

ІНТЕГРАЦІЯ НЬЮТОНІВСЬКОЇ ЛІНЕАРИЗАЦІЇ У ЧАСОВУ ДИСКРЕТИЗАЦІЮ ПОЧАТКОВО-КРАЙОВИХ ЗАДАЧ

Побудовано однокрокову рекурентну схему інтегрування задачі Коші для великих систем звичайних диференціальних рівнянь, які виникають після просторової напівдискретизації початково-крайових задач для систем нелінійних параболічних рівнянь. Основною специфікою побудови цієї схеми є урівноваження порядків похибки частинами лінійної апроксимації за часом та похибки лінеаризації Ньютона. Задана особливість дала змогу сконструювати числову схему типу предиктор-коректор з ваговим параметром. За допомогою принципу стискуючих відображень встановлено достатні умови коректності дискретизованих задач. Показано, що за достатньої регулярності шуканого розв'язку задачі Коші запропонована однокрокова рекурентна схема здатна досягати квадратичної швидкості збіжності апроксимацій до нього. Наведено результати числових експериментів, які характеризують запропоновану схему порівнянням зі схемами Рунге – Кутта різних порядків, а також її застосування для моделювання реакції окиснення чадного газу на поверхні платини.

Математичні моделі багатьох фізико-хімічних процесів, таких як окиснення чадного газу на поверхні платини [9, 10, 12], описуються системами нелінійних параболічних рівнянь реакції-дифузії-конвекції. Застосування просторової дискретизації, наприклад, методом скінченних елементів (МСЕ) [8], зводить подібні початково-крайові задачі до жорстких задач Коші [6] із великими системами звичайних диференціальних рівнянь. Задачі такого типу зазвичай розв'язують неявними методами Рунге – Кутта. Ці методи є порівняно складними в імплементації і вимагають трудомісткого розв'язування систем нелінійних алгебричних рівнянь великих порядків (див. [4]).

Метою цієї роботи є дослідження однокрокової рекурентної схеми (ОРС) інтегрування згаданих вище задач Коші. Алгоритм цієї схеми подано авторами у роботі [2]. Перевагою побудованої ОРС є відсутність ітераційного процесу Ньютона завдяки урівноваженню порядку похибок апроксимації за часом та лінеаризації (див. також [3]).

У **пп. 1, 2** сформульовано задачу Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь та описано шукану, частинами лінійну, апроксимацію її розв'язку з очікуваною похибкою порядку $O(\Delta t^2)$ [2]. У **пп. 3, 4** розглянуто два способи дискретизації задачі Коші. В обох випадках отримано задачу про нерухому точку для систем нелінійних алгебричних рівнянь. Основною невідомою у цій задачі є швидкість зміни апроксимації розв'язку на кожному кроці інтегрування. Із застосуванням принципу стискуючих відображень також встановлено достатні умови однозначної розв'язуваності обох дискретизованих задач. У **п. 5** проведено лінеаризацію цих задач за допомогою розвинень у ряди Тейлора, де знехтувано членами порядку $O(\Delta t^2)$. Це дало можливість сконструювати безітераційні ОРС їх розв'язування. У **п. 6** доведено, що отримані задачі для систем лінійних алгебричних рівнянь (СЛАР) є коректно поставленими. Зазначено, що такі СЛАР зручно розв'язувати ітераційними методами, зокрема методом узагальнених мінімальних нев'язок GMRES [1]. У **п. 7** досліджено локальні похибки застосованої дискретизації. Показано, що вони є величинами порядку $O(\Delta t^2)$, якщо розв'язок задачі Коші має неперервні похідні до другого порядку включно. У **п. 8** окреслено можливість виконання додаткових (i , як показує наведений тут приклад, не завжди необхідних) ітерацій Ньютона для уточнення апроксимації розв'язку. **П. 9** статті доповнює характеристику побудованих схем результатами числового моделювання реакції окиснення чадного газу на поверхні платини.

1. Формулювання абстрактної задачі Коші. Розглянемо нелінійну задачу Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь:

$$\text{задано} \quad \mathbf{u}^0 = \{u_i^0\}_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N, \quad 0 < T < +\infty, \quad \mathbf{f}(t, \mathbf{u}) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N,$$

знайти вектор $\mathbf{u}(t) = \{u_i(t)\}_{i=1}^N$ такий, що

$$\frac{d}{dt} \mathbf{u}(t) := \mathbf{u}'(t) = \mathbf{f}[t, \mathbf{u}(t)] \quad \forall t \in (0, T], \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0. \quad (1)$$

Тут і скрізь далі припускаємо, що задана функція $\mathbf{f} \in [C^2([0, T] \times S)]^N$, де

$$S = \{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^N : \|\mathbf{w}\|^2 = \sum_{i=1}^N w_i^2 < +\infty\}, \quad \text{задовольняє умову Ліпшиця за другим аргументом з деякою обмеженою сталою } L > 0:$$

$$\|\mathbf{f}(t, \mathbf{u}) - \mathbf{f}(t, \mathbf{v})\| \leq L \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\| \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in S. \quad (2)$$

Умова (2) гарантує (див. [7]) існування єдиного розв'язку $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t)$ задачі (1).

Задачі Коші вигляду (1) часто виникають після напівдискретизації Галльоркіна за просторовими змінними варіаційних задач для систем нелінійних параболічних рівнянь [14]. Наприклад, при моделюванні реакції окиснення чадного газу на поверхні платини отримуємо [2]

$$\mathbf{M}\mathbf{u}'(t) + \mathbf{B}\mathbf{u}(t) = \mathbf{N}[t, \mathbf{u}(t)], \quad \mathbf{M}\mathbf{u}(0) = \mathbf{w}^0, \quad (3)$$

де вектор $\mathbf{u}(t) = [u_1(t), \dots, u_N(t)]$ складається із вузлових значень шуканих розподілів концентрацій реагентів, \mathbf{M} – матриця Грама (системи базисних функцій простору апроксимацій МСЕ), \mathbf{B} – матриця дифузійних чинників, вектор $\mathbf{N}[t, \mathbf{u}(t)]$ визначає механізм нелінійної взаємодії компонент реакції, вектор \mathbf{w}^0 описує початкові умови. Оскільки матриця \mathbf{M} невинроджена, то задачі (3) також можна надати вигляду (1) з

$$\mathbf{f}[t, \mathbf{u}(t)] = \mathbf{M}^{-1}\{\mathbf{N}[t, \mathbf{u}(t)] - \mathbf{B}\mathbf{u}(t)\}, \quad \mathbf{u}^0 = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{w}^0. \quad (4)$$

