), в которых  $\mathbf{y}$  некомплекснозначная функция своих переменных, не бывает (причины можно найти в разделе 3.2). Сама идея введения явной стадии Рунге-Кутты в методы Розенброка [21] не нова: исторически она приходится на самое начало бурного их развития. Но дополнительное введение явной стадии (со строкой коэффициентов как в таблице Бутчера [5, 9]) должно быть подкреплено соображениями, оправдывающими такой подход. Одним из таких соображений является модификация уже известных схем для устранения недостатков.

Полуторастадийная смешанная схема Рунге-Кутты-Розенброка с “нулевой” тривиальной явной стадией метода Рунге-Кутты и первой – комплексной стадией метода Розенброка для автономной задачи Коши (1):

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau(\beta_0 \mathbf{k}_0 + \text{Re}(\beta_1 \mathbf{k}_1)), \quad (28a)$$

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n), \quad (28b)$$

$$\begin{aligned} & \left( \mathbf{E} - \tau \cdot \gamma \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n + \tau \cdot \gamma_0 \mathbf{k}_0) \right) \mathbf{k}_1 = \\ & = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n + \tau \cdot \alpha_0 \mathbf{k}_0) + \pi_0 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n + \tau \cdot \delta_0 \mathbf{k}_0) \mathbf{k}_0, \end{aligned} \quad (28c)$$

где комплексными являются коэффициенты  $\beta_1$ ,  $\gamma$  и  $\pi_0$ . Таким образом, получается 10 параметров схемы. Функция устойчивости данного семейства методов:

$$R(\xi) = \frac{1 + D_1 \xi + D_2 \xi^2 + D_3 \xi^3}{1 + (-2 \text{Re} \gamma) \xi + |\gamma|^2 \xi^2}, \quad (29a)$$

$$D_1 \equiv \beta_0 + \text{Re} \beta_1 - 2 \text{Re} \gamma, \quad (29b)$$

$$D_2 \equiv |\gamma|^2 - 2 \beta_0 \text{Re} \gamma + \text{Re}(\beta_1 (\alpha_0 + \pi_0 - \gamma^*)), \quad (29c)$$

$$D_3 \equiv \beta_0 |\gamma|^2 - \text{Re}(\beta_1 (\alpha_0 + \pi_0) \gamma^*). \quad (29d)$$

Условия порядка для данного семейства методов:

$$O(\tau): \quad 1 = \beta_0 + \operatorname{Re} \beta_1; \quad (30a)$$

$$O(\tau^2): \quad \frac{1}{2} = \alpha_0 \operatorname{Re} \beta_1 + \operatorname{Re}(\beta_1(\pi_0 + \gamma)); \quad (30b)$$

$$O(\tau^3): \quad \frac{1}{6} = \frac{\alpha_0^2}{2} \operatorname{Re} \beta_1 + \operatorname{Re}(\beta_1(\pi_0 \cdot \delta_0 + \gamma \cdot \gamma_0)), \quad (30c)$$

$$\frac{1}{6} = \operatorname{Re}(\beta_1(\alpha_0 + \pi_0 + \gamma)\gamma). \quad (30d)$$

В данном случае представить результат исследования аппроксимации и устойчивости в виде сводной таблицы затруднительно, кратко перечислим основные принципы построения схемы не хуже классической схемы (26):

- Трудоёмкость схемы не сильно больше затрат на CROS при  $\pi_0 = 0$  и  $\gamma_0 = 0$ ,
- Схема  $L2$ -устойчива и монотонна при  $D_{1,2,3} = 0$  и  $\gamma = (1 \pm i)/2$ ,
- Соотношение (30d) можно использовать для контроля точности.

Приведённые рекомендации получены П.Д. Ширковым [16] и на их основе построена модификация CROS со стратегией автоматического выбора шага

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau(\beta_0 \mathbf{k}_0 + \operatorname{Re}(\beta_1 \mathbf{k}_1)), \quad (31a)$$

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n), \quad (31b)$$

$$\left( \mathbf{E} - \tau \cdot \frac{1 \pm i}{2} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n) \right) \mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n + \tau \cdot \alpha_0 \mathbf{k}_0), \quad (31c)$$

$$\alpha_0 = 0.87115675586051846022764873005029, \quad (31d)$$

$$\beta_0 = 0.56077593460933977578982791323698, \quad (31e)$$

$$\beta_1 = 0.43922406539066022421017208676302 \pm \pm 0.20449008919385179356098206338366 \cdot i, \quad (31f)$$

$$\mathbf{e}_{loc} = \frac{\tau^3}{6} \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n) \right)^2 \mathbf{f}(\mathbf{y}^n) + \vec{O}(\tau^4), \quad (31g)$$

где формула (31g), выражающая главный терм локальной погрешности схемы (31), используется для контроля точности и автоматического выбора шага численного интегрирования. Функция устойчивости схемы (31)

$$R(\xi) = \frac{1}{1 - \xi + \xi^2/2} \quad (32)$$

совпадает с функцией устойчивости (27) классического одностадийного метода Розенброка с комплексными коэффициентами (26) CROS, что, вообще говоря, является рациональным ожиданием, в том смысле, что именно из этого и исходили при конструировании схемы (31). Свойства функ-

ции устойчивости (32) схемы (31) обеспечивают  $L_2$ -устойчивость и монотонность, подбор всех прочих коэффициентов (31d-f) обеспечивает схеме второй порядок аппроксимации.

Указанная полустадийная схема (31) также тестировалась [16] на ряде жестких задач и показала достойные результаты. В ходе численных экспериментов выяснилось, что стратегию выбора шага на основе формулы (31g) можно использовать для выбора шага численного интегрирования по методу CROS.

### 3.5. Двустадийные схемы

При  $s=2$  метод Розенброка с комплексными коэффициентами принимает следующий вид:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \tau \operatorname{Re}(\beta_1 \mathbf{k}_1 + \beta_2 \mathbf{k}_2), \quad (33a)$$

$$\left( \mathbf{E} - \tau \cdot \gamma_1 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n) \right) \mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n), \quad (33b)$$

$$\begin{aligned} & \left( \mathbf{E} - \tau \cdot \gamma_2 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n + \tau \operatorname{Re}(\gamma_{21} \mathbf{k}_1)) \right) \mathbf{k}_2 = \\ & = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n + \tau \operatorname{Re}(\alpha_{21} \mathbf{k}_1)) + \tau \cdot \pi_{21} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^n + \tau \operatorname{Re}(\delta_{21} \mathbf{k}_1)) \mathbf{k}_1, \end{aligned} \quad (33c)$$

где нет ни одного действительного коэффициента, что даёт в сумме 16 параметров. Функция устойчивости схемы (33)

$$R(\xi) = \frac{1 + D_1 \xi + D_2 \xi^2 + D_3 \xi^3 + D_4 \xi^4}{\left( 1 + (-2 \operatorname{Re} \gamma_1) \xi + |\gamma_1|^2 \xi^2 \right) \left( 1 + (-2 \operatorname{Re} \gamma_2) \xi + |\gamma_2|^2 \xi^2 \right)}, \quad (34a)$$

$$D_1 \equiv \operatorname{Re}(\beta_1 - 2(\gamma_1 + \gamma_2) + \beta_2), \quad (34b)$$

$$\begin{aligned} D_2 \equiv & |\gamma_1|^2 + 4 \operatorname{Re} \gamma_1 \operatorname{Re} \gamma_2 + |\gamma_2|^2 + \operatorname{Re}(\beta_2 (\pi_{21} - \gamma_2^*)) - \\ & - \left( \operatorname{Re}(\beta_1 \gamma_1^*) + 2 \operatorname{Re} \beta_1 \operatorname{Re} \gamma_2 \right) + \operatorname{Re} \beta_2 \operatorname{Re}(\alpha_{21} - 2\gamma_1), \end{aligned} \quad (34c)$$

$$\begin{aligned} D_3 \equiv & |\gamma_1|^2 \operatorname{Re}(\beta_2 - 2\gamma_2) + |\gamma_2|^2 \operatorname{Re}(\beta_1 - 2\gamma_1) + \\ & + 2 \operatorname{Re}(\beta_1 \gamma_1^*) \operatorname{Re} \gamma_2 + \operatorname{Re}(\beta_2 \gamma_2^*) \operatorname{Re}(2\gamma_1 - \alpha_{21}) - \\ & - \left( \operatorname{Re} \beta_2 \operatorname{Re}(\alpha_{21} \gamma_1^*) + \operatorname{Re}(\beta_2 (\gamma_1^* + \gamma_2^*) \pi_{21}) \right), \end{aligned} \quad (34d)$$

$$\begin{aligned} D_4 \equiv & \operatorname{Re}(\beta_2 \gamma_1^* \gamma_2^* \pi_{21}) - |\gamma_2|^2 \operatorname{Re}(\beta_1 \gamma_1^*) + \\ & + |\gamma_1|^2 |\gamma_2|^2 + \operatorname{Re}(\beta_2 \gamma_2^*) \left( \operatorname{Re}(\alpha_{21} \gamma_1^*) - |\gamma_1|^2 \right) \end{aligned} \quad (34e)$$

даёт нам представление о максимально возможном порядке затухания на линейных задачах. В знаменателе функции устойчивости (34) стоит много-

член четвёртой степени, следовательно, максимально возможный порядок затухания – четвёртый. Условия порядка для схемы (34)

$$O(\tau): \quad 1 = \operatorname{Re}(\beta_1 + \beta_2); \quad (35a)$$

$$O(\tau^2): \quad \frac{1}{2} = \operatorname{Re}(\beta_1\gamma_1 + (\gamma_2 + \pi_{21})\beta_2) + \operatorname{Re}\beta_2 \operatorname{Re}\alpha_{21}; \quad (35b)$$

$$O(\tau^3): \quad \frac{1}{6} = \operatorname{Re}(\gamma_1^2\beta_1 + \beta_2\pi_{21}(\gamma_1 + \gamma_2) + (\gamma_2^2 + (\gamma_1 + \gamma_2)\pi_{21})\beta_2) + \operatorname{Re}\beta_2 \operatorname{Re}(\gamma_1\alpha_{21}) + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2)\operatorname{Re}\alpha_{21}, \quad (35c)$$

$$\frac{1}{6} = \frac{\operatorname{Re}\beta_2}{2}(\operatorname{Re}\alpha_{21})^2 + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2)\operatorname{Re}\gamma_{21} + \operatorname{Re}(\beta_2\pi_{21})\operatorname{Re}\delta_{21}; \quad (35d)$$

$$O(\tau^4): \quad \frac{1}{24} = \operatorname{Re}\beta_2 \operatorname{Re}(\gamma_1^2\alpha_{21}) + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2^2)\operatorname{Re}\alpha_{21} + \operatorname{Re}(\beta_1\gamma_1^3 + (\pi_{21}(\gamma_1^2 + \gamma_1\gamma_2 + \gamma_2^2) + \gamma_2^3)\beta_2) + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2)\operatorname{Re}(\gamma_1\alpha_{21}), \quad (35c)$$

$$\frac{1}{24} = \frac{1}{2}\operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2)(\operatorname{Re}\alpha_{21})^2 + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2\pi_{21})\operatorname{Re}\delta_{21} + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2^2)\operatorname{Re}\gamma_{21}, \quad (35d)$$

$$\frac{1}{8} = \operatorname{Re}\beta_2 \operatorname{Re}\alpha_{21} \operatorname{Re}(\gamma_1\alpha_{21}) + \operatorname{Re}(\beta_2\pi_{21})\operatorname{Re}(\gamma_1\delta_{21}) + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_1\pi_{21})\operatorname{Re}\delta_{21} + \left(\operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2)\operatorname{Re}\alpha_{21} + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2\pi_{21}) + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2^2)\right)\operatorname{Re}\gamma_{21}, \quad (35e)$$

$$\frac{1}{12} = \frac{1}{3}\operatorname{Re}(\beta_2)(\operatorname{Re}\alpha_{21})^3 + \operatorname{Re}(\beta_2\gamma_2)(\operatorname{Re}\gamma_{21})^2 + \operatorname{Re}(\beta_2\pi_{21})(\operatorname{Re}\delta_{21})^2. \quad (35f)$$

и так далее (продолжать можно до тех пор, пока система не станет переопределённой), пока количество условий порядка не сравняется с числом параметров схемы (как, например, произошло в (24): уже (24с) несовместно).

Условия порядка для таких схем были получены П.Д. Ширковым в 1992 году в работе [22], в той же работе им были получены две двустадийные (33) схемы общего (18) вида и одна классическая (19) двустадийная (33) схема – все три схемы четвёртого порядка аппроксимации, А-устойчивые с четвёртым порядком затухания на линейных задачах. В 2009 году А.Г. Лимоновым [23] опубликован ряд классических (19) двустадийных (33) схем Розенброка с комплексными коэффициентами (в том числе была уточнена схема из [22]).

Общее теоретическое исследование схем второго порядка не представляется выполнимым, а в случае выполнимости – полезным. Поэтому полезней строить схемы на основе стандартных приёмов (удовлетворение условиям порядка, приведение функции устойчивости в соответствие с видом Паде-аппроксимации экспоненты), проверять максимальную невязку в условиях порядка (для какого условия порядка получится максимальная допустимая невязка при подстановке набора коэффициентов, определяющих данную схему, такого порядка и будет ошибка, схема соответственно будет на порядок ниже). В работах [22, 23] применение указанного подхода проявилось в строгом требовании удовлетворения условиям порядка вплоть до четвёртого и последующим сужением области значений коэффициентов наложением на них условий  $Lq$ -устойчивости,  $q=0, \dots, 4$ . Таким же образом в [24] были построены однократные (19) двустадийные схемы с комплексными коэффициентами (33).

Автору не удалось найти достоверных сведений о стороннем тестировании построенных в [22-24] двустадийных методов Розенброка на каких-либо задачах. Для всех найденных задач тестирование сводилось к численному интегрированию нескольких задач непосредственно авторами схемы.

В рамках работ А.Г. Лимонова [23] был указан барьер, согласно которому классические (19) двустадийные схемы Розенброка с комплексными коэффициентами (33) не могут одновременно иметь порядок аппроксимации и порядок затухания, в сумме превышающие восемь. Несомненно фундаментальное барьерное свойство может остаться невостребованным ввиду феномена снижения порядка и других вычислительных особенностей, возникающих при решении жёстких задач.

#### 4. Исследуемые схемы

В работе исследуются классическая [1] схема CROS (26), полутора-стадийная схема (31), предложенная в [16], и различные двустадийные схемы (33) из [22-24] – все эти схемы оцениваются как наименее трудоёмкие представители семейства схем Розенброка с комплексными коэффициентами. Также в работе рассмотрены модификации схемы CROS, о них речь пойдёт в конце. Далее приведём значения коэффициентов двустадийных схем Розенброка с комплексными коэффициентами (33), пропущенные коэффициенты считаются равными нулю.

Начнём с классических (18) двустадийных (33) схем из [22, 23]:

–  $L4$ -устойчивая схема четвёртого порядка аппроксимации:

$$\gamma_1 = 0.4573733434972976 + 0.2351004879985425 \cdot i, \quad (36a)$$

$$\gamma_2 = 0.04262665650270241 + 0.3946329531721134 \cdot i, \quad (36b)$$

$$\gamma_{21} = 0.5250462591428808 + 1.453646467184172 \cdot i, \quad (36c)$$

$$\alpha_{21} = 0.64444138212147357 - 1.143956305335963 \cdot i, \quad (36d)$$

$$\beta_1 = 0.7893434641361923 + 0.9821367946107931 \cdot i, \quad (36e)$$

$$\beta_2 = 0.2106565358638077 - 0.5705215732509971 \cdot i; \quad (36f)$$

–  $L3$ -устойчивая схема четвертого порядка аппроксимации, удовлетворяющая условиям пятого порядка с малой невязкой:

$$\gamma_1 = 0.3074021043872249 + 0.1292532396046484 \cdot i, \quad (37a)$$

$$\gamma_2 = 0.09259789561277514 + 0.2576121583025594 \cdot i, \quad (37b)$$

$$\gamma_{21} = 0.5132472378039463 + 0.2267734198731172 \cdot i, \quad (37c)$$

$$\alpha_{21} = 0.3353594637740966 - 0.4983420242149068 \cdot i, \quad (37d)$$

$$\beta_1 = 0.8644582665498726 + 0.9366952975243449 \cdot i, \quad (37e)$$

$$\beta_2 = 0.1355417334501275 - 1.154171181438793 \cdot i; \quad (37f)$$

–  $L2$ -устойчивая схема четвертого порядка аппроксимации, удовлетворяющая условиям вплоть до шестого порядка с малой невязкой:

$$\gamma_1 = 0.2334763488700170 + 0.08527040833242157 \cdot i, \quad (38a)$$

$$\gamma_2 = 0.0998568446331641 + 0.1870544254177949 \cdot i, \quad (38b)$$

$$\gamma_{21} = 0.504906851817424 - 0.4325579331793709 \cdot i, \quad (38c)$$

$$\alpha_{21} = 0.2549862725007512 - 0.3381738431416763 \cdot i, \quad (38d)$$

$$\beta_1 = 0.9248875101862942 + 0.7077449395923038 \cdot i, \quad (38e)$$

$$\beta_2 = 0.07511248981370576 - 1.69874184888469 \cdot i; \quad (38f)$$

–  $L1$ -устойчивая схема четвертого порядка аппроксимации, удовлетворяющая условиям вплоть до седьмого порядка с малой невязкой:

$$\gamma_1 = 0.09705048233513194 + 0.1441824711215367 \cdot i, \quad (39a)$$

$$\gamma_2 = 0.1886638033791538 + 0.06177441689689114 \cdot i, \quad (39b)$$

$$\gamma_{21} = 0.5359744564304916 - 0.9665922748484184 \cdot i, \quad (39c)$$

$$\alpha_{21} = 0.1730887968652113 - 0.1694095699539014 \cdot i, \quad (39d)$$

$$\beta_1 = 0.04833419895509594 - 0.3205959705202483 \cdot i, \quad (39e)$$

$$\beta_2 = 0.9516658010449041 - 1.696774337833587 \cdot i; \quad (39f)$$

–  $A$ -устойчивая схема четвертого порядка аппроксимации, удовлетворяющая условиям вплоть до восьмого порядка с малой невязкой:

$$\gamma_1 = 0.09156624026571748 + 0.1156626 \cdot i, \quad (40a)$$

$$\gamma_2 = 0.1584337597342825 + 0.04744101 \cdot i, \quad (40b)$$

$$\gamma_{21} = 0.5747096314647993 - 1.0920696 \cdot i, \quad (40c)$$

$$\alpha_{21} = 0.3053528612690534 - 0.231031 \cdot i, \quad (40d)$$

$$\beta_1 = 0.2803648780046792 - 0.19851145 \cdot i, \quad (40e)$$

$$\beta_2 = 0.7196351219953208 - 2.479090 \cdot i; \quad (40f)$$

Четыре однократные (18) с  $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$  и  $\alpha_{21} = \alpha$  схемы из [24]:

–  $L1$ -устойчивая схема третьего порядка аппроксимации:  
 $\gamma = 0.373644362746761998052461347890 +$   
 $+0.334621822255054965251516680812 \cdot i,$  (41a)

$\alpha = 0.75 - 0.043430163708847229448963102696 \cdot i,$  (41b)

$\beta_1 = 0.40740740740740740740740740741 +$   
 $+2.12703965476765687677243703096 \cdot i,$  (41c)

$\beta_2 = 0.592592592592592592592592593 +$   
 $+0.614932008509085012703998502696 \cdot i;$  (41d)

–  $L2$ -устойчивая схема второго порядка аппроксимации:  
 $\gamma = 0.486035275884123 + 0.2939816200809222 \cdot i,$  (42a)

$\alpha = 0.75 + 0.2832709639812494 \cdot i,$  (42b)

$\beta_1 = 0.407407407407407 + 0.988520861165041 \cdot i,$  (42c)

$\beta_2 = 0.592592592592593 + 0.4757874184140441 \cdot i;$  (42d)

–  $L1$ -устойчивая схема второго порядка аппроксимации:  
 $\gamma = 0.545608108108108108108108108108 +$   
 $+0.489360761125014167703361905174 \cdot i,$  (43a)

$\alpha = 0.75 + 0.261475972832224854176719783569 \cdot i,$  (43b)

$\beta_1 = 0.407407407407407407407407407407 +$   
 $+0.643446312805078934639496722016 \cdot i,$  (43c)

$\beta_2 = 0.592592592592592592592592593 +$   
 $+0.357967350656511229284838231998 \cdot i;$  (43d)

–  $L3$ -устойчивая схема третьего порядка аппроксимации:  
 $\gamma = 0.1867308533646001 + 0.1373188695496175 \cdot i,$  (44a)

