УДК 517.949.8

С. З. Шихалиев
Ин-т проблем моделирования
в энергетике им. Г. Е. Пухова НАН Украины
(Украина, 03164, Киев, ул. Генерала Наумова, 15,
тел. (044) 4241063; E-mail: ipme@ipme.kiev.ua)

Однопараметрическая оптимизация стабилизационных свойств неявных разностных методов повышенной точности решения начально-краевых задач типа диффузии

Численно решена задача однопараметрической минимизации константы устойчивости по критерию В. Б. Андреева для m-стадийных разностных методов повышенной точности решения начально-краевых задач для параболических уравнений 2-го порядка с самосопряженным эллиптическим оператором. Оптимизируемые методы реализованы по алгоритму полиномиального ускорения. Оптимизация методов выполнена с помощью уменьшения на единицу максимально возможного порядка аппроксимации операторной экспоненты.

Чисельно розв'язано задачу однопараметричної мінімізації константи стійкості по критерію В. Б. Андрєєва для m-стадійних різницевих методів підвищеної точності розв'язку початково-крайових задач для параболічних рівнянь другого порядку з самосполученим еліптичним оператором. Методи, що оптимізуються, реалізовано за алгоритмом поліноміального прискорення. Оптимізацію методів виконано за допомогою зменшення на одиницю максимально можливого порядку апроксимації операторної експоненти.

К л ю ч е в ы е с л о в а: начально-краевые задачи, параболические уравнения, разностные методы, повышенная точность, устойчивость.

Предварительные замечания. Начально-краевые задачи (НКЗ) для параболических уравнений 2-го порядка вида $u_t = L(u)$ — один из самых распространенных в приложениях классов задач математической физики [1], а разработка эффективных численных методов их решения является важной прикладной проблемой. Для ее решения в работе [2] предложен способ повышения эффективности разностных методов решения НКЗ, при использовании которого требуется сведение исходной задачи к линейной для уравнения $u_t = Lu$ с постоянным оператором $L : H \to H$, действующим в гильбертовом пространстве H функций $u = u(x, t)$ пространственной переменной $x \in \omega_x \subseteq R^3$ и времени $t \in \omega_t = [0, T]$. В результате получена возможность решения этих задач методами повышенной точности относительно шага дискретизации по времени.

Некоторые авторы трактуют указанный подход как метод прямых в упрощенной интерпретации. Например, в работе [3] R. Wait характеризует этот метод так: «Уравнение в частных производных … сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений простой заменой производных $\partial/\partial x_i$ по координатам конечно-разностными аналогами ... Основное преимущество превращения уравнения с частными производными в жесткую систему обыкновенных дифференциальных уравнений заключается в том, что для нее существуют хорошо разработанные алгоритмы. При этом оказывается возможным получить эффективный метод решения уравнений в частных производных …».

Алгоритм, приведенный в работе [2] и названный позже алгоритмом полиномиального ускорения (АПУ) [4] решения полудискретных разностных НКЗ, также может быть отнесен к методу прямых, но лишь в том смысле, что для повышения точности методов, реализуемых этим алгоритмом, так же как и в высокоточных методах решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ), используются высокоточные аппроксимации экспоненциальной функции $e^{-\eta}$, $\eta \geq 0$. В остальном методы, описанные в работе [2], принципиально отличаются от метода прямых в интерпретации авторов работы [3], ибо рассчитаны на решение задач иной природы: решения СОДУ являются элементами конечномерного пространства, а решения НКЗ – функциональных пространств.

Именно это обстоятельство эффективно использовано в приложениях метода экстраполяции по Ричардсону к прикладным задачам математической физики [5] и положено в основу методов, реализуемых АПУ. Отсюда следует, что в первом случае в силу теоремы эквивалентности достаточно установить сходимость метода в норме какого-либо одного пространства (например, в норме евклидового пространства E^n), а во втором — из сходимости в пространстве $\mathcal{B}_h^{(1)}$ никоим образом не следует сходимость в $\mathcal{B}_h^{(2)}$, если последнее не вложено в первое.

В частности, из сходимости сеточных решений в H_h не следует их сходимость в равномерной метрике [6]. Например из схем с весами ($0 \leq \leq \sigma \leq 1$) монотонна лишь схема с опережением ($\sigma = 1$) [7], а методы, описанные в [2], как и любые другие линейные методы повышенной точности, не могут быть монотонными в принципе [8]. В связи с этим очевидный практический интерес представляет задача оптимизации методов, приведенных в [2], с целью приблизить их стабилизационные свойства к упомянутому свойству схемы с опережением.