2. Частинами лінійна апроксимація. Поділимо відрізок часу $[0, T]$ на M проміжків $[t_j, t_{j+1}]$, $j = 0, \dots, M-1$, з кроком Δt та апроксимуватимемо розв'язок $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t)$ задачі (1) на кожному з них лінійною функцією

$$\mathbf{u}(t) \approx \mathbf{u}_{\Delta t}(t) = \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}^{j+1/2}, \quad \mathbf{v}^{j+1/2} = (\mathbf{u}^{j+1} - \mathbf{u}^j) / \Delta t, \\ \omega_j(t) = \Delta t^{-1}(t - t_j) \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}], \quad j = 0, \dots, M-1. \quad (5)$$

Поклавши у виразі (5) $\mathbf{u}^j = \mathbf{u}(t_j)$, $\mathbf{v}^{j+1/2} = \mathbf{u}'(t_{j+1/2})$, $t_{j+1/2} := t_j + \Delta t/2$, перетворимо його в інтерполяційний поліном першого порядку для $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t)$ на $[t_j, t_{j+1}]$ з похибкою $\|\mathbf{u}(t) - [\mathbf{u}(t_j) + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{u}'(t_{j+1/2})]\| = O(\Delta t^2)$. Отже, використовуючи при побудові числової схеми лінійну апроксимацію (5), всі наближення можемо отримати з похибками порядку $O(\Delta t^2)$.

3. Дискретизована задача Коші з параметром θ . Підстановка $\mathbf{u}(t) \approx \mathbf{u}_{\Delta t}(t)$, $\mathbf{u}'(t) \approx \mathbf{v}^{j+1/2}$ у рівняння (1) приводить до такої задачі:

$$\text{задано} \quad \mathbf{u}^0 \in \mathbb{R}^N, \quad \Delta t > 0;$$

знайти вектори $\mathbf{v}^{j+1/2}$, $\mathbf{u}^{j+1} \in \mathbb{R}^N$ такі, що

$$\mathbf{v}^{j+1/2} = \mathbf{f}[t, \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}^{j+1/2}], \quad \mathbf{u}^{j+1} := \mathbf{u}^j + \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2}$$

$$\forall t \in [t_j, t_{j+1}], \quad j = 0, \dots, M-1.$$

Розв'язування цієї задачі передбачає насамперед відшукування розв'язку системи нелінійних алгебричних рівнянь з параметром t . Зважаючи на те, що $0 \leq \omega_j(t) \leq 1$, рівняння записаної вище задачі подамо як

$$\mathbf{v}^{j+1/2} = \mathbf{f}[t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{v}^{j+1/2}] \quad \forall \theta \in [0, 1], \quad t_{j+\theta} := t_j + \theta \Delta t. \quad (6)$$

З огляду на умову Ліпшиця (2) оцінка вигляду

$$\|\mathbf{f}(t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{v}) - \mathbf{f}(t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{w})\| \leq L \Delta t \theta \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\| \quad \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^N$$

показує, що функція $F(\mathbf{v}) := \mathbf{f}(t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{v})$ у випадку виконання умови

$$L \Delta t \theta < 1 \quad (7)$$

здійснює стискуjące відображення у просторі \mathbb{R}^N . Тоді, згідно з однойменною теоремою Банаха, задача (6) про нерухому точку має єдиний розв'язок $\mathbf{v}^{j+1/2} \in \mathbb{R}^N$. Отже, за умови (7) задачі:

$$\begin{aligned} \text{задано} \quad & \mathbf{u}^0 \in \mathbb{R}^N, \Delta t > 0, \theta \in [0, 1]; \\ \text{знайти} \quad & \mathbf{v}^{j+1/2}, \mathbf{u}^{j+1} \in \mathbb{R}^N \text{ такі, що} \\ & \mathbf{v}^{j+1/2} = \mathbf{f}[t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{v}^{j+1/2}], \quad \mathbf{u}^{j+1} := \mathbf{u}^j + \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2}, \\ & j = 0, \dots, M-1, \end{aligned} \quad (8)$$

єдиним чином визначають послідовність $\{\mathbf{u}^j\}_{j=1}^M$. Елементи цієї послідовності є значеннями апроксимації (5) розв'язку задачі Коші (1) у вузлах сітки $\{t_j\}_{j=0}^M$, тобто $\mathbf{u}^j \cong \mathbf{u}(t_j)$. Послідовність $\{\mathbf{v}^{j+1/2}\}_{j=0}^{M-1}$ визначає значення швидкості зміни апроксимації на кожному кроці інтегрування $[t_j, t_{j+1}]$, які будемо інтерпретувати як значення $\mathbf{u}'_{\Delta t}(t_{j+1/2})$, тобто $\mathbf{v}^{j+1/2} \cong \mathbf{u}'(t_{j+1/2})$.

4. Дискретизована задача Коші з інтегруванням на відрізку. Підставивши лінійні апроксимації (5) у рівняння задачі (1) та проінтегрувавши результат на відрізку $[t_j, t_{j+1}]$, отримаємо задачу

$$\begin{aligned} \text{задано} \quad & \mathbf{u}^0 \in \mathbb{R}^N, \Delta t > 0; \\ \text{знайти} \quad & \mathbf{v}^{j+1/2}, \mathbf{u}^{j+1} \in \mathbb{R}^N \text{ такі, що} \\ & \mathbf{v}^{j+1/2} = \Delta t^{-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}[t, \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}^{j+1/2}] dt, \\ & \mathbf{u}^{j+1} := \mathbf{u}^j + \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2}, \quad j = 0, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (9)$$

Знаходження розв'язку цієї задачі на кожному кроці інтегрування за часом, в першу чергу, вимагає розв'язання системи нелінійних алгебричних рівнянь

$$\mathbf{v} = \Delta t^{-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}[t, \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}] dt. \quad (10)$$