$\alpha = 1.6548444385168515 + 1.8590717466829718 \cdot i,$  (44b)

$\beta_1 = 0.8782793127461838 + 0.8030721661968408 \cdot i,$  (44c)

$\beta_2 = 0.1217206872538162 + 0.01138505040995394 \cdot i;$  (44d)

Классическая (18) двустадийная (33) схема из [23]:

–  $L2$ -устойчивая схема четвёртого порядка аппроксимации:  
 $\gamma_1 = 0.5 - 0.09383936958788540 \cdot i,$  (45a)

$\gamma_2 = 0.8020864628576681 + 0.6788447774092475 \cdot i,$  (45b)

$\gamma_{21} = 0.5250462591428808 + 1.453646467184172 \cdot i,$  (45c)

$\alpha_{21} = -1.287823315510611 \cdot i,$  (45d)

$\beta_1 = 0.5911953963678174 + 0.04839522687157496 \cdot i,$  (45e)

$\beta_2 = 0.4088046036321826 - 0.0080087451314182441 \cdot i;$  (45f)

Три классические (18) двустадийные (33) схемы с действительной второй стадией из [23]:

–  $L1$ -устойчивая схема четвёртого порядка аппроксимации:

$$\gamma_1 = 0.166666666666667 + 0.166666666666667 \cdot i, \quad (46a)$$

$$\gamma_2 = 0.25, \quad (46b)$$

$$\gamma_{21} = 0.5 - i, \quad (46c)$$

$$\alpha_{21} = -0.041666666666667 \cdot i, \quad (46d)$$

$$\beta_1 = -0.333333333333333 - 1.333333333333333 \cdot i, \quad (46e)$$

$$\beta_2 = 1.333333333333333; \quad (46f)$$

–  $L1$ -устойчивая схема четвёртого порядка аппроксимации:

$$\gamma_1 = 0.166666666666667 + 0.166666666666667 \cdot i, \quad (47a)$$

$$\gamma_2 = 0.25, \quad (47b)$$

$$\gamma_{21} = 0.5 - 0.875 \cdot i, \quad (47c)$$

$$\alpha_{21} = 0.75 - 0.229166666666667 \cdot i, \quad (47d)$$

$$\beta_1 = 0.58974358974358974358974358974359 + 0.051282051282051282051282051282051 \cdot i, \quad (47e)$$

$$\beta_2 = 0.41025641025641025641025641025641; \quad (47f)$$

–  $L1$ -устойчивая схема четвёртого порядка аппроксимации:

$$\gamma_1 = 0.166666666666667 + 0.166666666666667 \cdot i, \quad (48a)$$

$$\gamma_2 = 0.25, \quad (48b)$$

$$\gamma_{21} = -2.875 \cdot i, \quad (48c)$$

$$\alpha_{21} = 0.75 + 0.0208333333333333333333333333333333 \cdot i, \quad (48d)$$

$$\beta_1 = 0.407407407407407 + 0.962962962962963 \cdot i, \quad (48e)$$

$$\beta_2 = 0.592592592592593; \quad (48f)$$

Две двустадийные (33) схемы из [22]:

–  $L4$ -устойчивая “ваннеровская” (20) схема четвёртого порядка аппроксимации:

$$\gamma_1 = 0.4573733434972976 + 0.2351004879985425 \cdot i, \quad (49a)$$

$$\gamma_2 = 0.04262665650270241 + 0.3946329531721134 \cdot i, \quad (49b)$$

$$\alpha_{21} = 0.75 + 0.262781281948490 \cdot i, \quad (49c)$$

$$\pi_{21} = -0.292607985403924 + 0.293692606692083 \cdot i, \quad (49d)$$

$$\beta_1 = 0.407407407407407 + 0.5987767006624821 \cdot i, \quad (49e)$$

$$\beta_2 = 0.592592592592593 - 0.311397987091215 \cdot i; \quad (49f)$$

–  $L4$ -устойчивая общая (19) схема четвёртого порядка аппроксимации:

$$\gamma_1 = 0.4573733434972976 + 0.2351004879985425 \cdot i, \quad (50a)$$



$$\gamma_2 = 0.04262665650270241 + 0.3946329531721134 \cdot i, \quad (50b)$$

$$\alpha_{21} = 0.914746686994595 + 0.654690839628108 \cdot i, \quad (50c)$$

$$\delta_{21} = 0.745190344601552 + 3.042955553310975 \cdot i, \quad (50d)$$

$$\pi_{21} = -0.231722037046312 + 0.0708112502725814 \cdot i, \quad (50e)$$

$$\beta_1 = 0.278406560806458 - 0.919622543853624 \cdot i, \quad (50f)$$

$$\beta_2 = 0.721593439193542 + 0.201477377227565 \cdot i. \quad (50g)$$

Всего 17 штук схем Розенброка с комплексными коэффициентами.

## 5. Тестовая задача

Прежде чем начать использовать схему в реальных расчётах, нужно убедиться, что она удовлетворяет простым требованиям, сформулированным в конце параграфа 1.2. С первыми двумя пунктами требования разобратся достаточно легко. Сама идеология конструирования схем Рунге-Кутты и методов Розенброка (см. параграф 1.3) подразумевает аппроксимацию дифференциальной задачи в обычном смысле и нужный тип устойчивости. Перейдём к последнему этапу отбора схем, тестированию.

Всестороннее методическое тестирование разностных схем позволяет существенно дополнить теоретические изыскания, возможности которых ограничены, когда дело касается скверности алгоритмической реализации разностной схемы и технических аспектов реализации реальной вычислительной системы. Численные эксперименты также играют важную роль проверки достоверности и уточнения полученных результатов – фундаментальных общенаучных понятий. Схемы тестируются на задачах, для которых аналитическое выражение или характерное поведение точного решения известно или процесс численного решения имеет прогнозируемые трудности. Жёсткость задачи – одна из таких прогнозируемых трудностей.

Тестирование разностных схем на оригинальных жёстких задачах не теряет актуальности. В качестве одного из таких тестов можно взять квазилинейную задачу теплопроводности.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\kappa \text{grad} T), \quad \kappa = T^\alpha, \quad (51)$$

где  $T(\mathbf{r}, t)$  – зависящее от времени пространственное распределение температуры среды,  $\kappa$  – коэффициент теплопроводности в среде,  $\alpha$  – характерная для среды степень нелинейности коэффициента теплопроводности. Уравнения такого типа встречаются при описании процессов теплопередачи в высокотемпературной среде (спитцеровская теплопроводность, лучистая теплопроводность). Аналогичные уравнения описывают процессы фильтрации.

Уравнение (51) в одномерном случае

$$T_t = (T^\alpha T_y)_y \quad (52)$$

в простой области  $0 \leq t \leq T$ ,  $0 \leq y \leq y_N$  с начальными и краевыми условиями  $T|_{t=0} = T_0$ ,  $T|_{y=y_0, y_N} = T_0$  (при  $T_0 = 0$ ) обладает точным автомодельным решением типа “бегущей волны”

$$T_{PR}(\xi) = \begin{cases} \sqrt[\alpha]{\alpha D} (-\xi)^{1/\alpha}, & \xi \leq 0 \\ T_0, & \xi > 0 \end{cases}, \quad \xi = y - Dt, \quad (53)$$

где  $D$  – постоянная скорость распространения “волны”,  $T_0$  – малое “фооновое” значение температуры. Функция (53), так называемая “тепловая волна”, является обобщённым решением нелинейного уравнения теплопроводности в том смысле, что она в некоторой области  $\Omega$  удовлетворяет интегральному закону сохранения

$$\iint_{\Omega} \left( \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial y} \left( T^\alpha \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right) dy dt = 0, \quad (54)$$

так как из интегрального (54) соотношения и получается дифференциальное уравнение (52).

Задачи вида (51) с решением типа “тепловой фронт” обладает рядом подробно описанных в [2, 25, 26] характерных особенностей и вычислительных трудностей, присущих вышеупомянутым прикладным задачам. Например, в зоне перед фронтом, по которой распространяется тепловая волна, “фооновая” температура  $T_0$  крайне мала и характерное время перестроения структуры – велико. В зоне за фронтом – наоборот – распределение температуры меняется намного быстрее, как результат, непосредственно на “тепловом фронте” наблюдается резкий перепад температуры от высоких значений в уже возмущённой прохождением волны области пространства до фонового значения. Для численного решения задачи с перечисленными особенностями решения, в данном случае обусловленными тем, что коэффициент теплопроводности является быстроменяющейся (степенной) функцией температуры, использование явных схем (6) нецелесообразно. Ввиду повышенных требований явных схем к малой величине шага для удовлетворения условиям устойчивости [25].

Одномерный случай уравнения (51) был предложен Н.Н. Калиткиным в качестве теста для классической одностадийной схемы Розенброка с комплексными коэффициентами CROS. Наличие точного решения сложной структуры и степени нелинейности  $\alpha$  в качестве параметра, от которого зависит жёсткость задачи, делает тесты на ней весьма наглядными для уточнения практического порядка аппроксимации, свойств устойчивости и монотонности разностных схем. Надо сказать, что на параболических задачах линейные разностные схемы порядка выше первого по времени могут оказаться немонотонны [26].

## 5.1. Постановка разностной задачи

Двумерный вариант задачи (51)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right), \quad (55a)$$

$$\kappa(T) = T^\alpha \quad (55b)$$

с начальными и краевыми условиями

$$T|_{t=0} = T_0, \quad (56a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_0, x_M} = 0, \quad (56b)$$

$$T|_{y=y_N} = T_0, \quad (56c)$$

$$T|_{y=y_0} = T_{PR}(-Dt) \quad (56d)$$

решался численно методом прямых в простой области (см. рис. 1)

$$0 \leq t \leq T, \quad (57a)$$

$$x_0 \leq x \leq x_M, \quad (57b)$$

$$y_0 \leq y \leq y_N \quad (57c)$$

на равномерной прямоугольной пространственной сетке

$$x^{j+1} = x^j + h_x, \quad (58a)$$

$$y^{k+1} = y^k + h_y. \quad (58b)$$

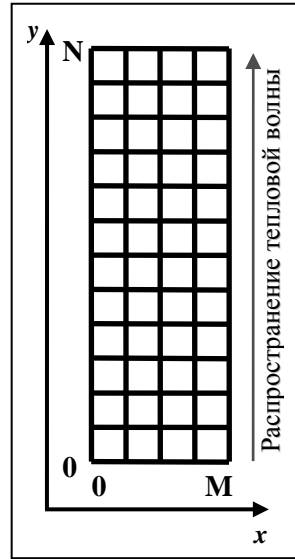


Рис. 1. Область счёта

Аппроксимация по пространству осуществлялась в соответствии с рекомендациями, приведёнными в [25] и [2]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\kappa(T)_{j+0.5,k} (T_{j+1,k} - T_{j,k}) - \kappa(T)_{j-0.5,k} (T_{j,k} - T_{j-1,k})}{h_x^2}, \quad (59a)$$

$$\kappa(T)_{j+0.5,k} = \frac{(T_{j+1,k})^\alpha + (T_{j,k})^\alpha}{2}. \quad (59b)$$

Дискретизация по времени осуществлялась при помощи перечисленных в пункте 4 схем Розенброка с комплексными коэффициентами (26, 31, 36-50), то есть, фактически, согласно классическим рекомендациям [25, 26, 2, 3].

Пространственная аппроксимация (59) учитывает структуру решения в окрестности фронта тепловой волны. Линейная интерполяция коэффициента теплопроводности (59b) является наилучшей для квазилинейного случая  $\kappa(T) = T^\alpha$ : она обеспечивает прохождение тепловым фронтом области резкого перепада температуры и сравнительно лучшую точность. Как выяснилось в результате численных экспериментов аппроксимация вида

$$\kappa(T)_{j+0.5k} = \left( \frac{T_{j+1,k} + T_{j,k}}{2} \right)^\alpha \quad (60)$$

оказалась и вовсе неприемлемой ввиду своей более низкой, по сравнению с (59b), точности, что хорошо заметно при применении к системе ОДУ, полученной в результате пространственной аппроксимации «(59a) + (60)» уравнения (55), методов Розенброка.

Из всего сказанного в предыдущих пунктах можно заключить, что при применении метода прямых к двумерному уравнению в частных производных (55), полученная дифференциальная задача точно будет немягкой. Схемы, показавшие приемлемое поведение на данной задаче, впоследствии можно применять как для решения уравнения этого типа, так и ряда других уравнений более общего вида, например, уравнений квазидиффузии для переноса излучения.

## 6. Результаты

Расчёт велся с  $x_M = 0.5$ ,  $y_N = 2.5$ ,  $D = 1.2$ ,  $T_0 = 10^{-4}$ , с постоянным разбиению по поперечному направлению распространения тепловой волны  $h_x = 0.1$  и на сгущающихся сетках по существенной пространственной координате  $y$ :  $h_y = 0.1, 0.05, 0.025$ . Стратегия выбора шага по времени не применялась, сгущение шага по времени  $\tau = 0.02, 0.01, 0.005, 0.0025, 0.00125$  было проведено, начиная с такого шага, что при мельчайшем использованном шаге по пространству он обеспечивал прохождение “тепловой волной” одной пространственной ячейки.

Для обращения матриц типа матрицы Якоби  $(\mathbf{E} - \tau \cdot \gamma \partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y})$  использовался метод Гаусса. По результатам расчётов схемы были сгруппированы по типу ошибок, давших основной вклад в большинство срывов при расчёте по данной схеме.

На рисунках представлены профили температурной волны, вдоль существенной координаты посередине расчётной области, в таблицах приведены нормы отклонения численного решения по указанной в заголовке схеме от точного (52) решения одномерной задачи (53). Максимальное отклонение от точного решения  $\|\text{error}\|_C$  показывает надёжность схемы, сред-

неквадратичное уклонение  $\|\text{error}\|_l$  даёт представление о реальном порядке аппроксимации.

Типы возникающих ошибок:

– Отрицательный провал перед фронтом. Перед фронтом тепловой волны появляется небольшой предвестник в виде понижения температуры, если предвестник становится отрицательным – счёт срывается. Наблюдался для схем (41), (42);

– Отрицательные значения на первой стадии. То же самое, что и отрицательный провал перед фронтом, только с большей зоной влияния и на первой стадии. Такие схемы не считали больше одного шага по времени, при дроблении шага наблюдались сильные *искажения фронта*, или *разворот фронта*. Случай с нецелым показателем нелинейности для этих схем оказался и вовсе несчитаемым. Наблюдалось для схем (36), (45), (50);

– Искращения фронта. Проявлялись в сильной порче (необоснованное возрастание, зануление частей распределения температуры, уход в отрицательную область) волнового фронта вдоль существенной компоненты. Так или иначе проявлялось при счёте схемами (39), (46), (47), (49);

– Разворот фронта. Наиболее подозрительное и часто встречающееся искажение. Представляет собой осцилляции распределения температуры поперёк существенной координаты с уходом в отрицательную область. Наблюдается для схем (37), (38), (43), (44), (48).

Большинство схем не справилось лишь с откровенно немягкими случаями задачи, в которых зачастую сочетались высокая степень нелинейности и мелкая пространственная сетка (плохая обусловленность), при относительно крупных шагах по времени. Ниже приведены таблицы и рисунки, иллюстрирующие вышесказанное.

Забегаая вперёд, отметим, что со всеми постановками справилась лишь схема (40), классическая схема (26) не справилась с одной (самой жёсткой) постановкой, а её “*двустадийная*” *модификация* (речь о которой пойдёт в самом конце) – с двумя (самыми жёсткими).

### 6.1. L4-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 1. Схема (36), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100				0.1264579	0.1520087
	0.050					0.0944950
	0.025					0.0542318
4.0	0.100	0.5454873	0.5387582	0.1562061	0.2048287	0.2512202
	0.050	0.5459867	0.4600350	0.0940216	0.1332723	0.1742814
	0.025		0.4591023	0.0744845	0.0802668	0.1134582
8.0	0.100	0.8428330	0.8245034	0.1831266	0.1975232	0.2469840
	0.050		0.7728773	0.2174767	0.1720998	0.1824286
	0.025			0.2931650	0.2024550	0.1608431

Таблица 2. Схема (36), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100				0.0253666	0.0304577
	0.050					0.0134089
	0.025					0.0054681
4.0	0.100	0.0627599	0.0606327	0.0322156	0.0414746	0.0505844
	0.050	0.0420155	0.0375889	0.0149631	0.0194545	0.0249673
	0.025		0.0243555	0.0091456	0.0090453	0.0117218
8.0	0.100	0.1219970	0.1151427	0.0469578	0.0508725	0.0577044
	0.050		0.0784521	0.0332648	0.0310168	0.0334982
	0.025			0.0296414	0.0218780	0.0204042

Схема (36) может выдать отрицательные значения на первой стадии.

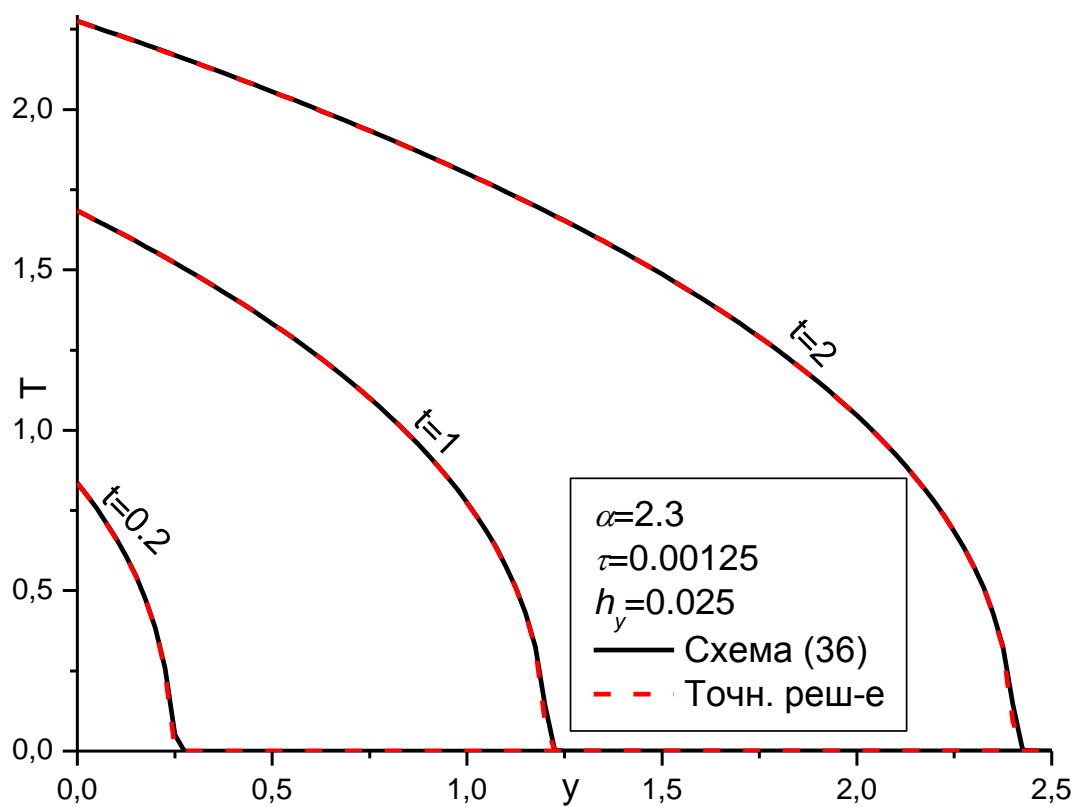


Рис 1. Посчитавшиеся решение для малой степени нелинейности. Схема (36)