На данном этапе исследований решить эту задач исчерпывающим образом не представляется возможным ввиду ее сложности. Поэтому изложение ограничено формулировкой и численным решением задачи лишь однопраметрической оптимизации стабилизационных свойств методов в указанном выше смысле. Для этого использован критерий устойчивости [9], используемый применительно к методам из работы [2].

Устойчивость по В. Б. Андрееву [9]. Пусть решению подлежит НКЗ

$$\begin{gathered} u_t = u_{xx},\ x \in \omega_x = [0,1],\ t \in \omega_t = [0,T], \\ u(x,0) = u^0(x),\ u(0,t) = u(1,t) = 0 \end{gathered} \tag{1}$$

и для ее решения применяется устойчивый в $\boldsymbol{H}$ m-стадийный метод [2]:

$$u_h^{j+1} = r_m(\overline{\mathcal{A}}_h) u_h^j, \tag{2}$$

где u_h^j — сеточное решение задачи (1), определенное на сетке $\omega_h = \{x_i | x_i = ih, i = \overline{0,n};\ nh = 1\}$ в момент времени $t_j \in \omega_\tau = \{t_j | t_j = j\tau, j = \overline{0,N};\ N\tau = T\}$, $(u_h^j \sim u(x_i, t_j))$, $\overline{\mathcal{A}}_h = \tau\, \mathcal{A}_h$, $(\mathcal{A}_h u_h)_i = (u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) / h^2$.

Функция спектральной устойчивости [10] метода (2) имеет вид

$$r_m(\eta) = \sum_{s=1}^{m} a_s^{(m)} r_1^s(\overline{\eta}),\ \eta = \tau\lambda,\ \lambda \in \mathrm{Sp}(\mathcal{A}_h), \tag{3}$$

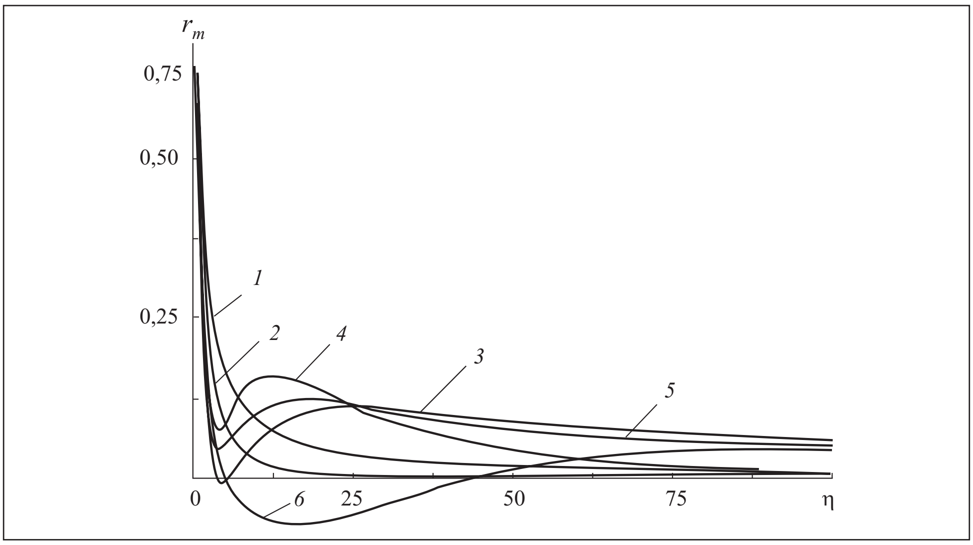
где $r_1(\overline{\eta}) = 1/(1+\overline{\eta})$ — символ неявного базового метода («схемы с опережением»), $\overline{\eta} = \alpha\eta \ge 0$; α — вещественный положительный параметр, определяемый, как и весовые коэффициенты $a_s^{(m)}$ $(s = \overline{1,m},\ m = 1, 2, \ldots)$, в соответствии с выбранным принципом аппроксимации экспоненциальной функции $e^{-\eta}$ $(\eta \le 0)$ — символа точного решения полудискретного аналога задачи (1).