Для цього введемо оператор $A : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$, який діє згідно з правилом

$$\mathbf{v} \in \mathbb{R}^N \rightarrow A(\mathbf{v}) := \Delta t^{-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}[t, \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}] dt \in \mathbb{R}^N.$$

Тоді задача (9) зводиться до знаходження вектора $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^N$, який є розв'язком задачі про нерухому точку рівняння $\mathbf{v} = A(\mathbf{v})$. Щоб переконатися в існуванні розв'язку цієї задачі, виконаємо оцінки з використанням умови Ліпшиця (2):

$$\begin{aligned}
\|A(\mathbf{v}) - A(\mathbf{w})\|^2 &\leq \Delta t^{-2} \left\{ \sum_{m=1}^N \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left| f_m[t, \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}] - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - f_m[t, \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{w}] \right| dt \right\}^2 \leq \\
&\leq \Delta t^{-2} L^2 \left\{ \sum_{m=1}^N \int_{t_j}^{t_{j+1}} \Delta t \omega_j(t) \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\| dt \right\}^2 = \\
&= \frac{1}{4} \Delta t^2 L^2 N^2 \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2 \quad \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^N.
\end{aligned}$$

Отже, на основі принципу стискуючих відображень Банаха (див. [5]), отримуємо достатню ознаку розв'язуваності дискретизованої задачі (1).

Теорема 1 (Про існування та єдиність розв'язку дискретизованої задачі). *Якщо крок інтегрування $\Delta t > 0$ задачі Коші (1) такий, що задовольняє умову*

$$\alpha(\Delta t) := \tau L N < 1, \quad \tau = \Delta t / 2, \quad (11)$$

то задача (10) про нерухому точку має єдиний розв'язок $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{j+1/2}$ і ОРС (9) однозначно визначає вузлові значення $\{\mathbf{u}^j\}_{j=1}^M$ та $\{\mathbf{v}^{j+1/2}\}_{j=0}^{M-1}$ частинами лінійної апроксимації $\mathbf{u}_{\Delta t} = \mathbf{u}_{\Delta t}(t)$ задачі Коші (1).

Таким чином, різними способами дискретизації одержано числові схеми (8) та (9) інтегрування задачі Коші. Обидві схеми за умов (7) та (11) однозначно генерують частинами лінійні апроксимації розв'язку цієї задачі, які вимагають на кожному кроці інтегрування за часом розв'язання відповідних систем нелінійних рівнянь. На основі принципу стискуючих відображень можна стверджувати, що ітераційні методи розв'язування нелінійних систем рівнянь будуть збігатися до розв'язків цих рівнянь.

Отже, наступним кроком розбудови числових схем (8) і (9) є вибір ефективного та надійного методу розв'язування систем нелінійних рівнянь вигляду (6) і (10).

5. Лінеаризація дискретизованих задач з урівноваженням похибок. Тут і нижче припускаємо, що функція $\mathbf{f} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u})$ є достатньо регулярною, тобто має стільки похідних за обома змінними, скільки вимагається в ході міркувань.

5.1. Лінеаризація системи рівнянь схеми (8). Введемо такі позначення: $\mathbf{v}^j := \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}^j)$ – обчислене на попередньому кроці наближення до $\mathbf{u}'(t_j) = \mathbf{f}[t_j, \mathbf{u}(t_j)]$; $\bar{\mathbf{u}}^{j+1/2} := \mathbf{u}^j + \tau \mathbf{v}^j$ – прогнозоване значення розв'язку $\mathbf{u}(t_{j+1/2})$; $\bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} := \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})$ – прогнозоване значення $\mathbf{u}'(t_{j+1/2})$.

Розвинемо функцію $\mathbf{f}(t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{v}^{j+1/2})$ із дискретизованої задачі (8) за формулою Тейлора в околі точки $(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}(t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{v}^{j+1/2}) &= \mathbf{f}[t_{j+\theta}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2} + \Delta t \theta \mathbf{v} - \tau \mathbf{v}^j] = \\
&= \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) + (t_{j+\theta} - t_{j+1/2}) \mathbf{f}_t(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) + \\
&\quad + \mathbf{f}_u(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) [\Delta t \theta \mathbf{v} - \tau \mathbf{v}^j] + O(\Delta t^2) = \\
&= \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} + (\Delta t \theta - \tau) \mathbf{f}_t(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) + \\
&\quad + \mathbf{f}_u(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) (\Delta t \theta \mathbf{v} - \tau \mathbf{v}^j) + O(\Delta t^2).
\end{aligned}$$

Зважаючи на порядок похибки частинами лінійного наближення розв'язку задачі Коші, знехтуємо величинами порядку малості $O(\Delta t^2)$ у цьому розвиненні. Таким спрощенням лінеаризуємо рівняння із (8) до вигляду

$$\begin{aligned} [\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})](\mathbf{v}^{j+1/2} - \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2}) &= (\Delta t \theta - \tau) \mathbf{f}_{\mathbf{t}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) + \\ &+ \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})(\Delta t \theta \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} - \tau \mathbf{v}^j). \end{aligned}$$

Алгоритм наближеного розв'язування задачі (8) при такому способі лінеаризації сформулюємо так:

$$\begin{aligned} \text{задано } \mathbf{u}^j \in \mathbb{R}^N, \Delta t > 0, \theta \in [0, 1] \text{ та} \\ \mathbf{v}^j := \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}^j), \quad \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2} := \mathbf{u}^j + \tau \mathbf{v}^j, \quad \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} := \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}); \\ \text{знайти вектори } \mathbf{v}^{j+1/2}, \mathbf{u}^{j+1} \in \mathbb{R}^N \text{ такі, що} \\ [\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})](\mathbf{v}^{j+1/2} - \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2}) &= \\ &= (\Delta t \theta - \tau) \mathbf{f}_{\mathbf{t}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) + \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})(\Delta t \theta \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} - \tau \mathbf{v}^j), \\ \mathbf{u}^{j+1} := \mathbf{u}^j + \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2}, \quad j = 0, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (12)$$