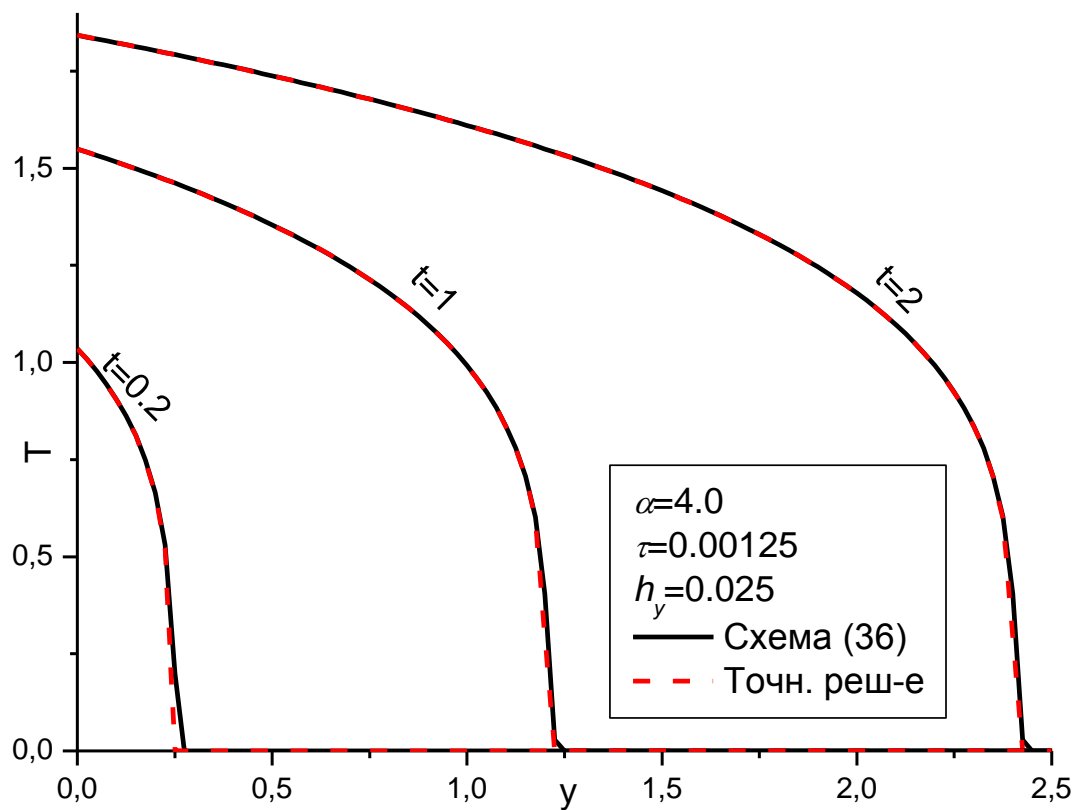


Рис 2. Посчитавшиеся решение для чётной степени нелинейности. Схема (36)

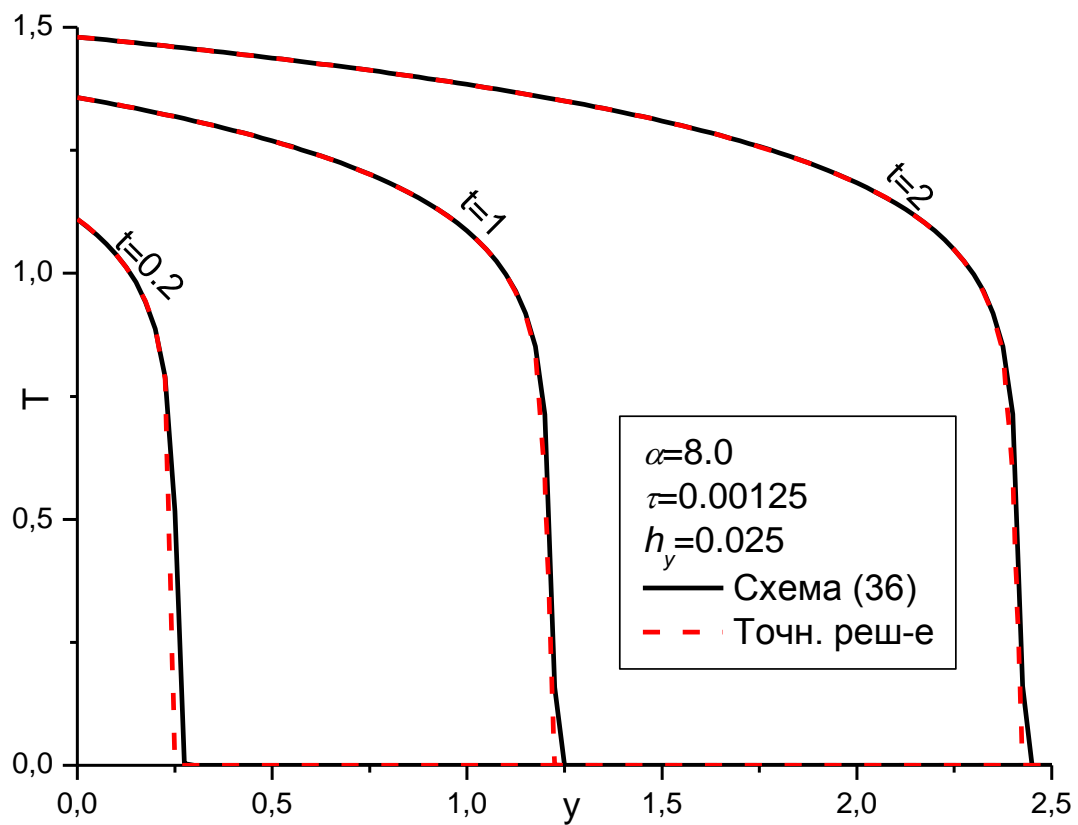


Рис 3. Посчитавшиеся решение для чётной степени нелинейности. Схема (36)



## 6.2. L3-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 3. Схема (37), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2480054	0.2421557	0.0968370	0.1266559	0.1521059
	0.050	0.2108933	0.1839398	0.0495279	0.0725627	0.0946399
	0.025	0.3035187	0.1560023	0.0238079	0.0373689	0.0544499
4.0	0.100	0.5481730	0.5399458	0.1567063	0.2050796	0.2513461
	0.050	0.5148033	0.4620225	0.0948083	0.1336810	0.1744888
	0.025		0.4328813	0.0758869	0.0808970	0.1137945
5.6	0.100	0.7137332	0.7062116	0.1674505	0.2200043	0.2710402
	0.050		0.6311117	0.1112623	0.1497278	0.1963687
	0.025			0.1634828	0.1000669	0.1335610
8.0	0.100	0.8419736	0.8257375	0.1838669	0.1976336	0.2470401
	0.050		0.7720897	0.2189772	0.1727582	0.1825263
	0.025			0.2955860	0.2037499	0.1614340

Таблица 4. Схема (37), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0258747	0.0244170	0.0195008	0.0254082	0.0304779
	0.050	0.0158367	0.0136161	0.0072182	0.0103410	0.0134307
	0.025	0.0112434	0.0081356	0.0029405	0.0038581	0.0054927
4.0	0.100	0.0635523	0.0609168	0.0323263	0.0415278	0.0506107
	0.050	0.0423870	0.0379905	0.0151034	0.0195188	0.0249985
	0.025		0.0246435	0.0093280	0.0091248	0.0117594
5.6	0.100	0.0916138	0.0877723	0.0380416	0.0465323	0.0559372
	0.050		0.0573422	0.0216033	0.0241433	0.0294366
	0.025			0.0173137	0.0136974	0.0152761
8.0	0.100	0.1216962	0.1155347	0.0471022	0.0509321	0.0577305
	0.050		0.0784577	0.0334842	0.0311074	0.0335365
	0.025			0.0298951	0.0220119	0.0204618

Схема (37) может развернуть фронт.

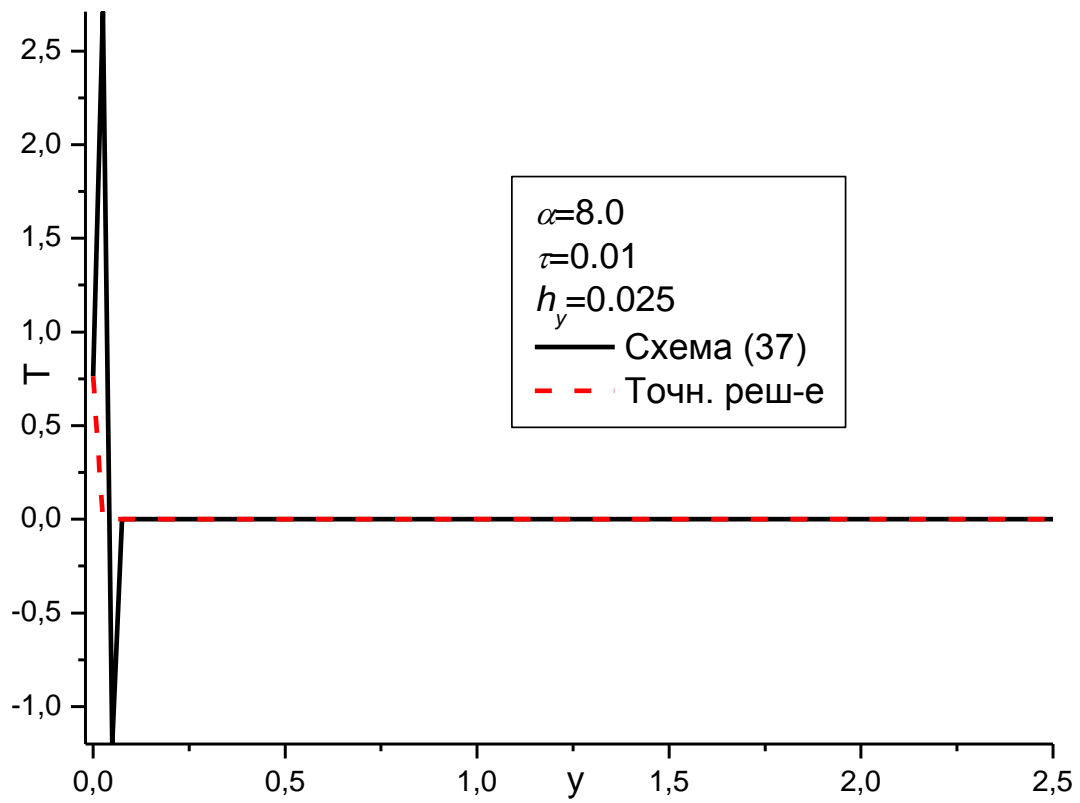


Рис 4. Разворот фронта. Схема (37).

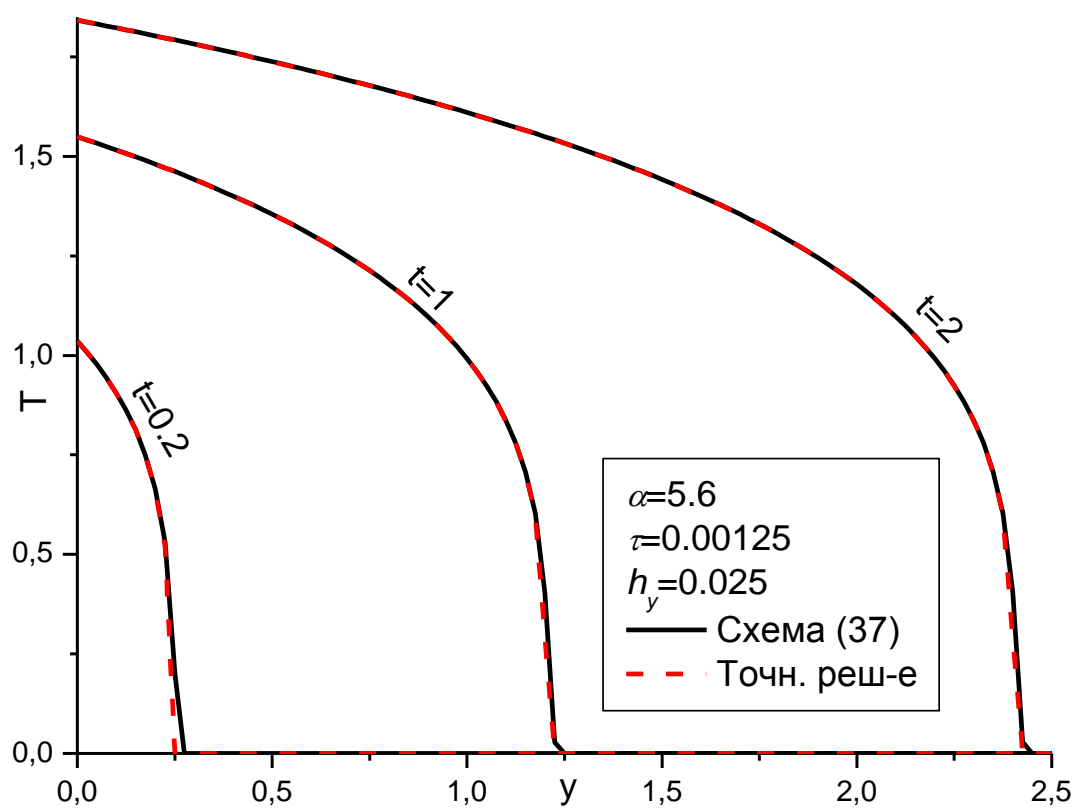


Рис 5. Схема (37).

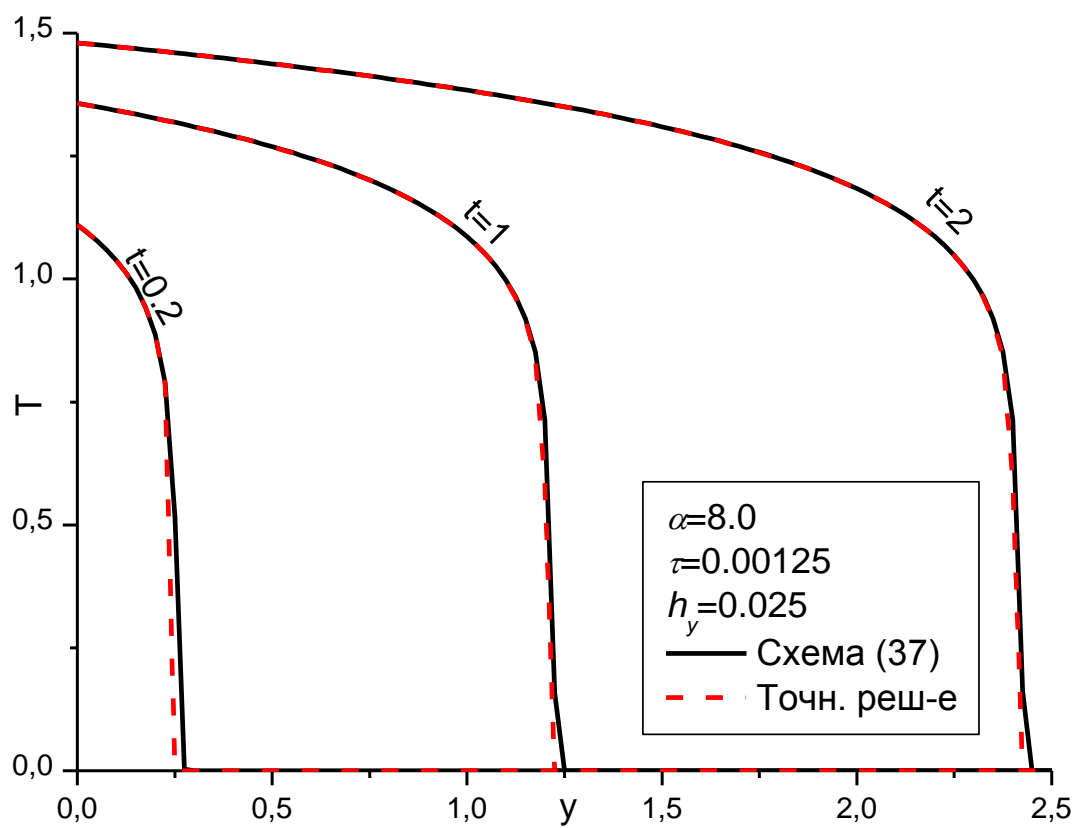
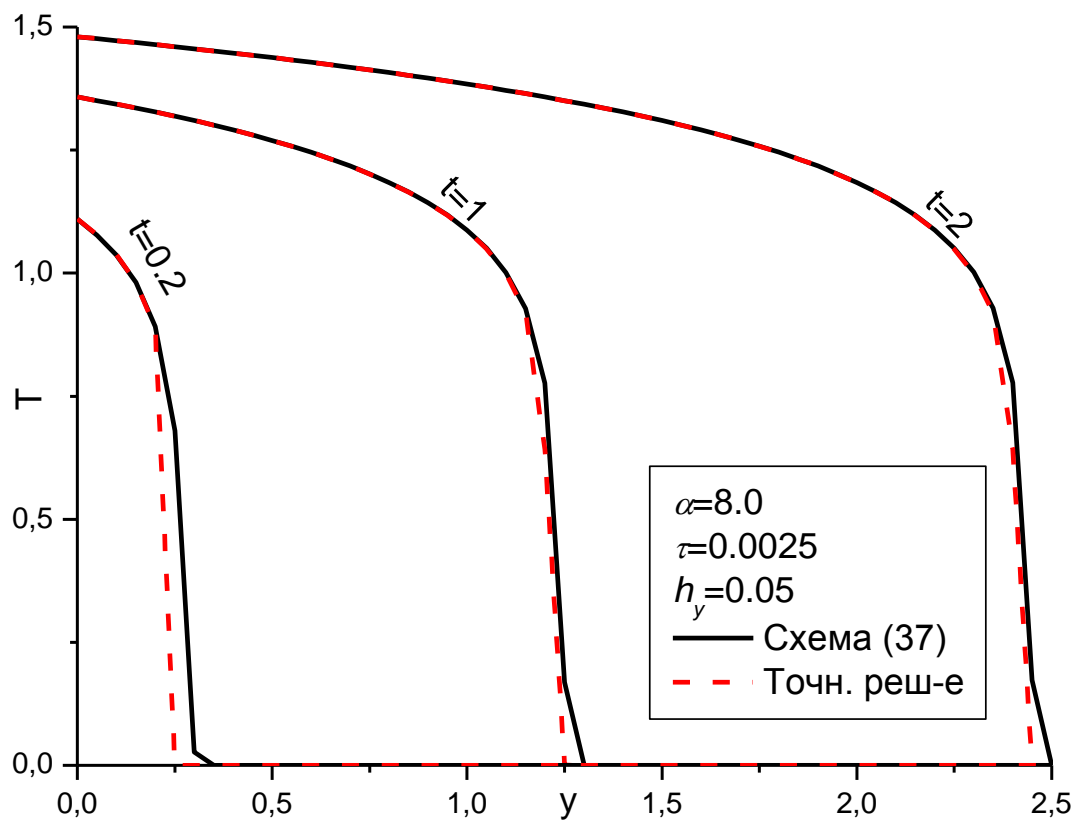


Рис 6. Схема (37).

### 6.3. L2-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 5. Схема (38), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2449871	0.2405030	0.0959779	0.1262252	0.1518908
	0.050	0.2056336	0.1816636	0.0482869	0.0719258	0.0943206
	0.025		0.1521112	0.0221168	0.0364457	0.0539781
4.0	0.100	0.5442996	0.5378066	0.1556773	0.2045354	0.2510674
	0.050	0.5093847	0.4586954	0.0933009	0.1328210	0.1740338
	0.025		0.4283289	0.0737303	0.0796254	0.1130742
5.6	0.100	0.7103256	0.7044999	0.1666861	0.2195824	0.2708192
	0.050	0.8233147	0.6281227	0.1094086	0.1490613	0.1960013
	0.025		0.7274446	0.1597778	0.0983950	0.1329772
8.0	0.100	0.8394809	0.8246853	0.1824155	0.1974002	0.2469170
	0.050		0.7698041	0.2162323	0.1714137	0.1823160
	0.025			0.2903460	0.2011833	0.1601883

Таблица 6. Схема (38), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0256128	0.0241761	0.0193218	0.0253182	0.0304333
	0.050	0.0161422	0.0134805	0.0070593	0.0102470	0.0133832
	0.025		0.0082564	0.0028911	0.0037696	0.0054428
4.0	0.100	0.0628646	0.0605078	0.0321017	0.0414127	0.0505526
	0.050	0.0417988	0.0375622	0.0148498	0.0193850	0.0249301
	0.025		0.0242379	0.0090382	0.0089706	0.0116795
5.6	0.100	0.0908416	0.0873189	0.0378171	0.0464238	0.0558840
	0.050	0.0620303	0.0568326	0.0213026	0.0240025	0.0293689
	0.025		0.0378712	0.0169108	0.0135057	0.0151876
8.0	0.100	0.1208710	0.1150857	0.0468213	0.0508058	0.0576732
	0.050		0.0778935	0.0330885	0.0309235	0.0334538
	0.025			0.0293619	0.0217501	0.0203412

Схема (38) может развернуть фронт.