В соответствии с критерием устойчивости [9] предположим, что функции $u = u(x,t)$ и $u^0(x)$ в (1) принадлежат пространствам соответственно $W_{x,t;2;*}^{2,1}(\omega_{xt})$, $\omega_{xt} = \omega_x \times \omega_t$ и $W_2^1(\omega_x)$. Тогда схема (2) объявляется устойчивой согласно [9] (M-устойчивой [11]), если ее решение удовлетворяет оценке

$$\left\| u_h^j \right\|_{2,1;*}^2 \le M^2 \left\| u_h^0 \right\|_1^2, \tag{4}$$

где нормы в левой и правой частях неравенства — сеточные аналоги норм соответственно в пространствах $W_{x,t;2;*}^{2,1}(\omega_{xt})$ и $W_2^1(\omega_x)$. Первая из них записывается в следующем виде [9]:

$$\left\| u_h \right\|_{2,1;*}^2 \equiv \sum_{t=\tau}^{T} \tau \left[\left\| u_h \right\|_2^2 + \left\| (u_h)_{\bar t} \right\|_0^2 + \tau \left\| (u_h)_{\bar t} \right\|_1^2 \right].$$



Графики символов $\hat{M}_1^{(m)}$-методов ($m=\overline{1,6}$)

Постоянную M из (4) с учетом принятых выше обозначений, можно вычислить по формуле

$$M^2 = \sup_{\eta\geq 0} F(\eta), \tag{5}$$

где

$$F(\eta) = \frac{(q\eta)^2 + (1+\eta)(1-q)^2}{(1-q^2)\eta}, \quad q = r_m(\eta).$$

Поскольку символ методов (2) и, следовательно, функция $F(\eta)$ зависят от параметра α, в этих методах при $m \geq 2$ можно выбрать такое значение параметра α, которое бы минимизировало постоянную M. В общем случае интервал отыскания оптимального в указанном смысле параметра α может быть ограничен положительными числами из интервала $(0, \overline{\alpha}]$, где $0 < \overline{\alpha} < \infty$. Однако для T-согласованности [12] методов (2) правую часть этого интервала следует ограничить величиной $\overline{\alpha} = 1/m$.

Таким образом, задача приближения стабилизационных свойств многостадийных методов (2) к свойствам схемы с опережением, для которой $M = 1$, может быть сформулирована в виде следующей задачи однопараметрической оптимизации ($\hat{M}_1$-оптимизации).

Для каждого m такого, что $2 \leq m \leq \overline{m} < \infty$, найти значение параметра α из интервала $0 < \alpha \leq 1/m$ и соответственно весов методов (2), символы которых аппроксимировали бы экспоненциальную функцию m-го порядка и удовлетворяли критерию устойчивости [9] при постоянной $M = M_1^{(m,*)}$ в (4) такой, что

$$[M_1^{(m,*)}]^2 = \min_{0<\alpha\le 1/m} \sup_{\eta\ge 0} F(\eta).$$

Для того чтобы символы в (3) аппроксимировали функцию $e^{-\eta}$, $\eta \ge 0$, при $\eta \to 0$ m-го порядка, параметры методов (2) должны удовлетворять системе аппроксимационных уравнений

$$\sum_{s=1}^{m} a_s^{(m)} \chi_{k,s}^{(m)} = \beta_m^k / k!, \quad k = \overline{0, m-1}, \quad \beta_m = 1/\alpha_m,$$

или в «полулинейной» векторно-матричной форме,

$$\mathcal{K}_m A_m = B_m, \qquad (6)$$

где $\mathcal{K}_m$ — квадратная матрица с элементами $\chi_{k,s}^{(m)} = \dfrac{(s+k-1)!}{(s-1)!k!}$; $B_m = \beta^k / k!$, $k = \overline{0, m-1}$, $s = \overline{1, m}$; $A_m = (a_1^{(m)}, a_2^{(m)}, a_3^{(m)}, ..., a_m^{(m)})^T$ — вектор весов методов (2).

Решение сформулированой задачи существует, поскольку функционал (5) ограничен снизу значением $M = 1$ [9] и система линейных алгебраических уравнений (6) при фиксированных значениях $\beta = \beta_m$ корректно разрешима, ибо строки и столбцы матрицы $\mathcal{K}_m$ линейно независимы (их элементы суть биномиальные коэффициенты).

Методы, полученные решением задачи $\hat{M}_1$-оптимизации, назовем $\hat{M}_1^{(m)}$-методами, или $\hat{M}_1$-методами, если указание числа стадий излишне.

Результаты численного решения задачи. Численные расчеты параметров $\hat{M}_1$-методов ограничены шестистадийными методами в связи с тем, что тестирование решением простейшей одномерной НКЗ вида (1) показало их невысокую эффективность при большем числе стадий.