5.2. Лінеаризація системи рівнянь схеми (9). Розвинемо підінтегральну функцію у рівнянні задачі (9) за формулою Тейлора в околі точки $(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})$:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}[t, \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}^{j+1/2}] &= \mathbf{f}[t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2} + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}^{j+1/2} - \tau \mathbf{v}^j] = \\ &= \mathbf{f}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) + \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})[\Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}^{j+1/2} - \tau \mathbf{v}^j] + O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Тепер обчислимо інтеграл у (9) за формулою прямокутників з вузлом квадратури у центральній точці $t_{j+1/2}$:

$$\begin{aligned} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}[t, \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \mathbf{v}^{j+1/2}] dt &\cong \Delta t [\mathbf{f}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) + \\ &+ \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})(\mathbf{v}^{j+1/2} - \mathbf{v}^j) + O(\Delta t^2)] \end{aligned}$$

і, знехтувавши величинами порядку малості $O(\Delta t^2)$, замінимо нелінійне рівняння у (9) лінійним наближенням

$$[\mathbf{I} - \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})](\mathbf{v}^{j+1/2} - \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2}) = \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})(\bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} - \mathbf{v}^j).$$

Отже, після застосованої тут лінеаризації, отримуємо такий алгоритм наближеного розв'язування задачі (9):

$$\begin{aligned} \text{задано } \mathbf{u}^j \in \mathbb{R}^N, \Delta t = 2\tau > 0 \text{ та} \\ \mathbf{v}^j := \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}^j), \quad \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2} := \mathbf{u}^j + \tau \mathbf{v}^j, \quad \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} := \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}); \\ \text{знайти вектори } \mathbf{v}^{j+1/2}, \mathbf{u}^{j+1} \in \mathbb{R}^N \text{ такі, що} \\ [\mathbf{I} - \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})](\mathbf{v}^{j+1/2} - \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2}) &= \\ &= \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})(\bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} - \mathbf{v}^j), \\ \mathbf{u}^{j+1} = \mathbf{u}^j + \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2}, \quad j = 0, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (13)$$

Зазначимо, що при виборі $\theta = 1/2$ схема (12) співпадає зі схемою (13).

Приклад 1. На прикладі задачі Коші

$$u'(t) = -2t \cos t^2 (\sin t^2 + 2)u^3(t) \quad \forall t \in (0, T], \quad u(0) = 0.5, \quad (14)$$

з розв'язком $u(t) = [\sin t^2 + 2]^{-1}$ проілюструємо вплив параметра θ на точність і збіжність ОРС (12). Щоб охарактеризувати знайдені апроксимації, тут і далі вживаємо норму

$$\|\mathbf{w}\|_T^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}(T)\|^2 + \int_0^T \|\mathbf{w}(t)\|^2 dt \quad \forall \mathbf{w} \in [C([0, T])]^n \quad \forall n \geq 1.$$

Збіжність апроксимацій задачі Коші (14), обчислених за схемою (12) із різними значеннями параметра θ для $T = 4$, ілюструють результати, наведені у табл. 1. Тут позначено: $e_{\Delta t} = \|\mathbf{u}_{\Delta t} - \mathbf{u}\|_T$ і $\varepsilon_{\Delta t} = e_{\Delta t} \|\mathbf{u}_{\Delta t}\|_T^{-1} \times 100\%$ – похибки апроксимації, $p_{\Delta t} = \log_2 e_{\Delta t} - \log_2 e_{\Delta t/2}$ – порядок збіжності ОРС.

Таблиця 1

$10^6 \cdot \Delta t$	$\theta = 0$			$\theta = 1/2$			$\theta = 1$		
	$10^3 \cdot e_{\Delta t}$	$10 \cdot \varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$	$10^6 \cdot e_{\Delta t}$	$10^4 \cdot \varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$	$10^3 \cdot e_{\Delta t}$	$10 \cdot \varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$
0.01	127	108	–	430	364	–	821	696	–
0.005	75	64	0.8	107	91	2.0	135	114	2.6
0.0025	42	36	0.9	27	23	2.0	55	47	1.3
0.00125	22	19	0.9	7	6	2.0	25	22	1.1
0.000625	11	10	1.0	2	1	2.0	12	10	1.1

Дані у табл. 1 свідчать про найкращу точність і другий порядок збіжності числових схем за вибору $\theta = 1/2$.

Приклад 2. Розглянемо жорстку задачу Коші

$$u'(t) = -10^3 u^2(t) \quad \forall t \in (0, T], \quad u(0) = 10, \quad (15)$$

з точним розв'язком $u(t) = 10(1 + 10^4 t)^{-1}$. Результати обчислень задачі (15) за схемою (13) та класичними методами Рунге – Кутта 2-го і 4-го порядків (див. відповідно [13] та [4]) при $T = 0.002$ подано в табл. 2.

Таблиця 2

$10^6 \cdot \Delta t$	Схема (13)			Рунге – Кутта 2-го порядку			Рунге – Кутта 4-го порядку		
	$10^6 \cdot e_{\Delta t}$	$10^4 \cdot \varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$	$10^6 \cdot e_{\Delta t}$	$10^4 \cdot \varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$	$10^6 \cdot e_{\Delta t}$	$10^4 \cdot \varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$
100.0	6547	19490	–	48480	144328	–	5767	17168	–
50.0	1820	5306	1.8	8607	25090	2.5	1877	5473	1.6
25.0	478	1378	1.9	1755	5060	2.3	499	1439	1.9
12.5	121	347	2.0	393	1128	2.2	127	364	2.0
6.25	30	87	2.0	93	266	2.1	32	91	2.0

Дані у табл. 2 свідчать, що схема (13) за точністю близька до методу Рунге – Кутта 4-го порядку.

