Л. Г. Волков, Ю. Д. Кандиларов, О построении и реализации разностных схем для систем уравнений диффузии с локализованными химическими реакциями, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2000, том 40, номер 5, 740–753

ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2000, том 40, № 5, с. 740–753

УДК 519.633.8

О ПОСТРОЕНИИ И РЕАЛИЗАЦИИ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ С ЛОКАЛИЗОВАННЫМИ ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ[1)]

© 2000 г. Л. Г. Волков, Ю. Д. Кандиларов

(7017 Rousse, Studentska Str., 8, University of Rousse, Bulgaria)

Поступила в редакцию 08.04.99 г.

Построены разностные схемы второго порядка точности на равномерных сетках для систем уравнений диффузии с локализованными нелинейными химическими реакциями. При этом точка разрыва не должна быть узлом сетки. Предложен алгоритм исключения неизвестных, соответствующих линейным разностным уравнениям, существенно сокращающий объем вычислений во время итераций по нелинейности. Приведенные численные эксперименты показывают преимущество новых разностных схем перед традиционными и эффективность алгоритма.

1. ВВЕДЕНИЕ

Математические модели, описывающие каталитические реакции (см. [1] и цитированную там литературу), как правило, составляют системы нелинейных дифференциальных уравнений. Нелинейность задачи представляет основную трудность при их численном исследовании. В ряде случаев положение осложняется еще из-за нетрадиционных условий сопряжения, зачастую также нелинейных [2]–[4]. Система параболических уравнений, описывающих локализованные химические реакции совместно с процессами диффузии и абсорбции-десорбции, имеет вид [2], [3]

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \Omega U + R(U)\delta(x-\xi), \quad x \in (-1, 1), \quad 0 < t < T. \tag{1}$$

Здесь $U(x, t) = (u_1(x, t), \ldots, u_S(x, t))$ – вектор-решения, компоненты которого представляют собой концентрации S различных веществ, $D = \mathrm{diag}(D_1, \ldots, D_S)$ – матрица коэффициентов диффузии, $\Omega = (\omega_{ij})$, $i, j = 1, 2, \ldots, S$, – матрица десорбции, $R(U) = (R_1(U), \ldots, R_S(U))$ – вектор-функции, представляющие собой скорость реакции в активном месте ξ. Предположим, что D и Ω – постоянные матрицы. Чтобы определить решения системы (1) единственным образом, задаются начальные и граничные условия. Граничные условия не являются основным интересом этой работы, и поэтому будем уточнять их в ходе изложения, где это необходимо. Отметим, что если нелинейная реакция локализована на границе ($\xi = -1$ или $\xi = 1$), то приходим к системе параболических уравнений с нелинейными граничными условиями. Разностные схемы для таких задач исследованы в [5], [6].

Корректность начально-краевых задач для системы (1) в "малом" (существование и единственность локального по времени решения) можно установить на базе общей теории нелинейных параболических уравнений (см. [7]). Интересными как с точки зрения приложений в химической технологии, так и с теоретической точки зрения являются вопросы качественного поведения решений, когда $t \longrightarrow \infty$, существование и число периодических и стационарных решений, их устойчивость [1]. Таких результатов для рассматриваемых задач пока мало [8], [9]. Поэтому важное значение приобретает построение эффективных численных методов.

В настоящей работе проводится анализ и сопоставление численных реализаций нелинейных уравнений сопряжения, являющихся следствием присутствия дельта-функции в системе уравнений (1). Легко показать, что система уравнений (1) эквивалентна следующим двум:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \Omega U, \quad x \in (-1, 1), \quad x \neq \xi, \quad 0 < t < T, \tag{2}$$

[1)]Работа выполнена при поддержке Национального фонда Болгарии "Научные исследования" (код проекта ММ-524/95).

$$[U]_\xi \equiv U(\xi+0,t)-U(\xi-0,t) = 0, \quad D[\partial U/\partial x]_\xi = -R(U(\xi,t)), \quad 0 \le t \le T. \tag{3}$$

Подчеркнем, что начальная функция

$$U(x,0) = \Phi(x) \equiv (\varphi_1(x), \ldots, \varphi_S(x)), \quad -1 \le x \le 1,$$

должна удовлетворять условиям (3).