Таблица 1

m	α_m	$\hat{M}_1^{(m,*)}$
1	1	1
2	0,5	1,026132
3	0,185036	1,127087
4	0,128032	1,080367
5	0,184277	1,090655
6	0,116500	1,155671

Таблица 2

m	s	$a_s^{(m,*)}$
1	1	1,0000000 (00)
2	1	0,0000000 (00)
	2	1,0000000 (00)
3	1	0,1390409 (01)
	2	–0,5185152 (01)
	3	0,4794743 (01)
4	1	0,9378645 (00)
	2	0,6061139 (01)
	3	–0,1513162 (02)
	4	0,1033753 (02)
5	1	0,9378645 (00)
	2	–0,1031203 (01)
	3	0,4942578 (01)
	4	0,8800697 (01)
	5	–0,2764780 (01)
6	1	0,1769099 (01)
	2	–0,1915633 (02)
	3	0,6581148 (02)
	4	–0,9985461 (02)
	5	0,6747279 (02)
	6	–0,1504243 (02)

В табл. 1 приведены оптимальные значения параметра α_m и соответствующие им значения постоянной $M = \hat{M}_1^{(m,*)}$ для указанных значений m, а в табл. 2 — веса $\hat{M}_1^{(1\div 6)}$-методов. На рисунке представлены графики символов этих методов, свидетельствующие о корректности как задачи $\hat{M}_1$-оптимизации, так и вычислительных процедур, использованных для ее численного решения.

Таким образом, из табл. 1 и 2 видно, что $\hat{M}_1^{(2)}$-метод представляет собой схему с опережением ($\hat{M}_1^{(1)}$-метод) с половинным шагом интегрирования, и если для $\hat{M}_1^{(1)}$-метода постоянная в условии M-устойчивости равна единице, то для $\hat{M}_1^{(2)}$-метода эта постоянная не намного, но все-таки больше единицы.

A numerical solution is presented for the problem of one-parameter minimization of the stability constant by V.B.Andreyev criterion for *m*-stage difference methods of high-accuracy solution of initial-boundary problems for the 2nd order parabolic equations with self-conjugated elliptic operator. The optimized methods are realized by the algorithm of polynomial acceleration. The methods optimization is performed at the expense of a decrease by one of the maximum possible approximation order of the operator exponent.

1. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. — М. : Наука, 1972. — 736 с.
2. *Шихалиев С. З.* О применении одного класса методов типа Розенброка к решению уравнения теплопроводности /Редкол. журн. Электрон. моделирование. — Киев, 1986. — 20 с. — Деп. ВИНИТИ № 6440-В86 03.09.86. — Реф. Электрон. моделирование. — 1987. — **9,** № 2.
3. *Современные* методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений/ Под ред. Дж. Холл и Дж. Уатт. Пер. с англ. под ред. А. Д. Горбунова. — М. : Мир, 1979. — 312 с.
4. *Шихалиев С. З.* Об использовании чебышевских однополюсных аппроксимаций экспоненты в методах решения начально-краевых задач диффузии. — Киев : Энергетика и электрификация, 2005. — 48 с.
5. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. — Новосибирск : Наука СО, 1973. — 352 с.
6. *Треногин В. А.* Функциональный анализ. — М. : Наука, 1980. — 496 с.
7. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. Учеб. пособие. — М. : Наука, 1977. — 656 с.
8. *Годунов С. К.* Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики// Мат. сборник. — 1959. Т. 47 (89), № 3. — С. 271—306.
9. *Андреев В. Б.* Об устойчивости по начальным данным разностных схем для параболических уравнений // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. — 1971. — **11**, № 6. — С. 1462— 1475.
10. *Артемьев С. С., Демидов Г. В. А*-устойчивый метод типа Розенброка четвертого порядка точности решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Некоторые вопросы вычислительной и прикладной математики. — Новосибирск, 1975. — С. 214 — 220.
11. *Шихалиев С. З.* Об устойчивости по В. Б. Андрееву методов произвольного порядка аппроксимации решения параболических уравнений /Редкол. журн. Электрон. моделирование. — Киев, 1988. — 25 с. — Деп. ВИНИТИ № 308-В88 14.01.88. — Реф. Электрон. моделирование. — 1988. — **10**, № 3.
12. *Штеттер Х.* Анализ методов дискретизации для обыкновенных дифференциальных уравнений / Пер. с англ. С.С. Артемьева, Г.В. Демидова, В. П. Ильина и Ю. И. Кузнецова под ред. Г. И. Марчука. — М. : Мир, 1978. — 463 с.

Поступила 13.02.09

ШИХАЛИЕВ Сабир Завурович, науч. сотр. ин-та проблем моделирования в энергетике им. Г. Е. Пухова НАН Украины. В 1967 г. окончил Киевский ин-т инженеров гражданской авиации. Область научных исследований — вычислительная физика.