6. Розв'язуваність систем лінійних алгебричних рівнянь ОРС. Обмежимося доведенням, що (за певних умов) система лінійних алгебричних рівнянь схеми (12) однозначно розв'язується на кожному кроці інтегрування за часом. Для спрощення записів введемо позначення

$$\boldsymbol{\xi} := \mathbf{v}^{j+1/2} - \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2}, \quad \mathbf{F} := \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}),$$

$$\mathbf{b} = (\Delta t \theta - \tau) \mathbf{f}_{\mathbf{t}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) + \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})(\Delta t \theta \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} - \tau \mathbf{v}^j)$$

і запишемо систему лінійних алгебричних рівнянь із (12) у скороченому вигляді $(\mathbf{I} - \tau\mathbf{F})\boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$. Покажемо, що існує матриця $(\mathbf{I} - \tau\mathbf{F})^{-1}$ така, що

$$\boldsymbol{\xi} = (\mathbf{I} - \tau\mathbf{F})^{-1}\mathbf{b}. \quad (16)$$

Побудуємо послідовність $\{\boldsymbol{\xi}_n\}$ за допомогою такої ітераційної процедури: $\boldsymbol{\xi}_0 := \mathbf{b}$, $\boldsymbol{\xi}_{n+1} := \tau\mathbf{F}\boldsymbol{\xi}_n + \mathbf{b}$, $n = 0, 1, \dots$. Кожен член цієї послідовності можна обчислити у вигляді

$$\boldsymbol{\xi}_{n+1} := \tau\mathbf{F}\boldsymbol{\xi}_n + \mathbf{b} = \tau\mathbf{F}(\tau\mathbf{F}\boldsymbol{\xi}_{n-1} + \mathbf{b}) + \mathbf{b} = \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} (\tau\mathbf{F})^k \right\} \mathbf{b}.$$

Припустивши, що існує границя $\boldsymbol{\xi} := \lim_{n \rightarrow \infty} \boldsymbol{\xi}_n = \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} (\tau\mathbf{F})^k \right\} \mathbf{b}$ цієї послідовності, прирівнюємо її до (16), звідки формально отримуємо, що

$$(\mathbf{I} - \tau\mathbf{F})^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (\tau\mathbf{F})^k. \quad (17)$$

Тепер з посиланням на теорему про збіжність ряду Неймана (див., наприклад, [5]) сформулюємо таке твердження.

Теорема 2 (Про коректність системи рівнянь ОРС). *Нехай на кожній кроці інтегрування за часом задачі Коші (1) однокроковою рекурентною схемою (12) виконується умова*

$$\tau \|\mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \mathbf{v})\| < 1 \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}], \quad \forall \mathbf{v} \in S := \{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^N : \|\mathbf{w}\| < +\infty\}.$$

Тоді система лінійних алгебричних рівнянь ОРС (12) має єдиний розв'язок

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^{j+1/2} &= \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} + [\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})]^{-1} [(\Delta t \theta - \tau) \mathbf{f}_t(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) - \\ &\quad - \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) \mathbf{v}^j], \end{aligned}$$

де

$$[\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})]^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} [\tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})]^k.$$

Більше цього,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{v}^{j+1/2}\| &\leq \|\bar{\mathbf{v}}^{j+1/2}\| + [1 - \Delta t \theta \|\mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})\|]^{-1} \times \\ &\quad \times [|\Delta t \theta - \tau| \|\mathbf{f}_t(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})\| + \tau \|\mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})\| \|\mathbf{v}^j\|]. \end{aligned}$$

Ітераційна процедура (17) побудови оберненої матриці наводить на думку, що СЛАР однокрокової рекурентної схеми (12) можуть бути економічно та ефективно розв'язані ітераційними методами. Для задач Коші, отриманих застосуванням МСЕ до початково-крайових задач для систем нелінійних параболічних рівнянь, матриця СЛАР є несиметричною, розрідженою і настільки великою, що доцільно використовувати проєкційний метод узагальнених мінімальних нев'язок GMRES з перезапусками [1].

7. Апроксимативність. Локальна похибка дискретизації. Нижче обмежимося дослідженням похибок схеми (13), які можуть виникнути внаслідок інтегрування нею задачі (1) на довільному проміжку $[t_j, t_{j+1}]$ довжини Δt .

Для цього припустимо, що обчислене у момент часу t_j значення \mathbf{u}^j дорівнює значенню точного розв'язку $\mathbf{u}(t_j)$. Тоді з огляду на схему (13) запишемо

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}^j &= \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}^j) = \mathbf{f}[t_j, \mathbf{u}(t_j)] = \mathbf{u}'(t_j), \\
\bar{\mathbf{u}}^{j+1/2} &:= \mathbf{u}^j + \tau \mathbf{v}^j = \mathbf{u}(t_j) + \tau \mathbf{u}'(t_j), \\
\bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} &:= \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) = \mathbf{f}[t_{j+1/2}, \mathbf{u}(t_j) + \tau \mathbf{u}'(t_j)]. \tag{18}
\end{aligned}$$

Тепер скористаємося такими розвиненнями у ряди Тейлора точного розв'язку в околі точки $t = t_{j+1/2} = t_j + \tau$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}(t_j) &= \mathbf{u}(t) + (t_j - t)\mathbf{u}'(t) + \frac{1}{2}(t_j - t)^2 \mathbf{u}''[(1 - \gamma)t_j + \gamma t] = \\
&= \mathbf{u}(t) - \tau \mathbf{u}'(t) + \frac{1}{2} \tau^2 \mathbf{u}''[(1 - \gamma)t_j + \gamma t], \quad \gamma \in (0, 1), \\
\mathbf{u}'(t_j) &= \mathbf{u}'(t) - \tau \mathbf{u}''[(1 - \vartheta)t_j + \vartheta t], \quad \vartheta \in (0, 1).
\end{aligned}$$

Підставляючи ці вирази у (18), отримуємо, що

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{u}}^{j+1/2} &= \mathbf{u}(t_j) + \tau \mathbf{u}'(t_j) = \mathbf{u}(t) - \tau \mathbf{u}'(t) + \frac{1}{2} \tau^2 \mathbf{u}''(t_j + \tau\gamma) + \\
&+ \tau[\mathbf{u}'(t) - \tau \mathbf{u}''(t_j + \tau\vartheta)] = \mathbf{u}(t) + \tau^2 \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}''), \tag{19}
\end{aligned}$$

а також

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} &= \mathbf{f}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) = \mathbf{f}[t, \mathbf{u}(t) + \tau^2 \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}'')] = \mathbf{f}[t, \mathbf{u}(t)] + \\
&+ \tau^2 \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t, \mathbf{u}(t)]\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}'') = \mathbf{u}'(t) + \tau^2 \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t, \mathbf{u}(t)]\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}''). \tag{20}
\end{aligned}$$