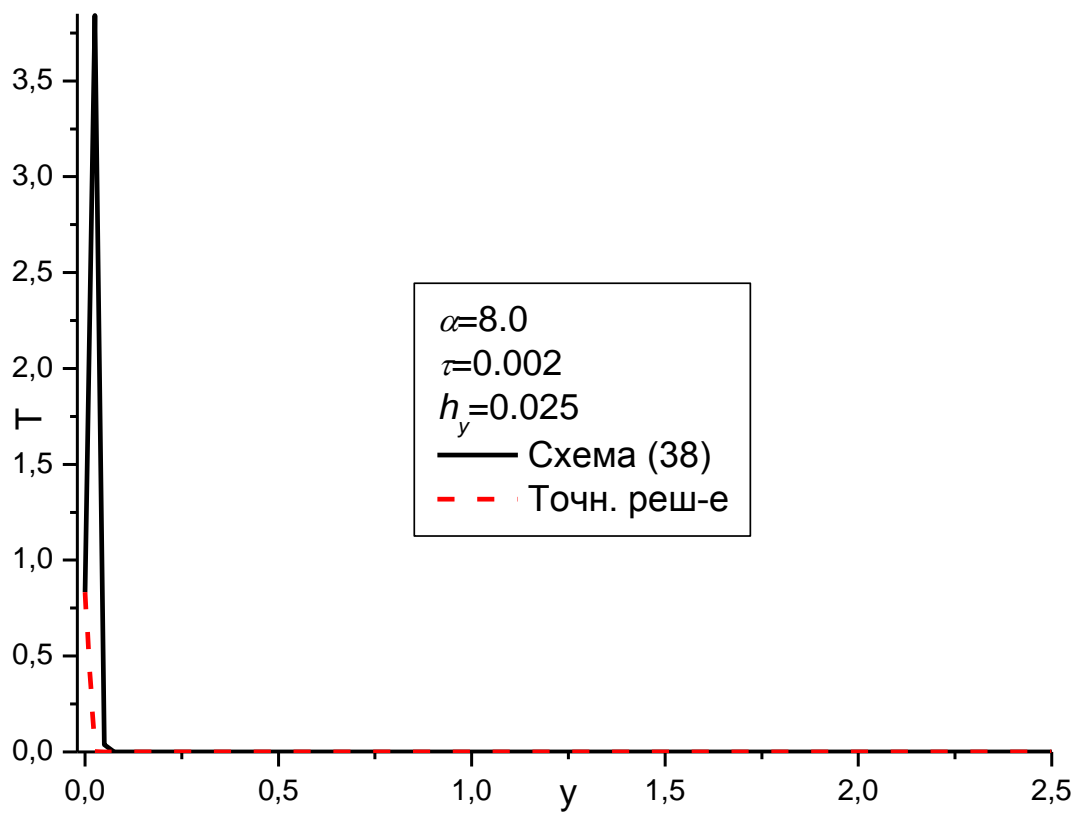


Рис 7. Разворот фронта. Схема (38).

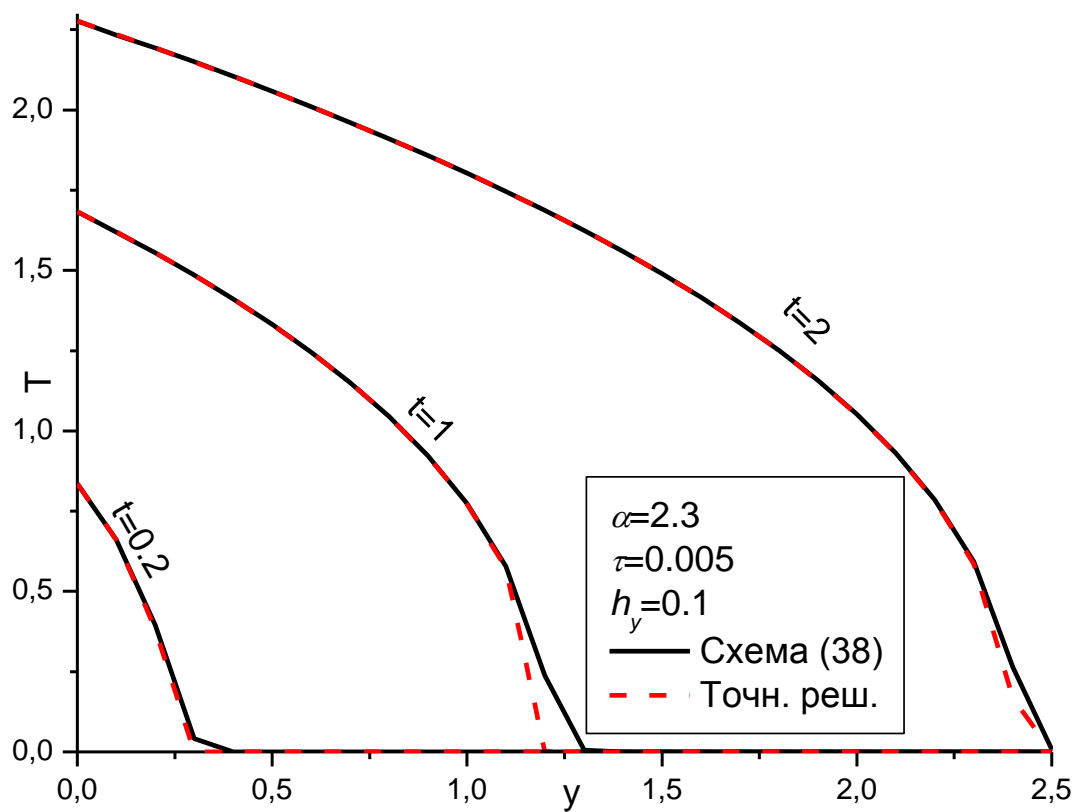


Рис 8. Схема (38).

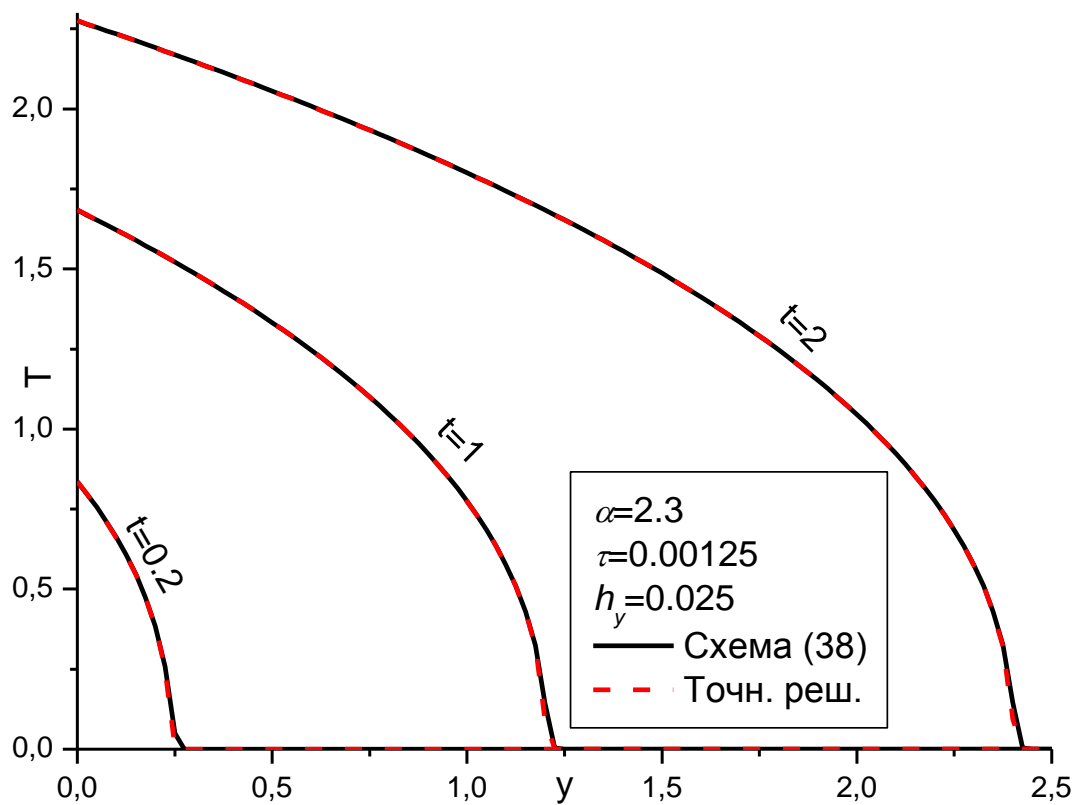
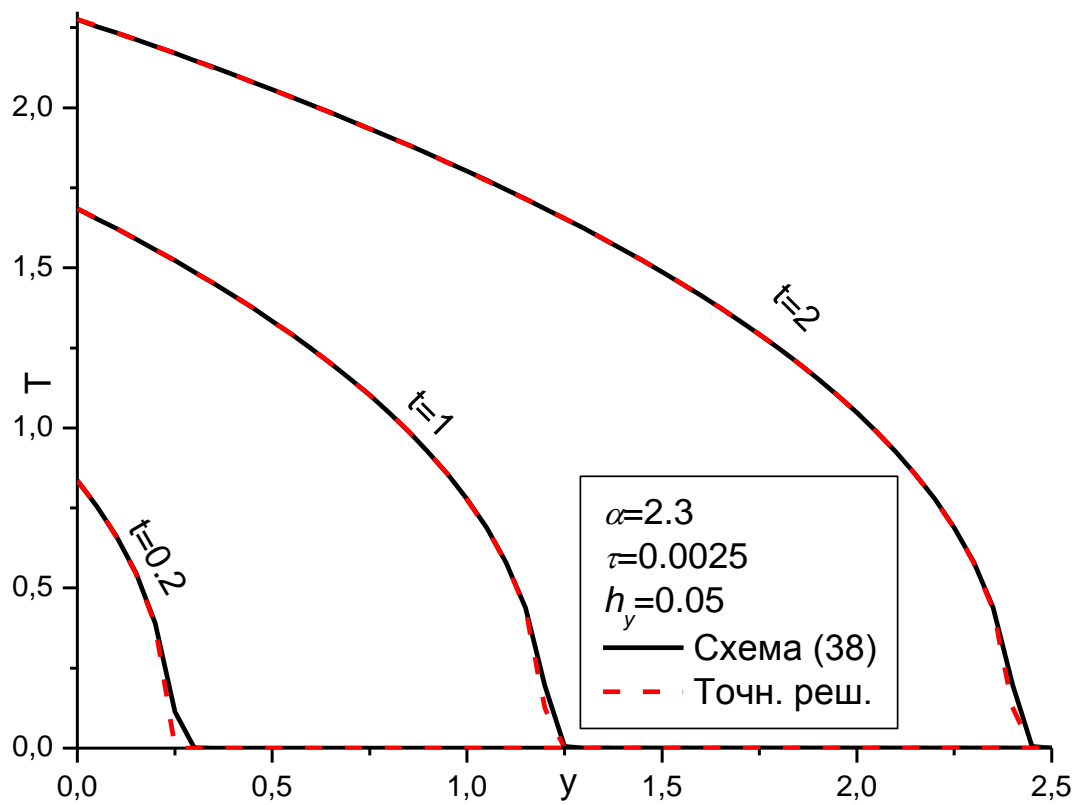


Рис 9. Схема (38).

#### 6.4. L1-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 7. Схема (39), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.3172555	0.2772479	0.1145520	0.1354953	0.1565106
	0.050	0.3000248	0.2356344	0.0754406	0.0856902	0.1011869
	0.025	0.4002192	0.2219402	0.0589286	0.0565688	0.0641710
4.0	0.100	0.6255510	0.5828721	0.1772733	0.2160664	0.2570055
	0.050	0.6206014	0.5273199	0.1243648	0.1508715	0.1836716
	0.025		0.5218475	0.1338448	0.1056398	0.1281727
5.6	0.100	0.7682330	0.7386305	0.1824060	0.2284119	0.2754953
	0.050	0.7579429	0.6794623	0.1544095	0.1627675	0.2036906
	0.025		0.6696910	0.2547677	0.1385355	0.1449603
8.0	0.100	0.8687916	0.8450230	0.2149406	0.2022865	0.2495185
	0.050		0.7966778	0.2799497	0.2014660	0.1867215
	0.025			0.4119955	0.2599575	0.1879110

Таблица 8. Схема (39), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0402442	0.0310346	0.0235347	0.0273163	0.0314044
	0.050	0.0324991	0.0215347	0.0119269	0.0124913	0.0144413
	0.025	0.0292789	0.0173835	0.0082808	0.0063881	0.0066389
4.0	0.100	0.0815530	0.0700506	0.0369971	0.0438840	0.0517966
	0.050	0.0626508	0.0489137	0.0207311	0.0222998	0.0263983
	0.025		0.0372375	0.0166638	0.0124882	0.0134150
5.6	0.100	0.1101601	0.0976612	0.0427591	0.0487575	0.0570237
	0.050	0.0837561	0.0692061	0.0283374	0.0271016	0.0308263
	0.025		0.0521687	0.0270555	0.0179312	0.0171304
8.0	0.100	0.1384381	0.1253586	0.0531144	0.0535677	0.0589127
	0.050		0.0899678	0.0422676	0.0350351	0.0352601
	0.025			0.0418252	0.0277373	0.0230235

Для схемы (39) может наблюдаться искажение фронта.

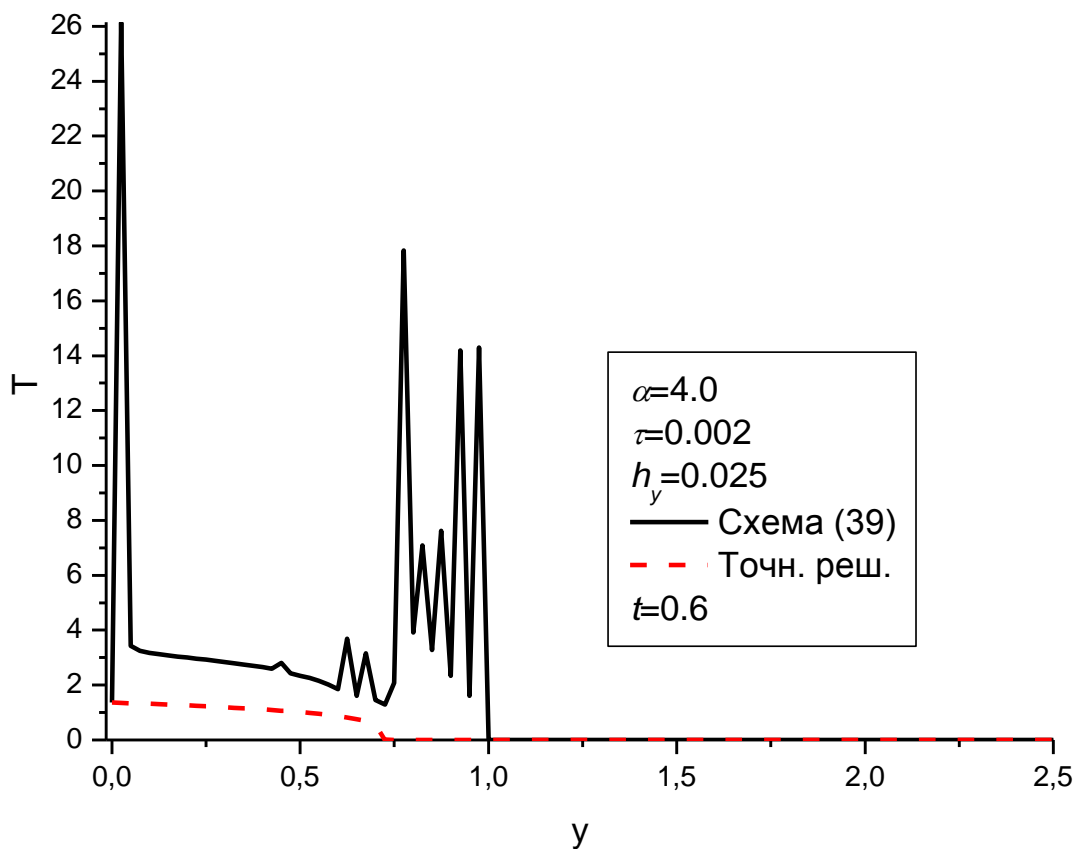


Рис 10. Искажение фронта. Схема (39).

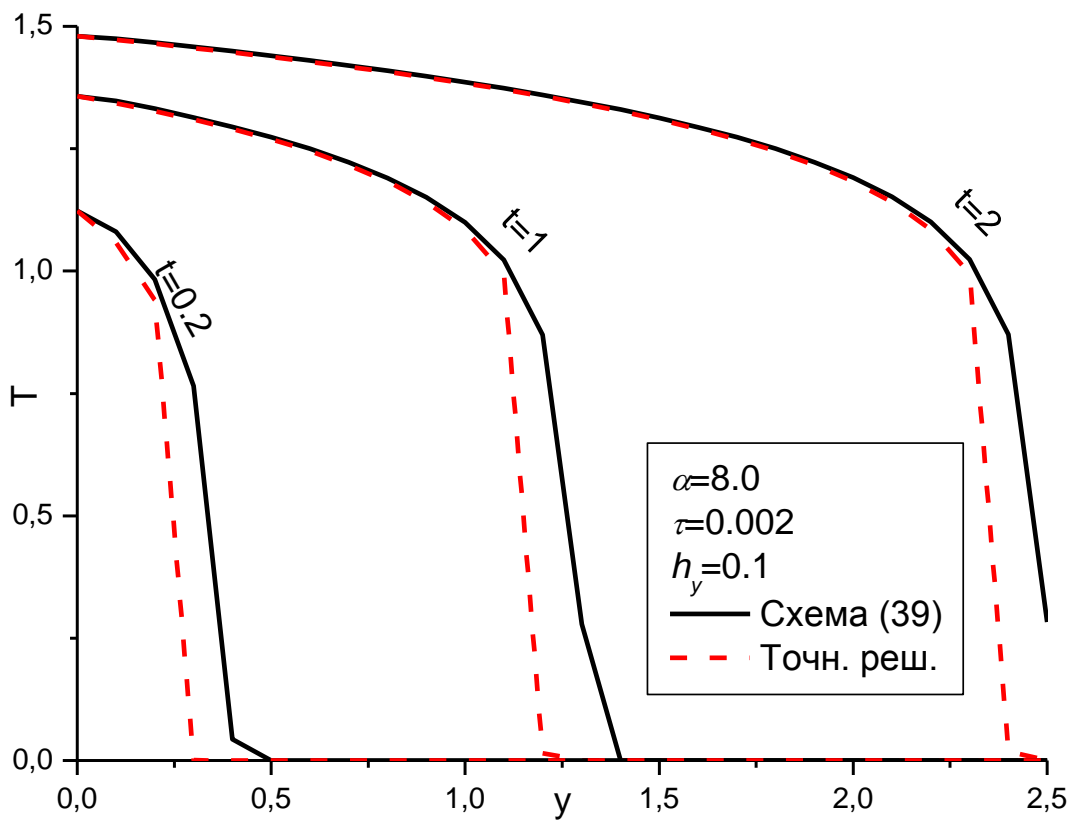


Рис 11. Схема (39).