Это – параболическая задача, и ее решение частично гладкое. Разрывы решения могут появиться только на линии разрыва $x = \xi$, $t > 0$. Решения $U_l(x, t)$ и $U_r(x, t)$ с левой и правой стороны линии разрыва, соответственно, связаны условиями сопряжения (3) типа "собственного источника" (см. [10]). Известно [11]–[13], что при классических разностных схемах второй порядок аппроксимации достигается, если точка разрыва есть узел. В последнее время для ряда задач с сопряжением построены на равномерной сетке разностные схемы второго порядка аппроксимации, когда точка разрыва не должна быть узлом сетки [14]–[16]. Метод базируется на умелом использовании условий сопряжения при разложении в ряд Тейлора и на сглаживании дельта-функции. Идея сглаживания впервые была предложена в [17] при решении задачи Стефана.

В работах [14]–[16] рассматривались задачи с сопряжениями типа "внешнего источника" $[u] = \varphi(t)$, $[w] = \psi(t)$, где u и w – решение и поток соответственно, а $\varphi(t)$ и $\psi(t)$ – известные функции. Построенные там разностные схемы остаются трехточечными. Оказывается, что условие сопряжения (3) нетрадиционно и при построении разностных схем второго порядка шаблон расширяется – в одномерном случае становится четырехточечным возле точки разрыва, см. [18] и разд. 2 настоящей работы. Несмотря на это, схемы допускают простую реализацию (разд. 3, 4).

В разд. 2 на равномерной сетке построены разностные схемы второго порядка точности для систем уравнений (1)–(3). Полученные разностные схемы на каждом слое по времени представляют собой линейно-нелинейные системы алгебраических уравнений. В разд. 3 предложен алгоритм расщепления этих систем на линейной (большой) и нелинейной (малой) частях. В разд. 4 обсуждаются методы реализации разностных схем и анализируются результаты расчетов. Вычислительные эксперименты подтверждают точность разностных схем и эффективность алгоритмов.

2. ПОСТРОЕНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

На отрезке [0, 1] введем равномерную сетку $\bar\omega_h = \{x_i = ih, i = 0, 1, \ldots, N, h = 1/N\}$, а по переменной t – сетку $\omega_\tau = \{t_j = j\tau, j = 0, 1, \ldots, M, \tau = T/M\}$. На сетке $\omega_h \times \omega_\tau$ будем использовать стандартные обозначения [11]

$$f_{\bar x} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h}, \quad f_x = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}, \quad f_{\bar x x} = (f_x)_{\bar x},$$

$$\hat f = f(x_i, t_{j+1}), \quad f^{(\sigma)} = \sigma \hat f + (1-\sigma) f, \quad 0 \le \sigma \le 1.$$

Пусть $w(t)$ – вектор с компонентами $w_i = w(x_i, t)$, $i = 0, 1, \ldots, N$, и w^j, $j = 0, 1, \ldots, M$, – векторы с компонентами $w_i^j = (x_i, t_j)$, $i = 0, 1, \ldots, N$. Для аппроксимации $w(t)$ используем вектор $z(t) = (z_0(t), \ldots$ $\ldots, z_N(t))^{\mathrm{T}}$, для w^j – векторы $z^j = (z_0^j, \ldots, z_N^j)$. Далее w – одна из функций u_s, $s = 1, 2, \ldots, S$.

1. Разностные схемы первого порядка точности

При заданном h обозначим через $I = I(h)$, $1 \le I \le N-1$, наименьший номер, для которого $|\xi - x_I| \le$ $\le 0.5h$. Применяя интегроинтерполяционный метод, легко получить схемы с весами для задачи (1), (2) в случае краевых условий Дирихле (для простоты – нулевых):

$$y_{kt} = D_k y_{k,\bar x x}^{(\sigma_n)} - \sum_{s=1}^{S} \omega_{ks} y_s^{(\sigma_k^s)}, \quad x = x_i, \quad i = 1, 2, \ldots, I-1, I+1, \ldots, N-1, \quad k = 1, 2, \ldots, S, \tag{4}$$

$$y_{kt} = D_k y_{k,\bar x x}^{(\sigma_n)} - \sum_{s=1}^{S} \omega_{ks} y_s^{(\sigma_k^s)} + \frac{1}{h} R_k(y_1^{(\sigma_{k1})}, \ldots, y_S^{(\sigma_{kS})}), \quad x = x_I, \quad k = 1, 2, \ldots, S, \tag{5}$$

$$\hat{y}_{k,0} = 0, \quad \hat{y}_{k,N} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, S, \tag{6}$$

$$\overset{0}{y}_{ki} = \varphi_k(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \quad k = 1, 2, \dots, S, \tag{7}$$