Тут $\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}'')$ – деяка лінійна комбінація значень $\mathbf{u}''(t)$ з інтервалу $(t_j, t_{j+1/2})$. Зважаючи на (19) і (20), системі лінійних алгебричних рівнянь схеми (13) надамо вигляду

$$\begin{aligned}
[\mathbf{I} - \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})]\{\mathbf{v}^{j+1/2} - \mathbf{u}'(t) - \tau^2 \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t, \mathbf{u}(t)]\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}'')\} &= \\
= \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})\{\mathbf{u}'(t) + \tau^2 \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t, \mathbf{u}(t)]\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}'') - \\
- \mathbf{u}'(t) + \tau \mathbf{u}''(t_j + \tau\vartheta)\} &
\end{aligned}$$

або після нехтування величинами вищих порядків малості:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{I} - \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})][\mathbf{v}^{j+1/2} - \mathbf{u}'(t)] &= \tau^2 \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})\mathbf{u}''(t_j + \tau\vartheta) + \\
+ \tau^2 [\mathbf{I} - \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})]\mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t, \mathbf{u}(t)]\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}''). &
\end{aligned}$$

Звідси на підставі теореми 1 маємо вираз для похибки апроксимації похідної розв'язку

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}^{j+1/2} - \mathbf{u}'(t) &= \tau^2 [\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})]^{-1} \{\mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})\mathbf{u}''(t_j + \tau\vartheta) + \\
+ [\mathbf{I} - \tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})]\mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t, \mathbf{u}(t)]\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}'')\} &= \\
= \tau^2 \left\{ \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} [\tau \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})]^k \right\} \times \right. & \\
\left. \times \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})\mathbf{u}''(t_j + \tau\vartheta) + \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t, \mathbf{u}(t)]\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{u}'') \right\}, &
\end{aligned}$$

а також

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}^{j+1} - \mathbf{u}(t_{j+1}) &= \mathbf{u}(t_j) + \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2} - \mathbf{u}(t_{j+1}) = \\
&= \left[\mathbf{u}(t) - \tau \mathbf{u}'(t) + \frac{1}{2} \tau^2 \mathbf{u}''(t_j + \tau\gamma) \right] + \\
&+ \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2} - \left[\mathbf{u}(t) + \tau \mathbf{u}'(t) + \frac{1}{2} \tau^2 \mathbf{u}''(t_j + \tau\xi) \right] = \\
&= \Delta t [\mathbf{v}^{j+1/2} - \mathbf{u}'(t)] + \frac{1}{2} \tau^2 \mathbf{u}''(t_j + \tau\alpha), \quad \alpha, \gamma, \xi \in (0, 1). \quad (21)
\end{aligned}$$

Зауваження. Якщо припустити, що існує $\mathbf{u}'' \in [C([t_j, t_{j+1}]))^N$, і скористатися розвиненнями за формулами Тейлора вищого порядку

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}(t_j) &= \mathbf{u}(t) - \tau \mathbf{u}'(t) + \frac{1}{2} \tau^2 \mathbf{u}''(t) - \frac{1}{6} \tau^3 \mathbf{u}'''(t_j + \tau\gamma), \\
\mathbf{u}(t_{j+1}) &= \mathbf{u}(t) + \tau \mathbf{u}'(t) + \frac{1}{2} \tau^2 \mathbf{u}''(t) + \frac{1}{6} \tau^3 \mathbf{u}'''(t_j + \tau\xi), \quad \gamma, \xi \in (0, 1),
\end{aligned}$$

то вираз для похибки апроксимації розв'язку (19) набуде вигляду

$$\mathbf{u}^{j+1} - \mathbf{u}(t_{j+1}) = \Delta t [\mathbf{v}^{j+1/2} - \mathbf{u}'(t)] + \frac{1}{6} \tau^3 \mathbf{u}'''(t_j + \tau\alpha), \quad \alpha \in (0, 1). \quad (22)$$

8. Уточнення апроксимацій ОРС методом Ньютона. Однокрокова рекурентна схема (12) розв'язування задачі Коші (1) є безітераційною, оскільки на кожному кроці інтегрування за часом вимагає одноразового розв'язання лінеаризованої системи рівнянь відносно вектора $\mathbf{v}^{j+1/2} \in \mathbb{R}^N$. Іноді для контролю (і підвищення) точності обчислення цього вектора варто скористатися декількома додатковими ітераціями методу Ньютона. У такому випадку без порушення однорідності обчислювального процесу можна замінити розв'язування системи рівнянь схеми (12) на таку процедуру методу Ньютона: задавши значення допустимого рівня похибки $\varepsilon = \text{const} > 0$ та початкове наближенням $\mathbf{q}^{(0)} = \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}^j)$, послідовно розв'язуємо системи рівнянь

$$\begin{aligned}
[\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{q}^{(m-1)})][\mathbf{q}^{(m)} - \mathbf{q}^{(m-1)}] &= \\
&= \mathbf{f}(t_{j+\theta}, \mathbf{u}^j + \Delta t \theta \mathbf{q}^{(m-1)}) - \mathbf{q}^{(m-1)}, \quad m = 1, 2, \dots \quad (23)
\end{aligned}$$

Як тільки виконається критерій зупинки $\frac{\|\mathbf{q}^{(m)} - \mathbf{q}^{(m-1)}\|}{\|\mathbf{q}^{(m-1)}\|} \leq \varepsilon$, прийма-

ємо, що шуканий вектор $\mathbf{v}^{j+1/2} := \mathbf{q}^{(m)}$.