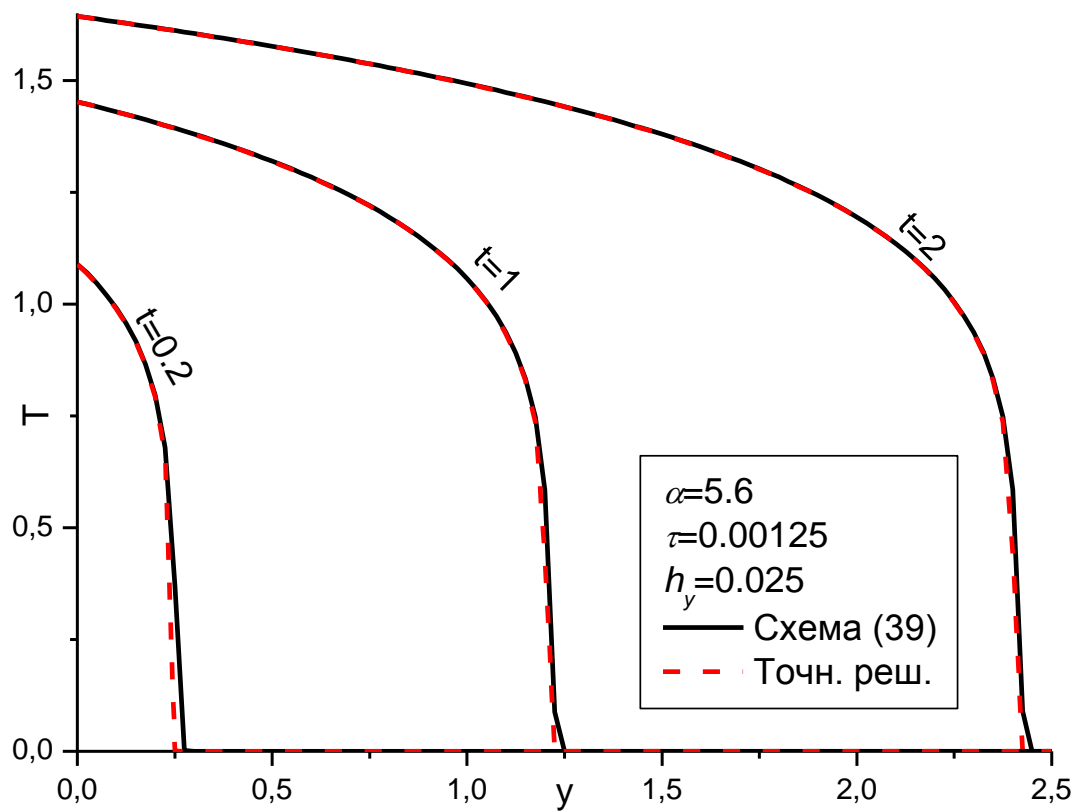
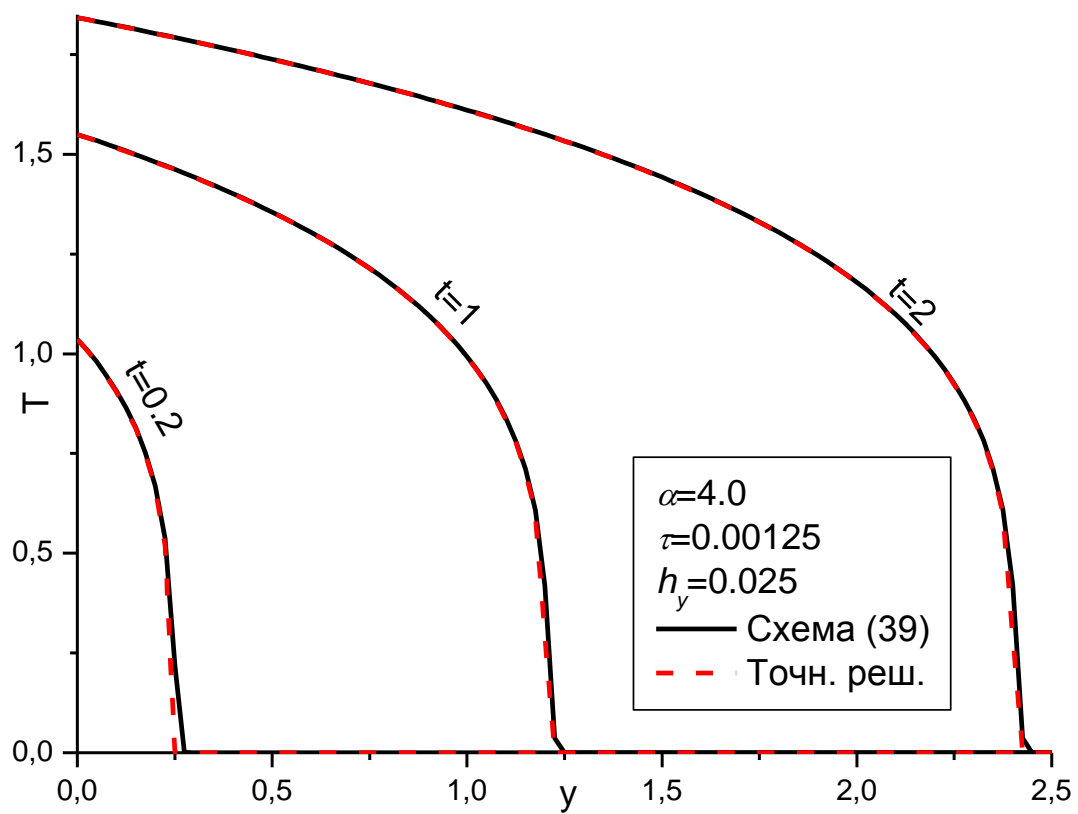


Рис 12. Схема (39).

## 6.5. A-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 9. Схема (40), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2884214	0.2626717	0.1072371	0.1318472	0.1546941
	0.050	0.2573980	0.2142027	0.0647903	0.0802737	0.0984859
	0.025	0.3195215	0.1904069	0.0448500	0.0486882	0.0601621
4.0	0.100	0.5955075	0.5656662	0.1689370	0.2115733	0.2546821
	0.050	0.5733591	0.5021648	0.1126500	0.1439126	0.1799186
	0.025	0.5560272	0.4821216	0.1081151	0.0958524	0.1223572
5.6	0.100	0.7475146	0.7259774	0.1764160	0.2249989	0.2736735
	0.050	0.7209210	0.6613217	0.1358343	0.1575523	0.2007205
	0.025	0.7643170	0.6369791	0.2157540	0.1220243	0.1404050
8.0	0.100	0.8553680	0.8368739	0.2018987	0.2003969	0.2485059
	0.050	0.8970230	0.7843719	0.2542668	0.1894521	0.1850186
	0.025	1.2735292	0.8225737	0.3630487	0.2363713	0.1768505

Таблица 10. Схема (40), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0336558	0.0280828	0.0218167	0.0265163	0.0310195
	0.050	0.0247367	0.0179151	0.0098892	0.0115732	0.0140169
	0.025	0.0211624	0.0131412	0.0059771	0.0052934	0.0061488
4.0	0.100	0.0736566	0.0661663	0.0350683	0.0429136	0.0513084
	0.050	0.0534554	0.0442055	0.0183803	0.0211523	0.0258220
	0.025	0.0422722	0.0317308	0.0135040	0.0110856	0.0127322
5.6	0.100	0.1018641	0.0934637	0.0407958	0.0478399	0.0565766
	0.050	0.0742146	0.0640792	0.0254859	0.0258718	0.0302534
	0.025	0.0563251	0.0461951	0.0229009	0.0161427	0.0163600
8.0	0.100	0.1301111	0.1211119	0.0505909	0.0524703	0.0584232
	0.050	0.0986960	0.0846969	0.0385687	0.0333910	0.0345432
	0.025	0.0660670	0.0626812	0.0368025	0.0253352	0.0219529

Схема (40) – единственная из всех схем, которая справилась со всеми постановками.

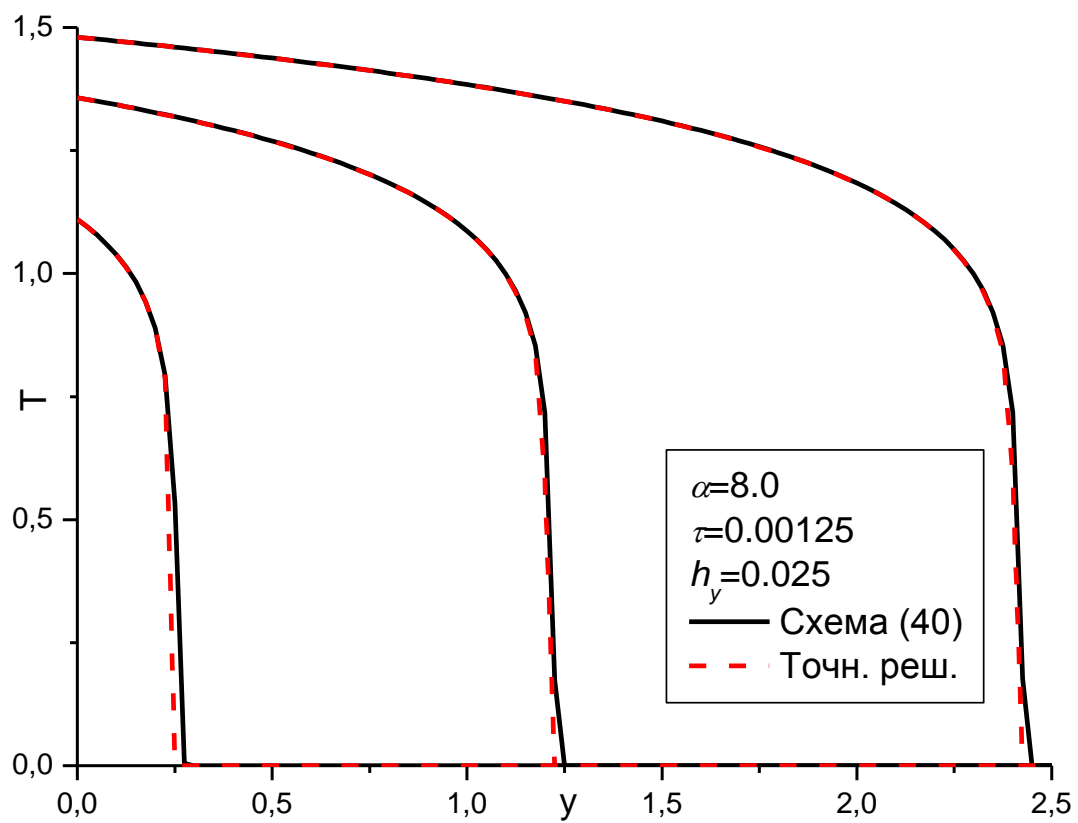
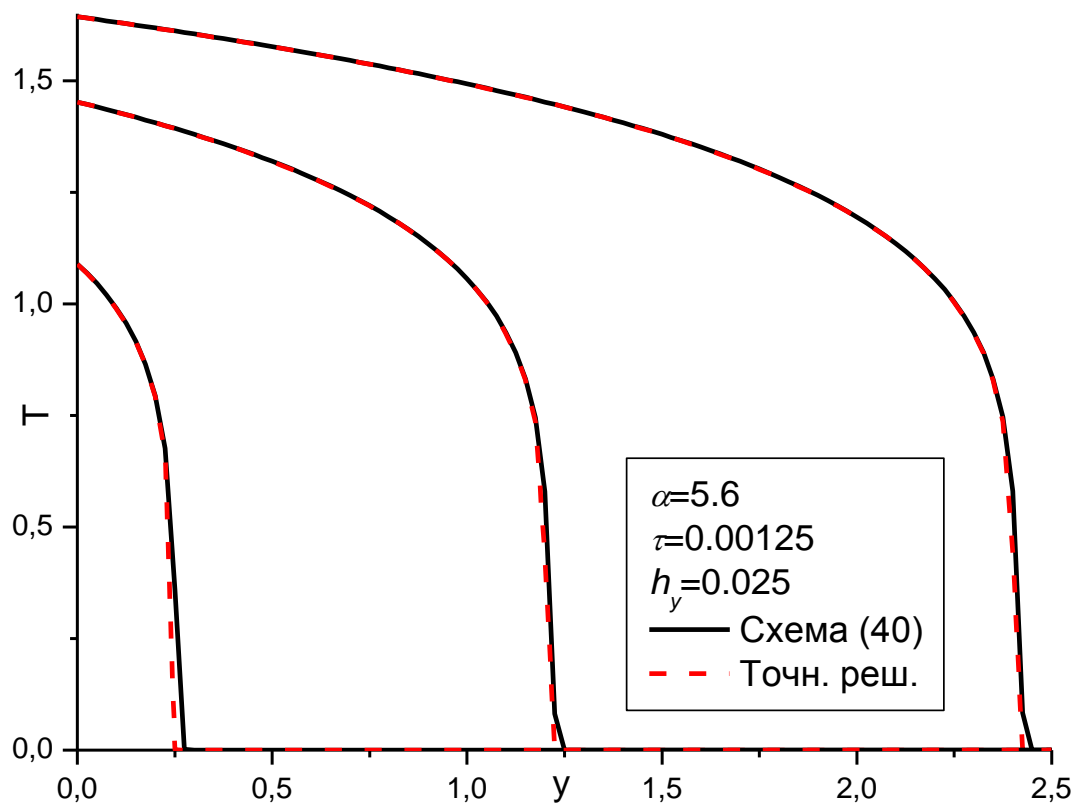


Рис 13. Схема (40).

### 6.6. L1-устойчивая схема 3-го порядка

Таблица 11. Схема (41), $\ \text{error}\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100					0.1454327

Таблица 12. Схема (41), $\ \text{error}\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100					0.0291212

Для схемы (41) может наблюдаться отрицательный провал перед фронтом. Схема (41) и схема (50) оказались самыми ненадёжными, схема (41) справилась с одной постановкой, а схема (50) ни с одной (поэтому далее в тексте для неё нет таблицы с нормами). Схема (50) может выдать отрицательные значения на первой стадии.

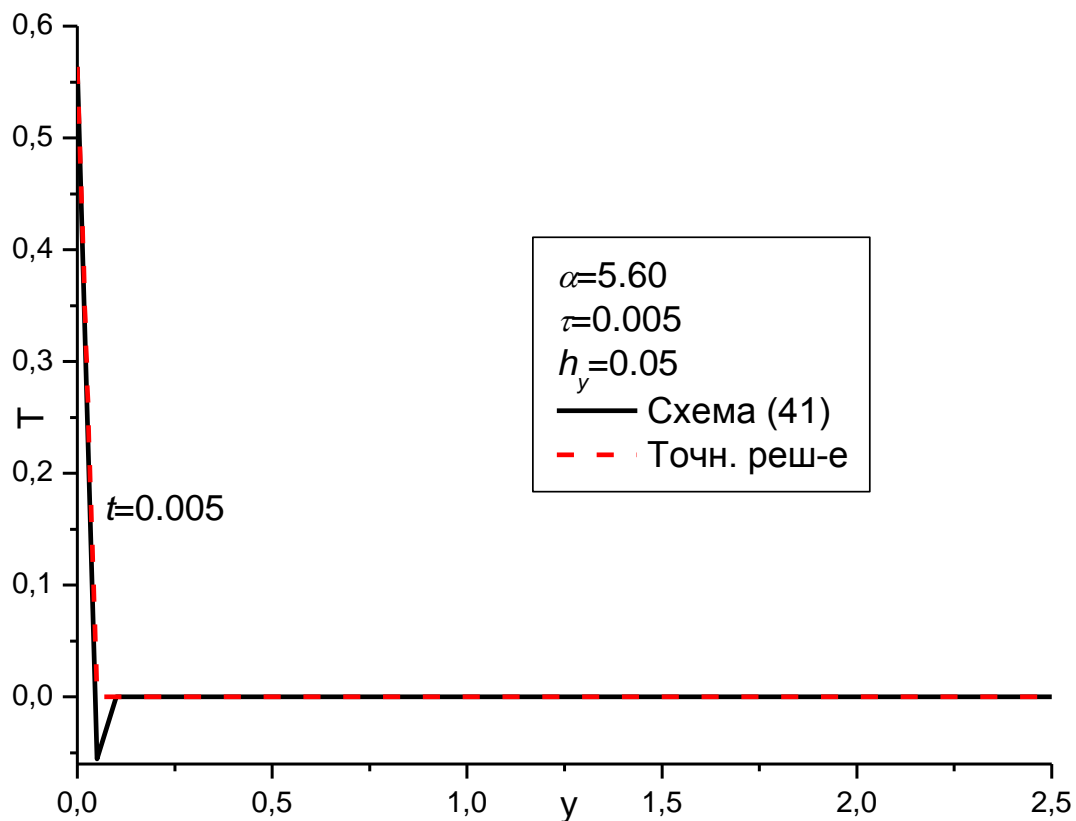


Рис 14. Отрицательный предвестник. Схема (41).

### 6.7. L2-устойчивая схема 2-го порядка

Таблица 13. Схема (42), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2541890	0.2453084	0.0983895	0.1274160	0.1524794
	0.050	0.2039943	0.1889934	0.0519210	0.0737358	0.0952085
	0.025		0.1517168	0.0272749	0.0391837	0.0553276
4.0	0.100	0.5535225	0.5433075	0.1583327	0.2059768	0.2518136
	0.050	0.4846168	0.4674122	0.0970511	0.1350777	0.1752481
	0.025		0.4087297	0.0817450	0.0828472	0.1149796
5.6	0.100	0.7142478	0.7080530	0.1684043	0.2206236	0.2713898
	0.050		0.6326417	0.1151702	0.1505949	0.1969167
	0.025			0.1728829	0.1036937	0.1343354
8.0	0.100	0.8297877	0.8243283	0.1864271	0.1979121	0.2472148
	0.050		0.7609161	0.2240768	0.1752420	0.1827861
	0.025			0.3060461	0.2087433	0.1637835

Таблица 14. Схема (42), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0264349	0.0248397	0.0198302	0.0255673	0.0305554
	0.050	0.0160911	0.0140393	0.0075839	0.0105186	0.0135154
	0.025		0.0085300	0.0033130	0.0040597	0.0055879
4.0	0.100	0.0637296	0.0614163	0.0326909	0.0417190	0.0507084
	0.050	0.0418615	0.0384765	0.0155322	0.0197419	0.0251135
	0.025		0.0251434	0.0099373	0.0093913	0.0118942
5.6	0.100	0.0905960	0.0880853	0.0383809	0.0467020	0.0560235
	0.050		0.0574224	0.0221131	0.0243651	0.0295445
	0.025			0.0182169	0.0140348	0.0154183
8.0	0.100	0.1178986	0.1154059	0.0475500	0.0511346	0.0578238
	0.050		0.0774338	0.0341752	0.0314174	0.0336726
	0.025			0.0309397	0.0224930	0.0206702

Для схемы (42) может наблюдаться отрицательный провал перед фронтом.

## 6.8. L1-устойчивая схема 2-го порядка

Таблица 15. Схема (43), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2563434	0.2459991	0.0985761	0.1274685	0.1524933
	0.050	0.2082312	0.1906386	0.0523731	0.0738768	0.0952481
	0.025		0.1549247	0.0281593	0.0395219	0.0554330
4.0	0.100	0.5547800	0.5435294	0.1583011	0.2059713	0.2518127
	0.050	0.4884015	0.4684877	0.0969256	0.1350508	0.1752433
	0.025		0.4119248	0.0835224	0.0827395	0.1149559
5.6	0.100	0.7142150	0.7075400	0.1681046	0.2205306	0.2713640
	0.050	0.6751130	0.6325915	0.1161544	0.1503298	0.1968340
	0.025		0.5964951	0.1752317	0.1045745	0.1341004
8.0	0.100	0.8298190	0.8233950	0.1868098	0.1977863	0.2471762
	0.050		0.7609446	0.2250007	0.1755931	0.1826735
	0.025			0.3080246	0.2095883	0.1641045

Таблица 16. Схема (43), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0267384	0.0249370	0.0198660	0.0255775	0.0305581
	0.050	0.0165488	0.0142075	0.0076437	0.0105377	0.0135209
	0.025		0.0087780	0.0033934	0.0040912	0.0055980
4.0	0.100	0.0641285	0.0615245	0.0326918	0.0417190	0.0507084
	0.050	0.0425905	0.0387115	0.0155508	0.0197426	0.0251135
	0.025		0.0255494	0.0100672	0.0094028	0.0118946
5.6	0.100	0.0909646	0.0881446	0.0383598	0.0466904	0.0560197
	0.050	0.0639557	0.0576290	0.0221510	0.0243527	0.0295374
	0.025		0.0397541	0.0184131	0.0140597	0.0154109
8.0	0.100	0.1183010	0.1154022	0.0475665	0.0511307	0.0578209
	0.050		0.0776291	0.0342618	0.0314292	0.0336706
	0.025			0.0311239	0.0225495	0.0206784

Схема (43) может развернуть фронт.

### 6.9. L3-устойчивая схема 3-го порядка

Таблица 17. Схема (44), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.1963145	0.2142563	0.0820267	0.1192455	0.1484011
	0.050	0.1247420	0.1452605	0.0252760	0.0603732	0.0885406
	0.025		0.0922825	0.0148044	0.0175746	0.0445062
4.0	0.100	0.4893837	0.5122486	0.1451323	0.1990526	0.2482712
	0.050		0.4115736	0.0751934	0.1230633	0.1689582
	0.025			0.0435531	0.0629693	0.1040950
5.6	0.100	0.6654603	0.6887117	0.1614555	0.2167802	0.2693627
	0.050		0.5880158	0.0939081	0.1440089	0.1932891
	0.025			0.1196679	0.0832755	0.1281052
8.0	0.100		0.8160729	0.1664706	0.1964936	0.2464637
	0.050			0.1858487	0.1560641	0.1813809
	0.025				0.1720472	0.1454146

Таблица 18. Схема (44), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0179418	0.0203154	0.0164543	0.0238896	0.0297207
	0.050	0.0099520	0.0092625	0.0037411	0.0085647	0.0125438
	0.025		0.0055530	0.0021618	0.0018798	0.0044651
4.0	0.100	0.0521402	0.0555264	0.0296974	0.0402199	0.0499570
	0.050		0.0310308	0.0115949	0.0178119	0.0241482
	0.025			0.0048677	0.0068663	0.0106561
5.6	0.100	0.0795932	0.0823564	0.0357533	0.0455156	0.0554603
	0.050		0.0500328	0.0179000	0.0226028	0.0287486
	0.025			0.0124101	0.0112337	0.0142421
8.0	0.100		0.1103161	0.0441284	0.0496844	0.0571951
	0.050			0.0289134	0.0290723	0.0326735
	0.025				0.0189127	0.0190708

Схема (44) может развернуть фронт.