где $0 \le \sigma_k, \sigma_k^s, \sigma_{ks} \le 1$ ($k, s = 1, 2, \dots, S$) – веса. В общем случае $x_I \ne \xi$ и порядок аппроксимации $O(h)$, а в частном случае $x_I = \xi$ порядок есть $O(h^2)$. В случае одного уравнения, $S = 1$, реализация и устойчивость разностных схем (4)–(7) обсуждалась в [19].

2. *Разностные схемы второго порядка точности*

Пусть $I = I(h)$, $1 \le I \le N-1$, – такой номер, что $x_I \le \xi < x_{I+1}$. Порядок аппроксимации разностных схем существенно зависит от гладкости решений дифференциальной задачи [11]. Функции $u_k(x, t)$, $k = 1, 2, \dots, S$, везде гладкие, кроме точки ξ, где одна или более их производных терпят разрывы I рода из-за наличия дельта-функции в соответствующем уравнении системы (1). Поэтому вопрос состоит в аппроксимации

$$\frac{\partial^2 u_k(x_I)}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u_k(x_{I+1})}{\partial x^2}, \quad k = 1, 2, \dots, S,$$

со вторым порядком точности. Используя разложение в ряд Тейлора, легко получить для $i = I, I+1$

$$\frac{\partial^2 w(x_i, t)}{\partial x^2} = w_{\bar{x}x}(x_i, t) - \frac{\operatorname{sgn}(\xi - x_i)}{h^2}\sum_{m=1}^{3}\frac{1}{m!}[h^2\operatorname{sgn}(\xi - x_i)d_h^{(1)}(x_i - \xi)]^m[w_x^m]_\xi + O(h^2), \tag{8}$$

где

$$[w_x^m] = \partial_x^m u^+ - \partial_x^m u^-, \quad \partial_x^m u^{\pm} = \lim_{x \to \xi \pm 0}\frac{\partial^m}{\partial x^m}u(x, t)$$

для произвольной функции $w \in C[-1, 1] \cap C^3([-1, 1]\backslash\xi)$, а в нашем случае w – любая из функций $u_1, \dots, u_S$. Здесь $d_h^{(1)}$ – хорошо известная аппроксимация дельта-функции порядка $O(h)$ (см. [15])

$$d_h^{(1)}(x) = \begin{cases}(h - |x|)/h^2, & |x| \le h,\\ 0 - \text{иначе}.\end{cases}$$

Из (8) видно, что решение $u_k(x, t)$, $k = 1, 2, \dots, S$, должно иметь непрерывные производные до третьего порядка вплоть до внутренней границы (интерфейса) $\Gamma_T = \{x = \xi, 0 \le t \le T\}$. Для этого необходимо потребовать от начальных условий (3) и свободного члена R некоторые условия согласования [7], получающиеся из (2), (3). Именно, для того чтобы решение было непрерывным вплоть до границы интерфейс Γ_T, необходимо потребовать

$$[\varphi_k]_\xi = \varphi_k(\xi + 0) - \varphi_k(\xi - 0) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, S.$$

Эти равенства называются условиями согласования порядка 0.

Дифференцируя левые равенства (3) по t, получаем

$$[\partial u_k/\partial t]_\xi = 0, \quad k = 1, 2, \dots, S. \tag{9}$$

Теперь из (9) и из уравнений (2) следует, что

$$[\partial_x^2 u_k]_\xi = 0 \tag{10}$$

и, соответственно,

$$[\varphi_k'']_\xi = 0, \quad k = 1, 2, \dots, S. \tag{11}$$

Также из вторых равенств (3) следует

$$D_k[\varphi_k']_\xi = -R_k(\Phi(\xi)), \quad k = 1, 2, \dots, S. \tag{12}$$

Условия (11), (12) – условия согласования порядка 1.