Приклад 3. Щоб проілюструвати, наскільки потрібні додаткові ітерації Ньютона для уточнення апроксимацій схеми (13), розглянемо задачу Коші

$$\begin{aligned}
u_1'(t) &= f_1[t, \mathbf{u}(t)] := -2t \cos t^2 u_1^3(t) u_2^{-1}(t) u_3^{-1}(t), \\
u_2'(t) &= f_2[t, \mathbf{u}(t)] := -2t u_2(t) [\cos t^2 u_1(t) + \sin t^2 u_3(t)], \\
u_3'(t) &= f_3[t, \mathbf{u}(t)] := 2t \sin t^2 u_1^{-1}(t) u_2(t) u_3^3(t) \quad \forall t \in (0, T], \\
u_1(0) &= 1/3, \quad u_2(0) = 2/3, \quad u_3(0) = 1/2, \quad (24)
\end{aligned}$$

яка має точний розв'язок

$$u_1(t) = \frac{1}{\sin t^2 + 2}, \quad u_3(t) = \frac{1}{\cos t^2 + 2}, \quad u_2(t) = \frac{u_1(t)}{u_3(t)}.$$

У табл. 3 наведено результати обчислень апроксимацій для задачі (24) за схемою (13) і з уточненням ітераціями методом Ньютона (23). Тут m і M – відповідно мінімальна та максимальна кількість ітерацій Ньютона; $T = 4$; $e_{\Delta t} := \|\mathbf{u}_{\Delta t} - \mathbf{u}_{\Delta t/2}\|_T$, $\varepsilon_{\Delta t} = e_{\Delta t} \|\mathbf{u}_{\Delta t}\|_T^{-1} \times 100\%$, $E_{\Delta t} := \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\Delta t}\|_T$ – похибки апроксимацій; $p_{\Delta t} = \log_2 e_{\Delta t} - \log_2 e_{\Delta t/2}$ – порядок збіжності ОРС.

Таблиця 3

Δt	Схема (13)				Ітерації Ньютона з $\varepsilon = 10^{-7}$, (23)					
	$10^6 \cdot e_{\Delta t}$	$\varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$	$10^6 \cdot E_{\Delta t}$	$10^6 \cdot e_{\Delta t}$	$\varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$	$10^6 \cdot E_{\Delta t}$	$[m, M]$	
0.05	26897	8.16	-	23986	29058	8.82	-	24149	[2, 4]	
0.025	6512	1.98	2.0	5984	6490	1.97	2.2	5985	[2, 3]	
0.0125	1604	0.49	2.0	1494	1600	0.49	2.0	1493	[2, 3]	
0.00625	399	0.12	2.0	373	399	0.12	2.0	373	[2, 3]	

Табл. 3. демонструє важливий з точки зору обчислень факт, що виконання двох і більше ітерацій Ньютона істотно не підвищують точності та порядку збіжності чисельної схеми (23). Таким чином, у цьому і подібних випадках, замість додаткових ітерацій Ньютона, краще застосовувати зменшення кроку інтегрування за часом, ефективність якого можна контролювати апостеріорними оцінювачами похибок [11].

9. Числове моделювання окиснення чадного газу на поверхні платини. Застосуємо одержані схеми (13) і (23) для числового моделювання реакції окиснення чадного газу на поверхні платини, основними складовими якої є кисень (O_2), чадний газ (CO) і поверхня платини. На основі теоретичних та експериментальних досліджень G. Ertl [10] створив модель, у якій вперше враховано ці складові реакції і яка стала базовою для розвитку багатьох інших [9, 12]: знайти покриття поверхні молекулами чадного газу $a = a(t)$, кисню $b = b(t)$, ступінь реконструкції $n = n(t)$ та огранування поверхні $z = z(t)$ такі, що

$$\begin{aligned}
 a'(t) &= p_{CO} k_c s_c [1 - (a(t)/a_s)^q] - k_d a(t) - k_r a(t)b(t), \\
 n'(t) &= k_p \begin{cases} -n(t), & 0 \leq a(t) \leq 0.2, \\ \sum_{i=0}^3 r_i a^i(t) - n(t), & 0.2 < a(t) < 0.5, \\ 1 - n(t), & 0.5 \leq a(t) \leq 1, \end{cases} \\
 b'(t) &= p_{O_2} k_0 s_0 [n(t)][1 - a(t)/a_s - b(t)/b_s]^2 - k_r a(t)b(t), \\
 z'(t) &= k_f \cdot a(t) \cdot b(t) \cdot n(t) \cdot [1 - z(t)] - k_z z(t)[1 - a(t)] \quad \forall t \in (0, T), \\
 a|_{t=0} &= a^0, \quad n|_{t=0} = n^0, \quad b|_{t=0} = b^0, \quad z|_{t=0} = z^0, \quad (25)
 \end{aligned}$$

де масштабовані a, b, n, z набувають значень з проміжку $[0, 1]$, $a + b \leq 1$, t – змінна часу, стосовно решти даних задачі дивитись [10].

Деякі результати числових досліджень задачі (15) подано у табл. 4 та на рис. 1. Обчислення апроксимацій розв'язків (табл. 4) виконано при $T = 350$ с.

Таблиця 4

Δt	Схема (13)			Ітерації Ньютона (23) з $\varepsilon = 10^{-7}$			
	$p_{\Delta t}$	$10^7 \cdot e_{\Delta t}$	$10^5 \cdot \varepsilon_{\Delta t}$	$p_{\Delta t}$	$10^7 \cdot e_{\Delta t}$	$10^5 \cdot \varepsilon_{\Delta t}$	$[m, M]$
0.05	-	7199142	589810	-	1723122	141171	[2, 4]
0.025	2.8	1012230	82929	2.0	421383	34523	[2, 3]
0.0125	3.0	125477	10280	2.0	104461	8571	[2, 3]
0.00625	2.2	26671	2185	2.0	26043	2134	[2, 3]
0.003125	2.0	6552	537	2.0	6525	534	[2, 3]

З даних табл. 4 можемо зробити висновок, що інтегрування задачі Коші за схемою (13) з удвічі меншим кроком компенсує обчислювальні витрати на уточнення апроксимації розв'язку додатковими ітераціями Ньютона схеми (23).

На рис. 1 показано апроксимацію з $\Delta t = 0.01$ с розв'язків задачі (25): a , b – ступені покриття поверхні молекулами чадного газу та кисню, n – ступінь реконструкції поверхні, z – ступінь огранування поверхні.

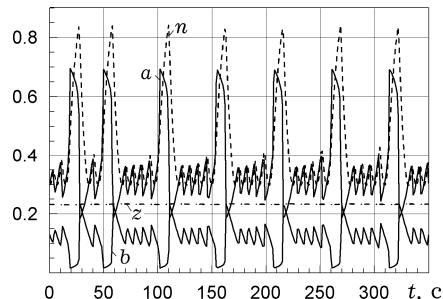


Рис. 1

Наведені графіки розв'язку задачі (25) добре узгоджуються з опублікованими у статті [10].