### 6.10. L2-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 19. Схема (45), $\ \text{error}\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100				0.1338149	0.1556874
	0.050					0.1003049
4.0	0.100	0.6012928	0.5679816	0.1695582	0.2119877	0.2549182
	0.050	0.5814285	0.5083901	0.1140283	0.1449244	0.1805407
	0.025	1.3494520	0.4889062	0.1220031	0.0977098	0.1236342
8.0	0.100	0.8592823	0.8360972	0.2041899	0.1997306	0.2481433
	0.050	1.8954994	0.7879610	0.2588299	0.1919011	0.1844851
	0.025	7.4067205	1.7381437	0.3726833	0.2412294	0.1794727

Таблица 20. Схема (45), $\ \text{error}\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100				0.0269117	0.0312195
	0.050					0.0142784
4.0	0.100	0.0760063	0.0669870	0.0353165	0.0430305	0.0513671
	0.050	0.0574848	0.0456036	0.0189580	0.0213819	0.0259340
	0.025	0.0440736	0.0340132	0.0147879	0.0115314	0.0129197
8.0	0.100	0.1339949	0.1217081	0.0508241	0.0525179	0.0584228
	0.050	0.1017767	0.0863655	0.0391191	0.0335944	0.0346020
	0.025	0.1321041	0.0644398	0.0377484	0.0257620	0.0221236

Схема (45) может выдать отрицательные значения на первой стадии.



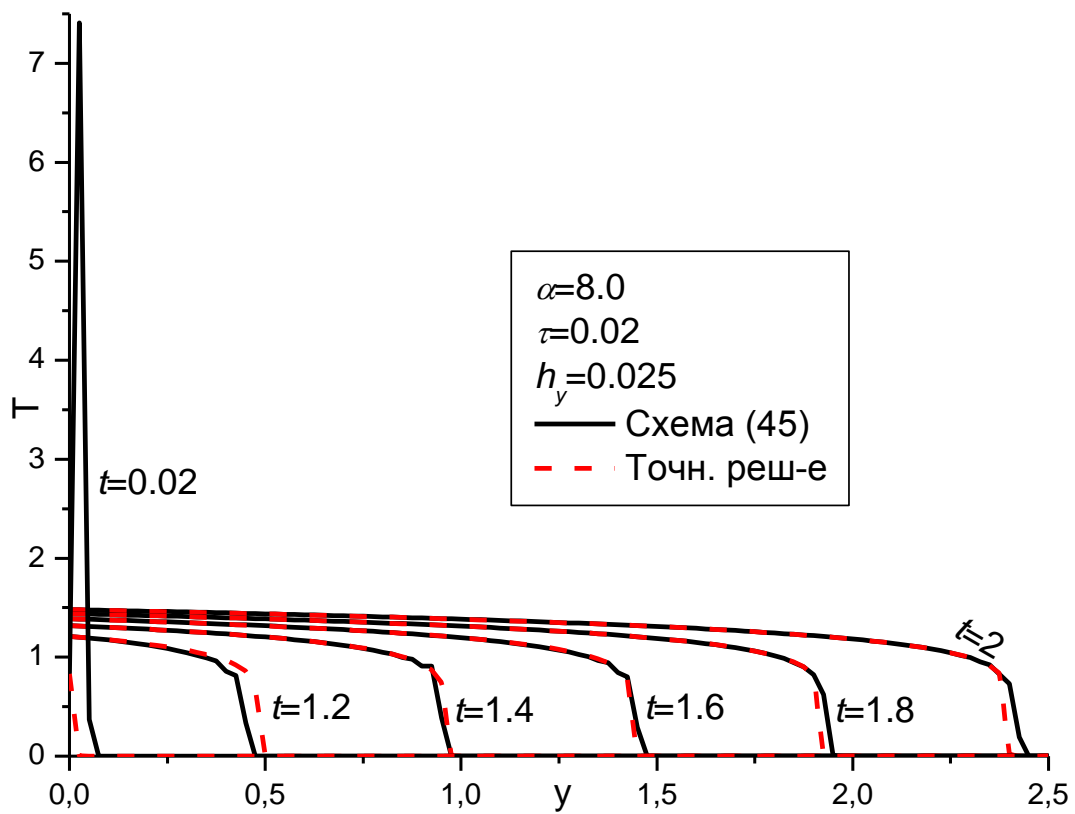


Рис 15. Немонотонность на начальном этапе расчётов, схема (45).  
 Мелкий шаг по пространству, крупный шаг по времени.

### 6.11. L1-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 21. Схема (46), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.3698828	0.3048462	0.1284328	0.1424442	0.1599715
	0.050		0.2749751	0.0952973	0.0959772	0.1063335
	0.025			0.0835989	0.0712752	0.0717876
4.0	0.100	0.6729507	0.6129765	0.1924805	0.2244610	0.2613906
	0.050		0.5673649	0.1447193	0.1635720	0.1906839
	0.025			0.1878654	0.1226683	0.1387885
5.6	0.100	0.8119034	0.7597436	0.1930910	0.2346932	0.2789057
	0.050		0.7173691	0.1919487	0.1720820	0.2091581
	0.025			0.3311586	0.1719100	0.1531033
8.0	0.100		0.8584589	0.2402952	0.2057698	0.2514108
	0.050			0.3296773	0.2248150	0.1898642
	0.025				0.3056743	0.2094011

Таблица 22. Схема (46), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0535015	0.0370934	0.0269428	0.0288827	0.0321483
	0.050		0.0288867	0.0159410	0.0143222	0.0152751
	0.025			0.0127298	0.0085482	0.0076195
4.0	0.100	0.0962533	0.0774854	0.0406506	0.0457228	0.0527234
	0.050		0.0577589	0.0252633	0.0244765	0.0274909
	0.025			0.0229851	0.0151968	0.0147111
5.6	0.100	0.1250321	0.1055274	0.0465470	0.0505029	0.0578721
	0.050		0.0784970	0.0339700	0.0294778	0.0319168
	0.025			0.0351577	0.0214679	0.0186203
8.0	0.100		0.1332556	0.0580275	0.0556908	0.0598525
	0.050			0.0494332	0.0382363	0.0366471
	0.025				0.0323960	0.0251080

Схема (46) может исказить фронт.

## 6.12. L1-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 23. Схема (47), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2480637	0.2425297	0.0971003	0.1268018	0.1521818
	0.050	0.1933276	0.1843104	0.0498728	0.0727730	0.0947518
	0.025	0.1797585	0.1436057	0.0241793	0.0376565	0.0546121
4.0	0.100	0.5474029	0.5403060	0.1570027	0.2052606	0.2514438
	0.050	0.4741986	0.4620295	0.0951501	0.1339539	0.1746463
	0.025		0.3996726	0.0766413	0.0812419	0.1140357
5.6	0.100	0.7112450	0.7063236	0.1676495	0.2201407	0.2711168
	0.050	0.6342960	0.6297707	0.1117244	0.1499267	0.1964938
	0.025		0.5604560	0.1647122	0.1005823	0.1337484
8.0	0.100	0.8311533	0.8238577	0.1842074	0.1977051	0.2470819
	0.050	0.8103539	0.7621682	0.2194795	0.1731499	0.1825959
	0.025		0.7430898	0.2960492	0.2044327	0.1618370

Таблица 24. Схема (47), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0255105	0.0244099	0.0195551	0.0254387	0.0304937
	0.050	0.0149101	0.0135023	0.0072571	0.0103719	0.0134473
	0.025	0.0101349	0.0078308	0.0029269	0.0038845	0.0055098
4.0	0.100	0.0626768	0.0608424	0.0323910	0.0415661	0.0506310
	0.050	0.0403389	0.0377247	0.0151629	0.0195613	0.0250222
	0.025		0.0240354	0.0093762	0.0091684	0.0117862
5.6	0.100	0.0898234	0.0875647	0.0381012	0.0465675	0.0559557
	0.050	0.0600784	0.0567267	0.0216660	0.0241862	0.0294598
	0.025		0.0375918	0.0174049	0.0137490	0.0153051
8.0	0.100	0.1176410	0.1150513	0.0471671	0.0509711	0.0577500
	0.050	0.0856380	0.0769272	0.0335527	0.0311604	0.0335640
	0.025		0.0542258	0.0299377	0.0220792	0.0205004

При счёте по схеме (47) может наблюдаться искажение фронта.

### 6.13. L1-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 25. Схема (48), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2526094	0.2447793	0.0982467	0.1273759	0.1524688
	0.050	0.2021819	0.1877694	0.0515738	0.0736277	0.0951783
	0.025		0.1502733	0.0265977	0.0389228	0.0552468
4.0	0.100	0.5526757	0.5431574	0.1583612	0.2059816	0.2518144
	0.050	0.4882689	0.4666581	0.0971596	0.1351014	0.1752522
	0.025		0.4115885	0.0807788	0.0829380	0.1150001
5.6	0.100	0.7135191	0.7084473	0.1686438	0.2206964	0.2714097
	0.050		0.6319930	0.1144725	0.1508064	0.1969814
	0.025			0.1723753	0.1030651	0.1345224
8.0	0.100		0.8249519	0.1861400	0.1980106	0.2472447
	0.050			0.2235088	0.1749781	0.1828742
	0.025				0.2082231	0.1635415

Таблица 26. Схема (48), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0262226	0.0247661	0.0198029	0.0255595	0.0305533
	0.050	0.0159189	0.0139207	0.0075388	0.0105040	0.0135113
	0.025		0.0084311	0.0032560	0.0040357	0.0055802
4.0	0.100	0.0634429	0.0613358	0.0326912	0.0417191	0.0507084
	0.050	0.0423109	0.0383191	0.0155209	0.0197418	0.0251136
	0.025		0.0254333	0.0098593	0.0093840	0.0118941
5.6	0.100	0.0902291	0.0880393	0.0383990	0.0467112	0.0560265
	0.050		0.0572677	0.0220914	0.0243757	0.0295502
	0.025			0.0181683	0.0140199	0.0154246
8.0	0.100		0.1153780	0.0475396	0.0511379	0.0578261
	0.050			0.0341269	0.0314095	0.0336744
	0.025				0.0224613	0.0206646

Схема (48) может развернуть фронт.

### 6.14. L3-устойчивая схема 4-го порядка

Таблица 29. Схема (49), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100		1.0415430	0.7443743	0.4649093	0.2035754
	0.050				0.9070354	0.6072772
4.0	0.100			1.1000087	0.8348647	0.3782885
	0.050					0.9915955
5.6	0.100				1.0297453	0.6039794
8.0	0.100					0.9624129

Таблица 28. Схема (49), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100		0.2661878	0.3508242	0.1781275	0.0828923
	0.050				0.4494753	0.2336538
4.0	0.100			0.4835426	0.2699380	0.1238461
	0.050					0.3549483
5.6	0.100				0.3471010	0.1732578
8.0	0.050					0.2492822

Для схемы (49) наблюдались искажения фронта.

## 6.15. Классическая схема CROS

Таблица 30. Схема (26), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2388066	0.2378113	0.0946604	0.1255434	0.1515443
	0.050	0.2114808	0.1771814	0.0465015	0.0709518	0.0938166
	0.025	0.3741959	0.1564358	0.0204310	0.0351402	0.0532590
4.0	0.100	0.5431034	0.5356879	0.1543718	0.2037398	0.2506346
	0.050	0.5454654	0.4578506	0.0920960	0.1317264	0.1733680
	0.025	2.1469230	0.4586637	0.0646682	0.0786406	0.1121611
5.6	0.100	0.7176746	0.7038480	0.1657731	0.2189762	0.2704779
	0.050	1.3036912	0.6341229	0.1046331	0.1482535	0.1954699
	0.025	5.2147648	1.1518701	0.1498876	0.0942084	0.1322681
8.0	0.100	0.8447888	0.8250706	0.1797891	0.1970123	0.2467115
	0.050	3.0676684	0.7746697	0.2109704	0.1689835	0.1819625
	0.025		2.8130031	0.2821287	0.1964080	0.1579589

Таблица 31. Схема (26), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0239953	0.0236414	0.0190326	0.0251751	0.0303614
	0.050	0.0129478	0.0126102	0.0067031	0.0100932	0.0133077
	0.025	0.0073088	0.0066218	0.0023167	0.0035866	0.0053615
4.0	0.100	0.0617060	0.0598922	0.0317831	0.0412397	0.0504616
	0.050	0.0405523	0.0368334	0.0144734	0.0191948	0.0248272
	0.025	0.0352732	0.0233980	0.0083395	0.0087503	0.0115666
5.6	0.100	0.0904471	0.0867748	0.0374603	0.0462541	0.0557992
	0.050	0.0614454	0.0564557	0.0207328	0.0237769	0.0292623
	0.025	0.1388613	0.0374150	0.0159570	0.0131522	0.0150461
8.0	0.100	0.1224880	0.1147151	0.0463244	0.0505915	0.0575774
	0.050	0.0912520	0.0784168	0.0323421	0.0305973	0.0333131
	0.025		0.0529760	0.0285141	0.0212707	0.0201292

Схема (26) показала практически эталонные результаты, несмотря на немонотонности при старте для высоких степеней нелинейности.

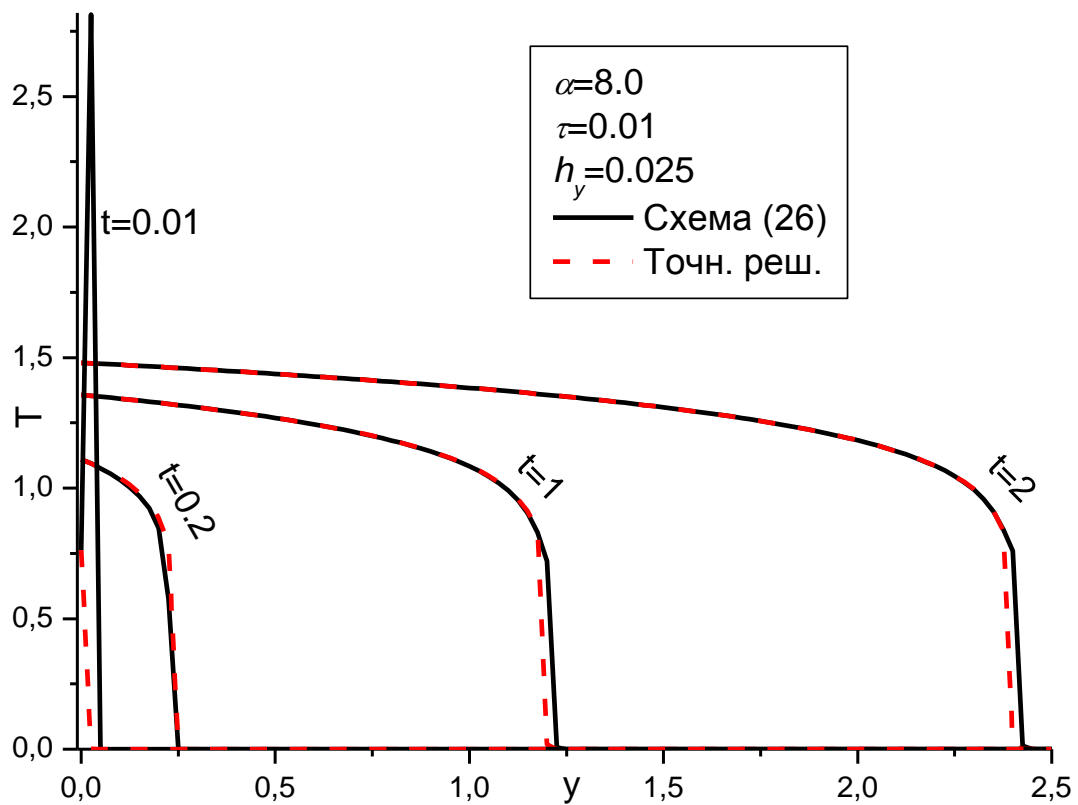
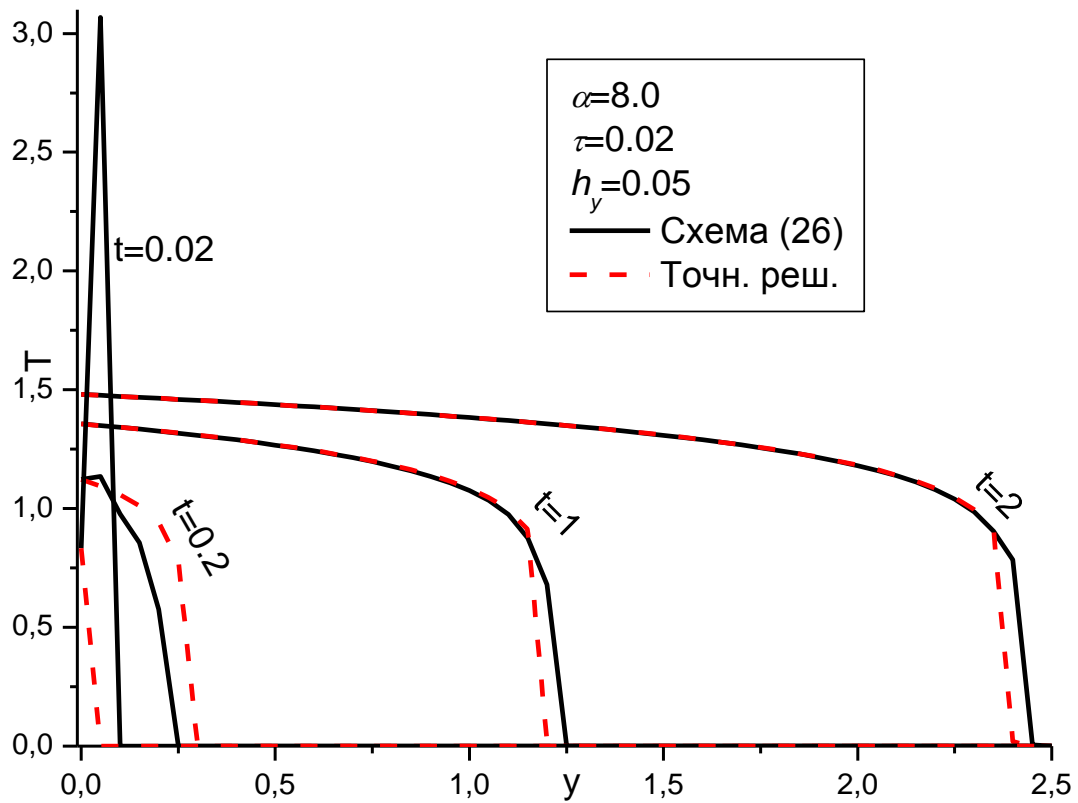


Рис. 16. Схема (26), немонотонности при старте.

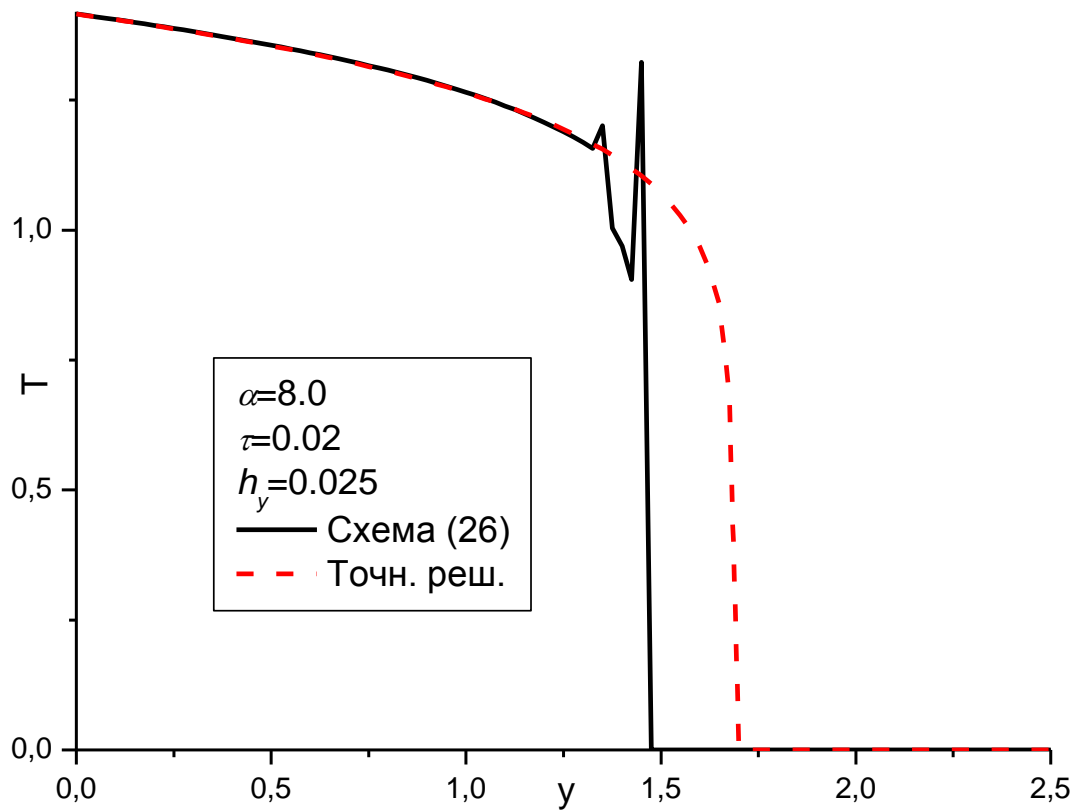


Рис. 17. Схема (26), искажение фронта.