Висновки та заключні зауваження. Побудовано ОРС інтегрування за часом нелінійних задач Коші для великих систем звичайних диференціальних рівнянь першого порядку. Ця схема оперує зі швидкістю зміни частинами лінійної апроксимації розв'язку (як основною невідомою задачі) і базується на узгодженні порядків похибок цієї апроксимації та лінеаризації дискретизованої задачі, методика якої розвинена у працях [2, 3]. У цій статті процедура ОРС [2, 3] доповнена екстраполяцією швидкості зміни апроксимації з попереднього кроку інтегрування за часом для обчислення початкового наближення швидкості на новому кроці, що дозволило отримати схему типу предиктор-коректор.

З використанням принципу стискуючих відображень встановлено існування та єдиність розв'язків дискретизованих рівнянь, їх стійкість та апроксимативність, зокрема, квадратичну швидкість збіжності до точного розв'язку.

Числові розрахунки, виконані за ОРС (13), продемонстрували точність обчислень, близьку до методу Рунге – Кутта 4-го порядку. Порівняння із схемою (23) з ітераціями Ньютона підтвердило обчислювальну надійність безітераційної схеми (13) з узгодження похибок дискретизації за часом та лінеаризації.

Запропоновану схему апробовано на практично важливій задачі реакції окиснення чадного газу на поверхні платини, результати числових експериментів цілком узгоджуються як з теоретичними висновками, так і результатами праці [10].

1. Баландин М. Ю., Шурина Э. П. Методы решения СЛАУ большой размерности. – Новосибирск: Изд-во Новосибирск. гос. техн. ун-та, 2000. – 70 с.
2. Вовк О., Павленко Н., Шинкаренко Г., Вовк В. Проекційно-сіткова схема розв'язування еволюційних задач окиснення чадного газу на поверхні платини // Вісн. Львів. нац. ун-ту. Серія прикл. математика та інформатика. – 2012. – Вип. 18. – С. 54-69.
3. Гачкевич О., Смірнов О., Шинкаренко Г. Числове розв'язування нелінійних задач перенесення зарядів у напівпровідникових структурах // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. математика та інформатика. – 2005. – Вип. 10. – С. 98-110.
4. Калиткин Н. Н. Численные методы. – Москва: Наука, 1978. – 512 с.
5. Остудін Б. А., Шинкаренко Г. А. Методи функціонального аналізу в обчислювальній математиці. – Львів: Світ поліграфії, 1998. – 184 с.
6. Самарский А. А. Введение в численные методы. – Москва: Наука, 1982. – 272 с.

7. Степанов В. В. Курс дифференциальных уравнений. – Москва: Гостехтеоретиздат, 1950. – 473 с.
8. Шинкаренко Г. А. Проекційно-сіткові методи розв'язування початково-краєвих задач. – Київ: Навч.-метод. комплекс ВО, 1991. – 88 с.
9. Bär M., Gottschalk N., Eiswirth M., Ertl G. Spiral waves in a surface reaction: Model calculations // J. Chem. Phys. – 1994. – **100**, No. 2. – P. 1202–1214.
10. Ertl G., Krischer K., Eiswirth M. Oscillatory CO oxidation on Pt(110): Modeling of temporal self-organization // J. Chem. Phys. – 1992. – **96**, No. 12. – P. 9161–9172.
11. Gonzalez-Pinto S., Perez-Rodriguez S. A variable time-step-size code for advection–diffusion–reaction PDEs // Appl. Numer. Math. – 2012. – **62**. – P. 1447–1462.
12. Pavlenko N. CO-activator model for reconstructing Pt(100) surfaces: local microstructure and chemical turbulence // Phys. Rev. E. – 2008. – **77**. – 026203.
13. Quarteroni A. Numerical models for differential problem. – Milano: Springer-Verlag, 2009. – 611 p.
14. Thomee V. Galerkin finite element methods for parabolic problems. – Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 2006. – 376 p.

ИНТЕГРАЦИЯ НЬЮТОНОВСКОЙ ЛИНЕАРИЗАЦИИ ВО ВРЕМЕННУЮ ДИСКРЕТИЗАЦИЮ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ

Построена одношаговая рекуррентная схема интегрирования задачи Коши для больших систем обыкновенных дифференциальных уравнений, которые возникают после пространственной полудискретизации начально-краевых задач для систем нелинейных параболических уравнений. Главной спецификой построения данной схемы является уравнивание порядков погрешности частями линейной аппроксимации по времени и погрешности линеаризации Ньютона. Эта особенность позволила сконструировать численную схему типа предиктор-корректор с весовым параметром. С помощью принципа сжимающих отображений установлены достаточные условия корректности дискретизированных задач. Показано, что при достаточной регулярности искомого решения задачи Коши предложенная одношаговая рекуррентная схема способна достигать квадратичной скорости сходимости аппроксимаций. Приведены результаты численных экспериментов, которые характеризуют предложенную схему сравнением со схемами Рунге – Кутты разных порядков, а также ее применение к моделированию реакции окисления угарного газа на поверхности платины.

IMPLEMENTATION OF NEWTON LINEARIZATION IN TIME DISCRETIZATION OF INITIAL-BOUNDARY VALUE PROBLEMS

An one-step time integration recurrent scheme of Cauchy problem for large systems of ordinary differential equations is constructed. Such problems arise after spatial semi-discretization of initial-boundary value problems for nonlinear parabolic equations. The main feature of the latter scheme is the balance between error orders of the piecewise linear approximation in time and Newton linearization. This feature allowed construction of predictor-corrector type numerical scheme with a weight parameter. By further application of contraction mappings principle we establish sufficient conditions for the correctness of discretized problems. It is shown, that in the case of a sufficient regularity of the desired solution of Cauchy problem, the proposed one-step recurrent scheme is able to achieve a second order rate of a convergence to this solution. The results of numerical experiments which characterize this scheme by the comparison with Runge – Kutta schemes of various orders and also show its application for a carbon monoxide oxidation modeling on platinum surface are demonstrated.

Львів. нац. ун-т імені Івана Франка, Львів

Одержано
12.10.12