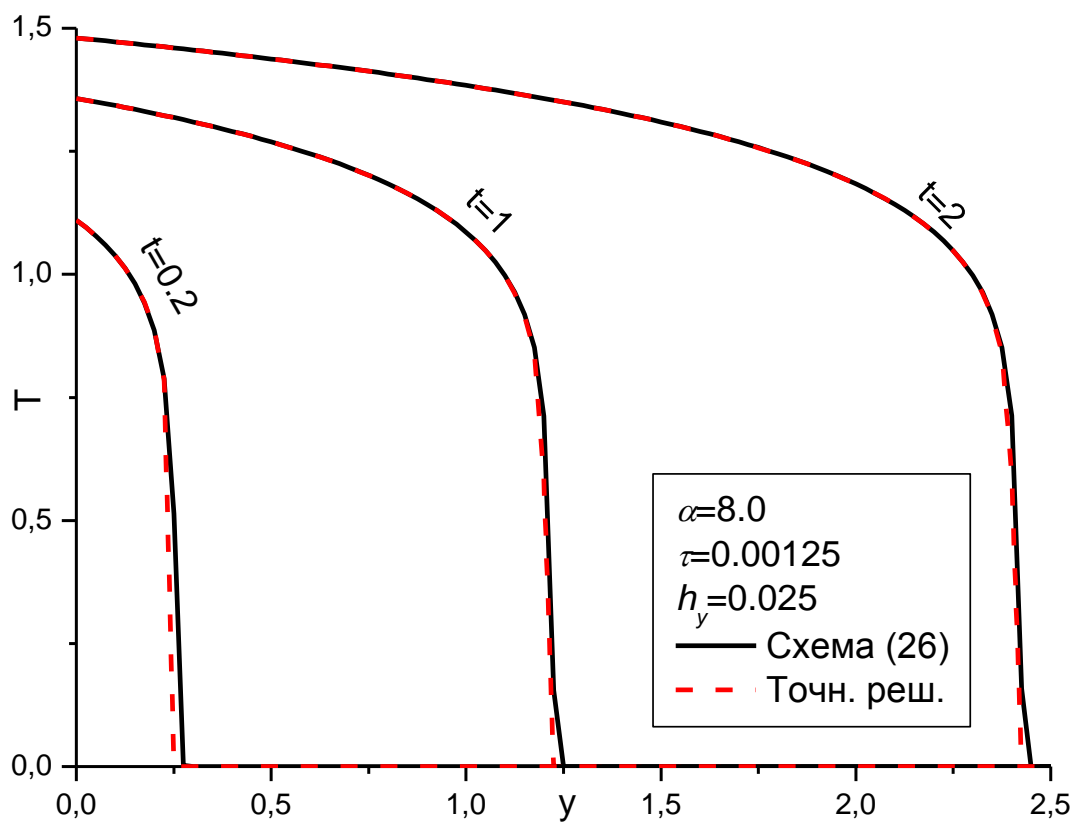


Рис. 18. Схема (26).



## 6.16. Полуторастадийная модификация CROS

Таблица 32. Схема (31), $\ error\ _c$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2402137	0.2379937	0.0946396	0.1255424	0.1515445
	0.050		0.1786011	0.0464318	0.0709591	0.0938214
	0.025			0.0197378	0.0351203	0.0532722
4.0	0.100	0.5357235	0.5336746	0.1538023	0.2036049	0.2506019
	0.050		0.4523897	0.0901703	0.1312897	0.1732652
	0.025			0.0731421	0.0770872	0.1118107
5.6	0.100	0.6981375	0.6999789	0.1649660	0.2187729	0.2704271
	0.050		0.6182940	0.1074603	0.1475953	0.1953043
	0.025			0.1609216	0.0968002	0.1317128
8.0	0.100		0.8183453	0.1801916	0.1968755	0.2466759
	0.050		0.7456171	0.2128178	0.1694617	0.1818520
	0.025			0.2963035	0.1983205	0.1584425

Таблица 33. Схема (31), $\ error\ _l$						
$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0240099	0.0236395	0.0190290	0.0251748	0.0303614
	0.050		0.0127346	0.0067014	0.0100946	0.0133084
	0.025			0.0023459	0.0035890	0.0053630
4.0	0.100	0.0603578	0.0595555	0.0316969	0.0412167	0.0504557
	0.050		0.0364341	0.0143583	0.0191504	0.0248152
	0.025			0.0086124	0.0086905	0.0115422
5.6	0.100	0.0872386	0.0860330	0.0373850	0.0462271	0.0557916
	0.050		0.0552465	0.0207690	0.0237409	0.0292480
	0.025			0.0167517	0.0131899	0.0150273
8.0	0.100		0.1133558	0.0463219	0.0505837	0.0575743
	0.050		0.0756818	0.0325044	0.0306135	0.0333121
	0.025			0.0298235	0.0214008	0.0201454

Первая стадия схемы (31) не A-устойчива (см. теорему п. 1.2).

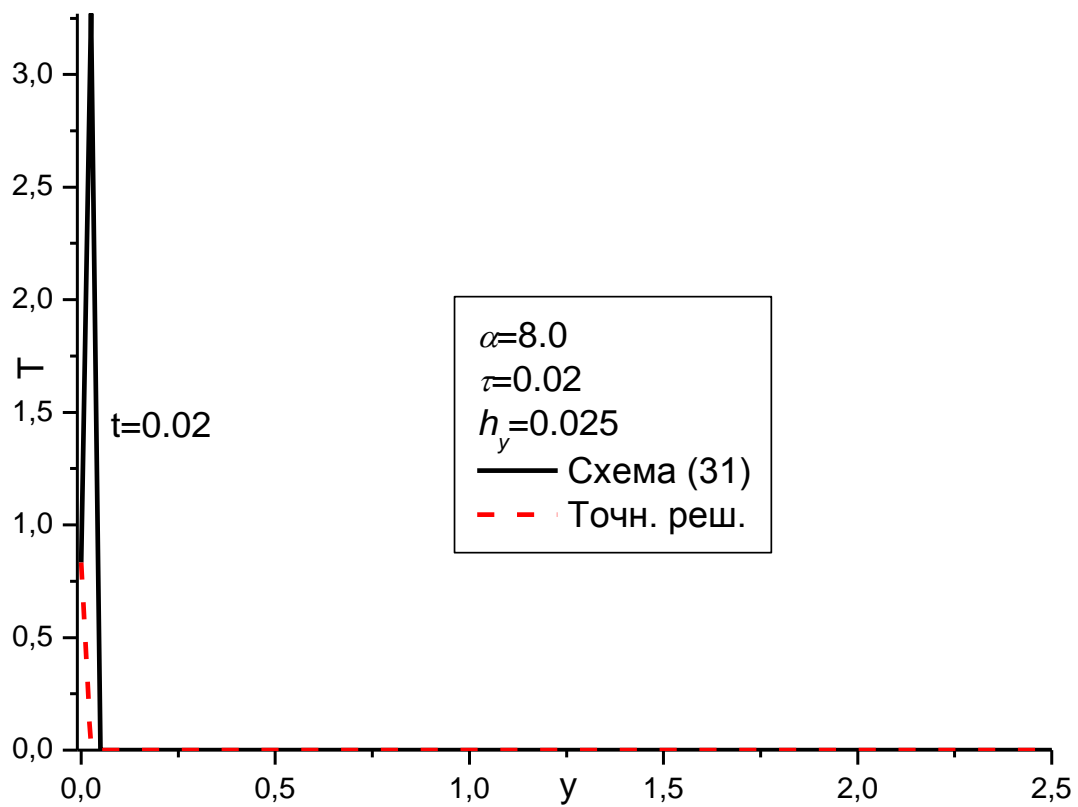


Рис. 19. Схема (31), срыв счёта.

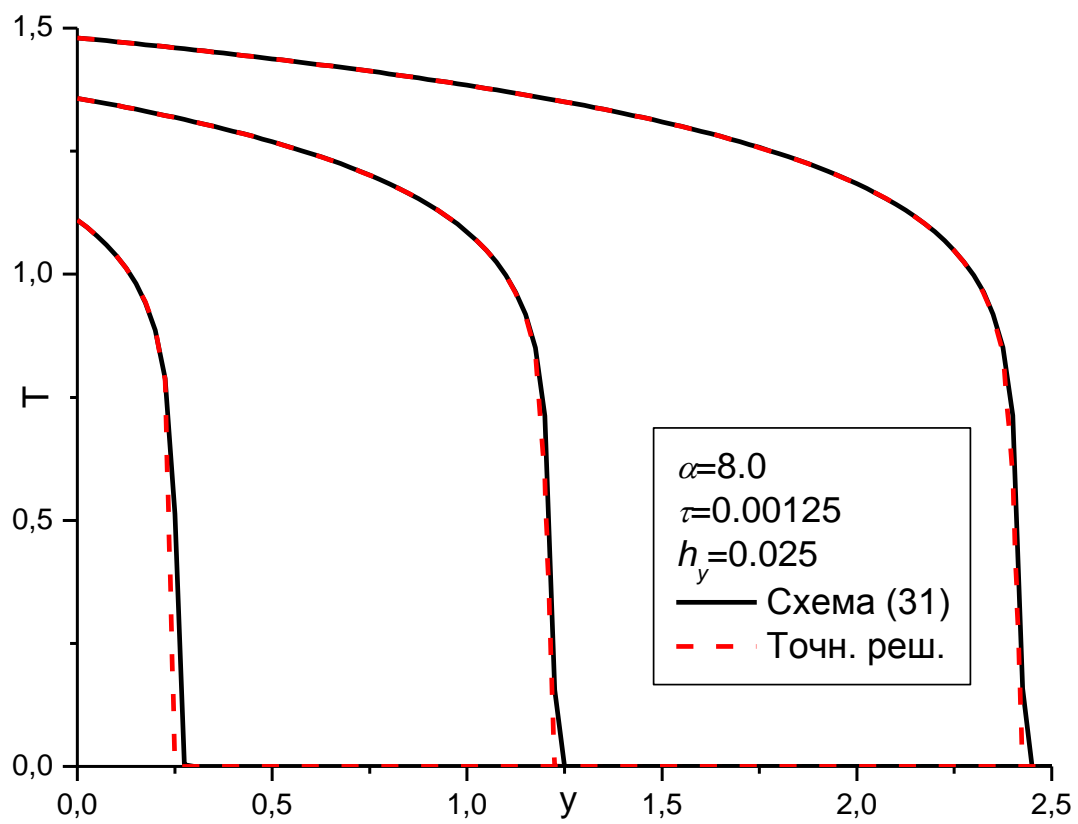


Рис. 20. Схема (31).

## 6.17. “Безматричная” модификация CROS

К недостаткам упомянутого метода CROS относятся отсутствие стратегии выбора шага на основе главного терма локальной погрешности и необходимость использования точного обращения матрицы типа матрицы Якоби  $(\mathbf{E} - \tau \cdot \gamma \partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y})$  на каждом шаге по времени для сохранения свойств монотонности при решении жёстких задач. Если с первым ещё можно хоть как-то справиться, последнее существенно затрудняет адаптацию указанного метода для счёта на высокопроизводительных системах ввиду сильной связи по данным, присущей точному обращению. Одним из способов избежать точного обращения матриц является реализация “безматричного” [6] метода с неточной матрицей Якоби  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$  на основе классического одностадийного метода Розенброка с комплексными коэффициентами.

Для численного интегрирования системы (1) при помощи одностадийной схемы из семейства (23) нужно на каждом временном шаге обратиться к матрице типа матрицы Якоби  $\mathbf{A}(t_n) = \mathbf{E} - \gamma \tau \partial \mathbf{f}(\mathbf{y}^n) / \partial \mathbf{y}$ . Будем считать [27], что матрица  $\mathbf{W} = \mathbf{A}^{-1}(t_n - \tau)$  не сильно отличается от матрицы  $\mathbf{A}^{-1}(t_n)$ :

$$\mathbf{W}\mathbf{A}(t_n) = \mathbf{E} - \mathbf{R}, \quad (61)$$

то есть с точностью до невязки  $\mathbf{R}$ . Из данного соотношения можно выразить, как саму невязку:

$$\mathbf{R} = \mathbf{E} - \mathbf{W}\mathbf{A}(t_n), \quad (62)$$

так и матрицу, обратную  $\mathbf{A}(t_n)$ :

$$\mathbf{A}^{-1}(t_n) = (\mathbf{E} - \mathbf{R})^{-1} \mathbf{W}. \quad (63)$$

Считая невязку  $\mathbf{R}$  малой, можем приближённо записать

$$\mathbf{A}^{-1}(t_n) = (\mathbf{E} + \mathbf{R}) \mathbf{W}, \quad (64)$$

откуда, подставляя выражение для невязки (62), окончательно получим

$$\mathbf{A}^{-1}(t_n) = (2\mathbf{E} - \mathbf{W}\mathbf{A}(t_n)) \mathbf{W}. \quad (65)$$

Предположение малости невязки существенно для выполнения (64), критерием малости можно считать:

$$\|\mathbf{R}\| < 1. \quad (66)$$

Соотношение (66) может использоваться как для управления длиной шага, так и для сигнала вычислителю, что пора точно обратиться к матрице  $\mathbf{A}(t_n)$ . Таким образом, построен рекурсивный алгоритм (65) получения матрицы, обратной  $\mathbf{A}(t_n)$ , на первом шаге естественно взять  $\mathbf{W} = \mathbf{A}^{-1}(0)$ . Также можно отметить, что при применении полученного метода с неточной матрицей Якоби к тестовому уравнению Далквиста (2) полученная функция устойчивости совпадает с исходной функцией устойчивости (25) одностадийного метода Розенброка (23). В частности, для метода (26) функция устойчивости “безматричного” метода совпадает с (27).

$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2392718	0.2378309	0.0946610	0.1255434	0.1515443
	0.050	0.2125118	0.1775255	0.0465102	0.0709523	0.0938166
	0.025	0.3741959	0.1571985	0.0205263	0.0351465	0.0532592
4.0	0.100	0.5434682	0.5356809	0.1543687	0.2037397	0.2506346
	0.050	0.5454654	0.4581557	0.0920253	0.1317237	0.1733679
	0.025	2.1469230	0.5554477	0.0662553	0.0785795	0.1121587
5.6	0.100	0.7164792	0.7036242	0.1657570	0.2189756	0.2704779
	0.050	1.3036912	0.6330660	0.1049710	0.1482393	0.1954693
	0.025	5.2147648	1.1518701	0.1551535	0.0945067	0.1322555
8.0	0.100	0.8408925	0.8242033	0.1798254	0.1970113	0.2467115
	0.050	3.0676684	0.7622288	0.2114384	0.1690160	0.1819617
	0.025		2.8130031	0.2800785	0.1968295	0.1579881

$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0240707	0.0236448	0.0190327	0.0251751	0.0303614
	0.050	0.0137243	0.0126508	0.0067043	0.0100933	0.0133077
	0.025	0.0073236	0.0070455	0.0023270	0.0035872	0.0053615
4.0	0.100	0.0618771	0.0599008	0.0317827	0.0412397	0.0504616
	0.050	0.0398650	0.0369401	0.0144698	0.0191945	0.0248272
	0.025	0.0527138	0.0230615	0.0083807	0.0087481	0.0115664
5.6	0.100	0.0906095	0.0867825	0.0374592	0.0462540	0.0557992
	0.050	0.0595214	0.0565679	0.0207391	0.0237763	0.0292622
	0.025	0.1668756	0.0367675	0.0163087	0.0131564	0.0150457
8.0	0.100	0.1222000	0.1147039	0.0463276	0.0505916	0.0575774
	0.050	0.1058121	0.0782829	0.0323917	0.0305995	0.0333131
	0.025		0.0575943	0.0283644	0.0213026	0.0201306

$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.020 (100)	0.010 (200)	0.005 (400)
2.3	0.025	98		
4.0	0.050	46		
	0.025	96	66	
5.6	0.050	50		
	0.025	94	94	
8.0	0.100	15		
	0.050	63	1	
	0.025		102	1

В таблице 36 можно увидеть, сколько раз не выполнялся критерий (66). “Рекурсивное обращение” (65) матрицы  $\mathbf{A}$  прерывалось, заменялось точным обращением по методу Гаусса, а на следующем временном шаге возобновлялось, используя в качестве начального приближения только что обращённую матрицу  $\mathbf{A}$ . Из таблиц видно, надёжность и точность модифицированного метода такая же, как у исходного (26). Метод с рекурсивным обращением требует больше операций и для своей работы он использует в 2 раза больше памяти по сравнению с точным обращением. Например, в нашем случае прямоугольной расчётной области (см. рис. 1), существенно вытянутой в одном направлении, с равномерной прямоугольной пространственной сеткой  $M \times N$  прямой ход метода Гаусса для ленточных матриц потребует  $\sim M^3 N$  операций и  $\approx M^2 N^2$  ячеек памяти, а построенный метод потребует двух матричных умножений, то есть  $\sim M^3 N^3$  операций, и ячеек памяти  $\approx 2M^2 N^2$ . Отсутствие связи по данным, присущей точному обращению, делает метод с рекурсивным обращением легко реализуемым на высокопроизводительных системах. Дополнительным аргументом в пользу реализации такого метода на высокопроизводительной системе является упомянутое повышенное требование к количеству доступной быстрой памяти.

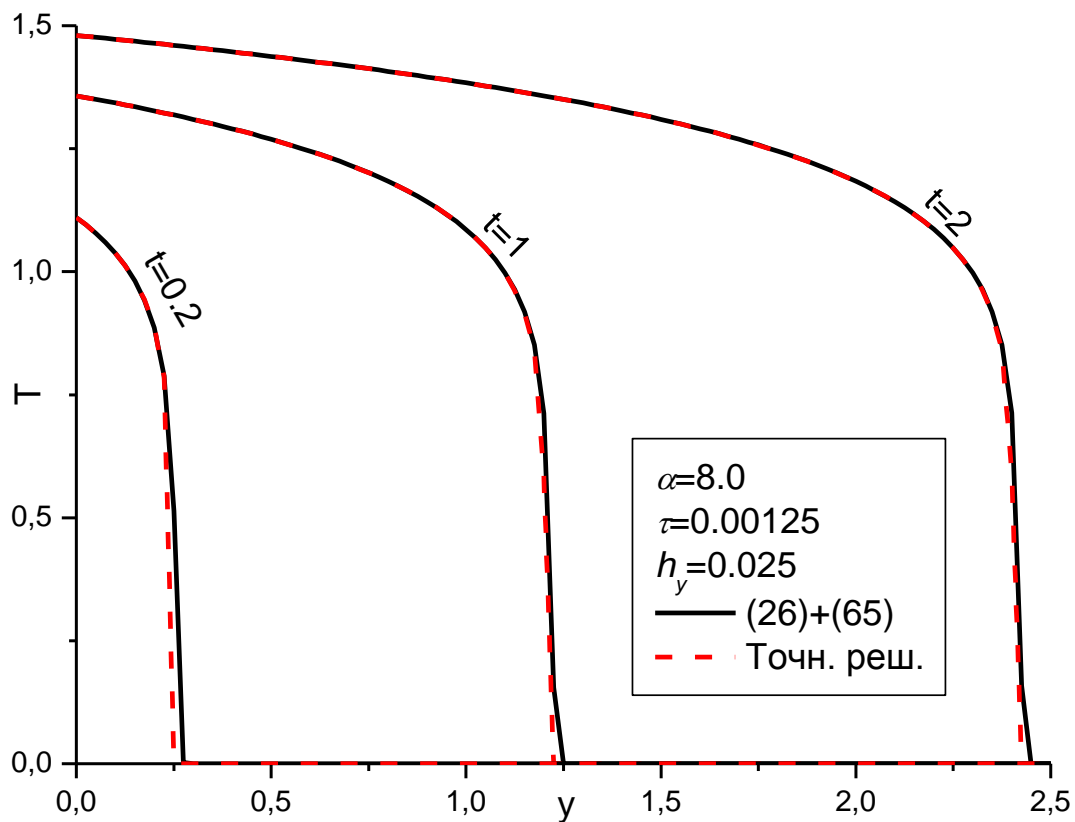


Рис. 21.

Рекурсивное “безматричное обращение” (65) для схемы (26) в среднем не хуже точного.

## 6.18. “Двустадийная” модификация CROS

В связи с вопросом уменьшения трудоёмкости схемы (26), П.Д. Широковым предложена возможность её многостадийной модификации. Суть модификации в так называемой “заморозке” якобиана на несколько шагов. Полученный метод будет эквивалентен однократному методу с числом стадий равным числу шагов, на которые “заморожен” якобиан. При “заморозке” на два шага получим двустадийный (33) однократный метод:

$$\gamma_1 = \gamma_2 = (1 \pm i)/2, \quad \alpha_{21} = \beta_1 = \beta_2 = 1/2 \quad (67)$$

Таблица 37. “Двустадийная” модификация (67) схемы (26),  $\|\text{error}\|_c$

$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.2630966	0.2500147	0.1008964	0.1286786	0.1531147
	0.050	0.2242594	0.1954118	0.0556004	0.0755793	0.0961402
	0.025	0.3053450	0.1658922	0.0329717	0.0418909	0.0566882
4.0	0.100	0.5713242	0.5510731	0.1617728	0.2076842	0.2526651
	0.050	0.5532289	0.4819918	0.1028228	0.1379330	0.1766702
	0.025	0.9093857	0.4651937	0.0845541	0.0876459	0.1173609
5.6	0.100	0.7340141	0.7156132	0.1712880	0.2220465	0.2720919
	0.050	0.8036265	0.6495290	0.1193928	0.1530863	0.1981508
	0.025		0.7100445	0.1815043	0.1074234	0.1365035
8.0	0.100	0.8480454	0.8304958	0.1905386	0.1987498	0.2476230
	0.050	1.4629078	0.7776566	0.2320131	0.1789885	0.1835337
	0.025		1.3414783	0.3218523	0.2159436	0.1672193

Таблица 38. “Двустадийная” модификация (67) схемы (26),  $\|\text{error}\|_l$

$\alpha$	$h \backslash \tau$	0.02000	0.01000	0.00500	0.00250	0.00125
2.3	0.100	0.0282882	0.0256856	0.0203822	0.0258353	0.0306880
	0.050	0.0182172	0.0149822	0.0082150	0.0108097	0.0136566
	0.025	0.0135801	0.0095782	0.0040505	0.0043956	0.0057422
4.0	0.100	0.0671433	0.0628873	0.0334259	0.0420780	0.0508855
	0.050	0.0464300	0.0403199	0.0164073	0.0201755	0.0253259
	0.025	0.0356855	0.0274586	0.0107945	0.0099086	0.0121511
5.6	0.100	0.0953770	0.0899504	0.0391186	0.0470494	0.0561893
	0.050	0.0689081	0.0600331	0.0230448	0.0248210	0.0297599
	0.025		0.0425517	0.0193025	0.0146118	0.0157017
8.0	0.100	0.1245893	0.1176433	0.0484140	0.0515225	0.0579991
	0.050	0.0910468	0.0809959	0.0353772	0.0319721	0.0339239
	0.025		0.0583071	0.0325767	0.0232630	0.0210288

“Двустадийная” модификация схемы (26) по точности и надёжности оказалась несколько хуже самой схемы (26).

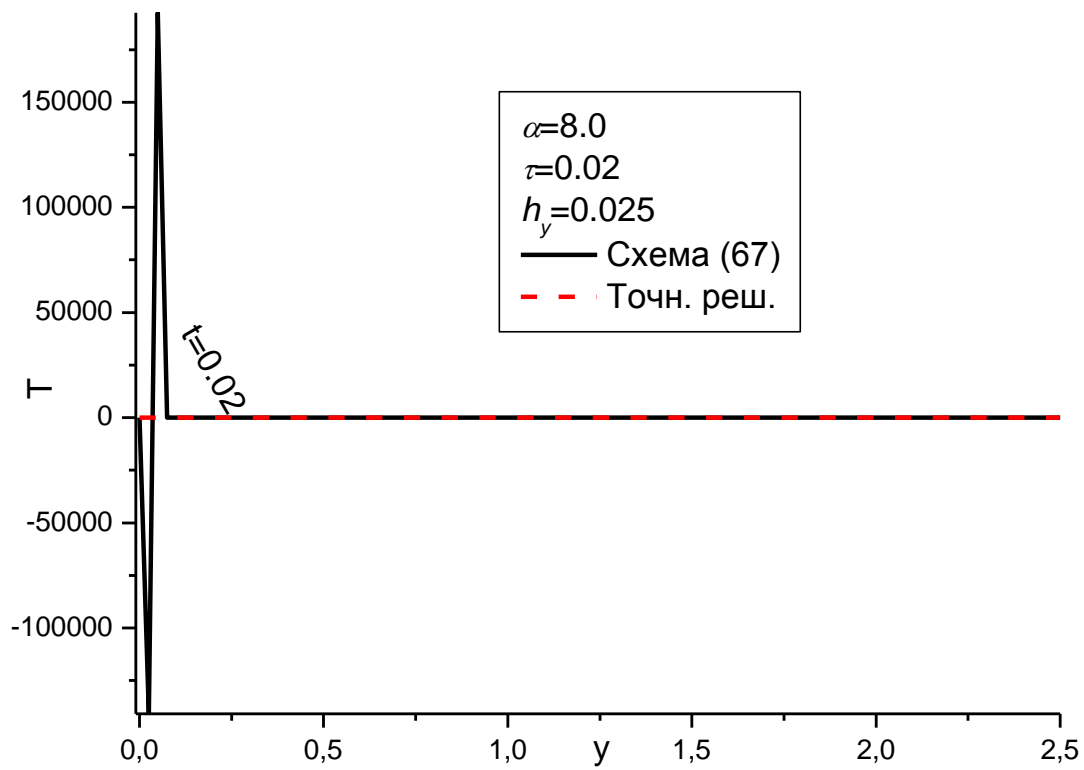
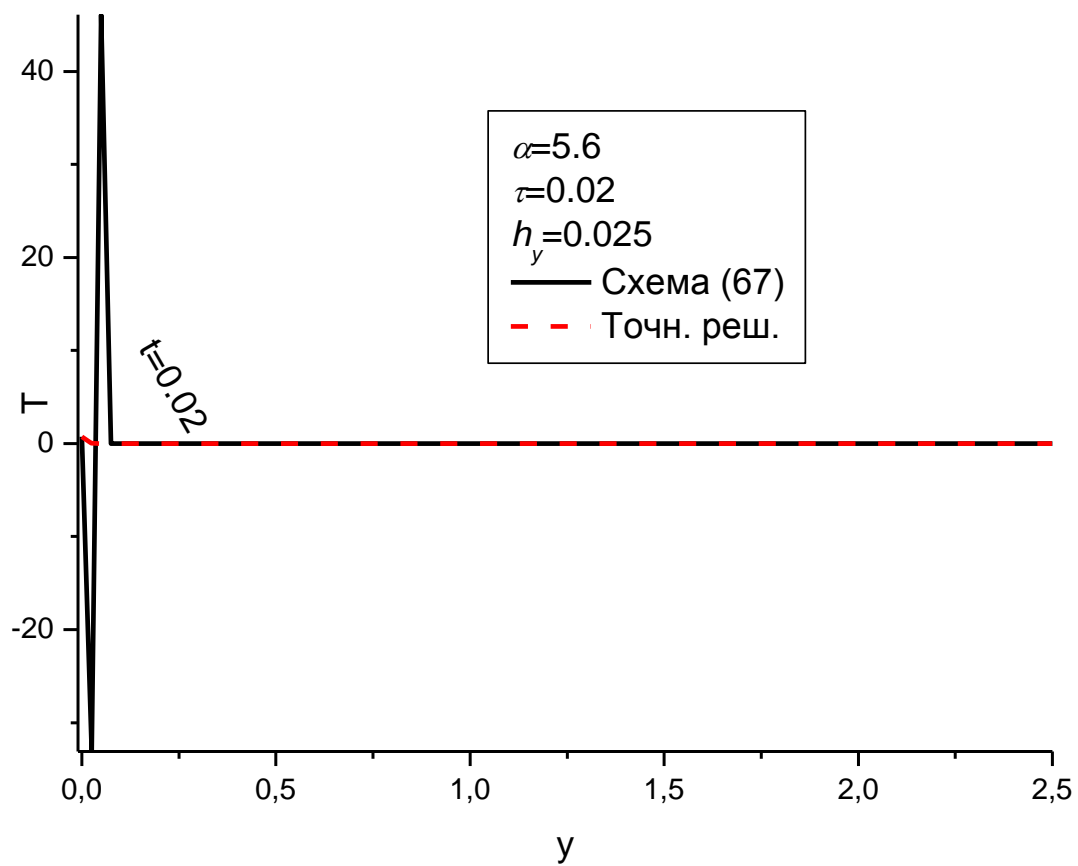


Рис 22. Разворот фронта. Схема (67).

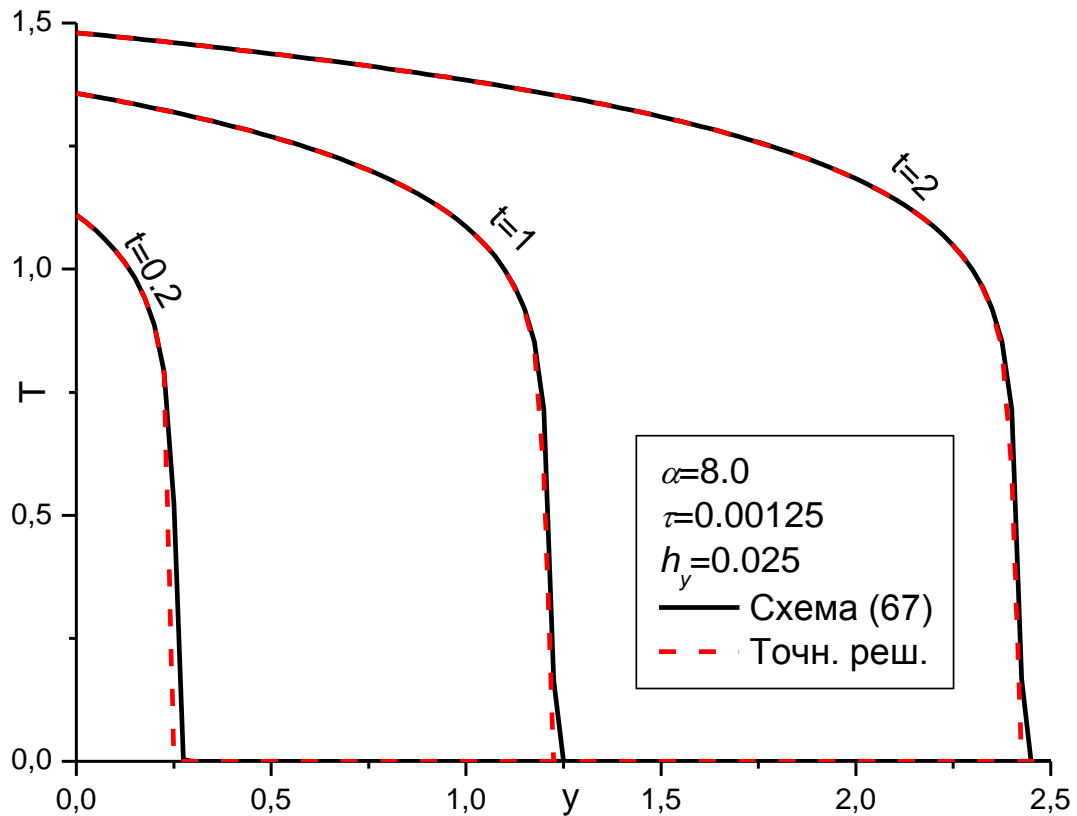


Рис 23. Схема (67).

Схема (67) является  $L4$ -устойчивой и имеет второй порядок аппроксимации. Функция устойчивости схемы (67)

$$R(\xi) = \frac{1}{1 - \xi + \xi^2/2 - \xi^3/8 + \xi^4/64} \quad (68)$$

не является Паде-аппроксимацией экспоненты. При этом по трудоёмкости схема не сильно отличается от исходной схемы (26): одно обращение матрицы типа матрицы Якоби, одно вычисление якобиана, два вычисления правой части.



## 7. Выводы

Не все рассмотренные в данной работе схемы, изначально предложенные для интегрирования жестких систем ОДУ, справились с интегрированием дифференциального уравнения в частных производных. Из почти двух десятков схем лишь одна – схема (40) – справилась со всеми постановками, и несколько схем – (26), (67) – не справились с наиболее жесткими постановками. Как видно из четных таблиц с указанием среднеквадратичного отклонения численного решения от точного, аппроксимация практически всех схем (вдоль линий постоянного отношения  $h/\tau$ ) на данной задаче не превышала первого порядка. Но самый неудобный вывод заключается в том, что полученная надёжность схем существенно обеспечивается точным обращением матрицы типа матрицы Якоби  $(\mathbf{E} - \tau \cdot \gamma \partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y})$ , а ненадёжность приносят огрехи конструирования и реализации.

В работе намеренно не было использовано стратегий выбора шага, так как целью данной работы было исследовать надёжность алгоритмически простых схем, а не их стратегий выбора шага. Хотя конструирование стратегии для некоторых упомянутых в работе схем не составляет труда, стратегия выбора шага по времени никак не согласуется с погрешностями пространственной аппроксимации. А из-за феномена снижения порядка на нелинейных задачах, оценка локальной погрешности, не учитывающая нелинейность задачи, может существенно её переоценивать. Не говоря уже о том, что стратегия выбора шага имеет элемент произвола над постановкой задачи в виде задаваемого вычислителем *tolerance*.

В свете вышесказанного перспективными представляются дальнейшие исследования в направлении развития “безматричных” методов, в которых точное обращение матриц заменено последовательностью матричных сложений и умножений. А также построение монотонных пространственных аппроксимаций высокого порядка, с простым способом оценки погрешности пространственной аппроксимации.

## 8. Заключение

Схемы, справившиеся с двумерным нелинейным нестационарным уравнением теплопроводности, можно не только успешно использовать для численного интегрирования практически любых жестких задач, но и при наличии хорошей пространственной аппроксимации решать уравнения родственных типов из других областей науки, где встречаются такие явления как лучистая теплопроводность, диффузия, фильтрация. Из всех схем чемпионом по надёжности оказалась A-устойчивая схема четвёртого порядка аппроксимации (40), а по точности – классическая одностадийная схема CROS (26).

По результатам данной работы в соавторстве опубликованы две статьи [16] и [20] и ещё две готовятся к публикации.

## 9. Благодарности

Автор выражает искреннюю благодарность П.Д. Ширкову за ценные консультации в процессе исследования и обсуждение результатов.

## 10. Литература

1. *Rosenbrock H.* Some general implicit processes for numerical solution of differential equations // *Computer Journal*, 1963, v.5, № 4, p.329–330.
2. *Федоренко Р.П.* Введение в вычислительную физику – М.: Издательство МФТИ, 1994.
3. *Калиткин Н.Н.* Полуявные схемы для задач большой жесткости. // *ЭНТП*, Серия Б, Т.VII-1, ч.1, под ред. Ю.П.Попова, – М.: Янус-К, 2008, с. 153–171.
4. *Петров И.Б., Лобанов А.И.* Лекции по вычислительной математике – М.: БИНОМ, 2006.
5. *Хайпер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: Мир, 1990.
6. *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999.
7. *Dahlquist G.* A special stability problem for linear multistep methods // *BIT*, 1963, v. 3, pp. 27–43.
8. *Деккер К., Вервер Я.* Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений – М.: Мир, 1988.
9. *Butcher J.* The numerical analysis of ordinary differential equations (Runge-Kutta and general linear methods). – London: John Wiley & Sons Ltd., 1987.
10. *Dnestrovskaya E., Kalitkin N., Kusmina L.*  $L_q$ -decreasing monotonic schemes with complex coefficients and applications to complicated PDE systems // *Applied Numerical Mathematics*, 1994, v. 15, № 3, p. 327–340.
11. *Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В.* Интегрирование жестких систем дифференциальных уравнений // Препринт №80 ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1981.
12. *Ширков П.Д.* Разностные схемы для численного интегрирования неавтономных жестких ОДУ // *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 1987, т.27, №1, с.131–135.
13. *Анистратов Д.Ю., Гольдин В.Я.* Двухстадийная схема с комплексными коэффициентами для систем нелинейных ОДУ первого порядка // *Математическое моделирование*, 1992, т.4, №2, с.45–50.
14. *Артемов С.С., Шкурко И.О.* Алгоритм переменного порядка и шага, основанный на методах Розенброка // *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 1986, т.26, №8, с.1256–1258.

15. Кочетков К.А., Ширков П.Д.  $L$ -затухающие ROW-методы с точной оценкой локальной погрешности // Математическое моделирование, 2001, т.13, №8, с.38–43.
16. Зубанов А.М., Коконков Н.И., Ширков П.Д. Одностадийный метод Розенброка с комплексными коэффициентами и автоматическим выбором шага // Математическое моделирование, 2011, т.23, №3, с.127–138.
17. Днестровская Е.Ю., Калиткин Н.Н., Ритус И.В. Решение уравнений в частных производных схемами с комплексными коэффициентами // Математическое моделирование, 1991, т.3, №9, с.114–127.
18. Анистратов Д.Ю., Гольдин В.Я. Реактор на быстрых нейтронах в саморегулируемом нейтронно-ядерном режиме // Математическое моделирование, 1995, т.7, №4, с.99–127.
19. Гужев Д.С., Зайферт П., Калиткин Н.Н., Ширков П.Д. Численные методы для задач химической кинетики с диффузией // Математическое моделирование, 1992, т.4, № 1, с.98–110.
20. Коконков Н.И., Аристова Е.Н. Схема Розенброка для двумерного нестационарного нелинейного уравнения теплопроводности. // Математика. Компьютер. Образование. Сборник научных трудов. Выпуск 17. Том 1., под ред. Г.Ю. Ризниченко – М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010, стр.189-198.
21. Alexander R. Diagonally implicit Runge-Kutta methods for stiff ODEs // SIAM Journal of Numerical Analysis, 1977, v.14, №6, p.1006–1021.
22. Ширков П.Д., Оптимально затухающие схемы с комплексными коэффициентами для жестких систем ОДУ // Математическое моделирование, 1992, т.4, №8, с.47–57.
23. Альшин А.Б., Альшина Е.А., Лимонов А.Г. Двухстадийные комплексные схемы Розенброка для жёстких систем // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2009, т.49, №2, с.270–287.
24. Ширков П.Д., Зубанов А.М. Двухстадийные однократные ROW-методы с комплексными коэффициентами для автономных систем ОДУ // Компьютерные исследования и моделирование, 2010, т.2, №1, с.19–32.
25. Самарский А.А. Теория Разностных схем – М.: Наука, 1977.
26. Калиткин Н.Н. Численные методы – СПб.: БХВ-Петербург, 2011.
27. Вишневков В.А., Стояновская О.П. Об одном способе конструирования  $W$ -методов для жёстких систем ОДУ // Вычислительные технологии, 2007, т.12, № 4, с.42-58.

## Приложение

Код FORTRAN для расчёта коэффициентов числителя (34b-e) функции устойчивости (34) двустадийной схемы Розенброка с комплексными коэффициентами (33):

```
D1 = DBLE (B1 - 2.0D0*(G1+G2)+B2)
D2 = CDABS (G1)**2+4.0D0*DBLE (G1)*DBLE (G2)+CDABS (G2)**2-
-(DBLE (B1*DCONJG (G1)))+2.0D0*DBLE (B1)*DBLE (G2))+
+DBLE (B2)*DBLE (A21-2.0D0*G1)+DBLE (B2*(P21-DCONJG (G2)))
D3 = (CDABS (G1)**2)*DBLE (B2-2.0D0*G2)+
+(CDABS (G2)**2)*DBLE (B1-2.0D0*G1)+
+2.0D0*DBLE (B1*DCONJG (G1))*DBLE (G2)+
+DBLE (B2*DCONJG (G2))*DBLE (2.0D0*G1-A21)-
-(DBLE (B2)*DBLE (DCONJG (G1)*A21))+
+DBLE (B2*DCONJG (G1+G2)*P21)
D4 = (CDABS (G1)*CDABS (G2))**2-
-(CDABS (G2)**2)*DBLE (B1*DCONJG (G1))+
+DBLE (B2*DCONJG (G2))*(DBLE (A21*DCONJG (G1))-CDABS (G1)**2)+
+DBLE (B2*DCONJG (G1*G2)*P21)
```