Дифференцируя каждое из уравнений (2) по x, получаем

$$[\partial^2_{tx}u_k]_\xi = D_k[\partial^3_x u_k]_\xi - \sum_{r=1}^{S}\omega_{kr}[\partial^1_x u_r]_\xi, \quad k = 1, 2, \ldots, S. \tag{13}$$

Теперь, дифференцируя по t вторые равенства (3), находим выражения для $[\partial^2_{tx}u_k]_\xi$, $k = 1, 2, \ldots, S$, которые подставляем в (13):

$$[\partial^3_x u_k]_\xi = \left(-\frac{1}{D_k^2}\sum_{r=1}^{S}(R_k(U(x,t)))'_{u_r}\frac{\partial u_r(x,t)}{\partial t}' - \frac{1}{D_k}\sum_{r=1}^{S}\omega_{kr}\frac{R_r(U(x,t))}{D_r}\right)_{x=\xi}. \tag{14}$$

Из (2), (9), (14) для $k = 1, 2, \ldots, S$ получаем условия согласования порядка 2:

$$[\varphi''_k]_\xi = \left(-\frac{1}{D_k^2}\sum_{r=1}^{S}(R_k(\Phi(x)))'_{u_r}\left(D_r\varphi''_r(x) - \sum_{l=1}^{S}\omega_{rl}\varphi_l(x)\right) - \frac{1}{D_k}\sum_{r=1}^{S}\omega_{kr}\frac{R_r(\Phi(x))}{D_r}\right)_{x=\xi}.$$

Подставляя найденные таким образом выражения (3), (10), (14) для $[\partial^m_x u_k]_\xi$ ($m = 1, 2, 3$ соответственно) в (8), получаем требуемую аппроксимацию второго порядка точности. Теперь систему уравнений (2), (3) можно аппроксимировать следующим образом:

$$\frac{\partial u_k(x_i,t)}{\partial t} = D_k u_{k,\bar{x}x}(x_i,t) - \sum_{r=1}^{S}\omega_{kr}u_r(x_i,t) + O(h^2), \quad k = 1, 2, \ldots, S, \; i = 1, 2, \ldots, I-1, I+2, \ldots, N-1,$$

$$\frac{\partial u_k(x_I,t)}{\partial t} = D_k u_{k,\bar{x}x}(x_I,t) + \frac{x_{I+1}-\xi}{h^2}R_k(U(\xi,t)) + \frac{(x_{I+1}-\xi)^3}{6h^2}\tilde{R}_k(\xi,t) - \sum_{r=1}^{S}\omega_{kr}u_r(x_I,t) + O(h^2),$$

$$\frac{\partial u_k(x_{I+1},t)}{\partial t} = D_k u_{k,\bar{x}x}(x_{I+1},t) - \frac{x_I-\xi}{h^2}R_k(U(\xi,t)) - \frac{(x_I-\xi)^3}{6h^2}\tilde{R}_k(\xi,t) - \sum_{r=1}^{S}\omega_{kr}u_r(x_{I+1},t) + O(h^2),$$

где

$$\tilde{R}_k(\xi,t) = \frac{1}{D_k}\sum_{r=1}^{S}\left((R_k)'_{u_r}\frac{\partial u_r}{\partial t} + \omega_{kr}\frac{R_r}{D_r}\right)_{x=\xi}.$$

В общем случае ξ не является узлом сетки и поэтому надо интерполировать $U(\xi, t)$, $\partial u_r/\partial t(\xi, t)$. Чтобы сохранить порядок $O(h^2)$, используем формулу из [14]:

$$f(\xi) = h\sum_j f(x_j)d_h^{(4)}(x_j-\xi) + O(h^2). \tag{15}$$

Здесь f – произвольная непрерывная функция, $f \in C^1([\xi - kh, \xi) \cup (\xi, \xi + kh])$, k – целое, f – липшиц-непрерывная функция на каждом полуинтервале и

$$d_h^{(4)}(x) = \frac{1}{h}\begin{cases}1-(x/h)^2, & |x| \le h,\\ 2-|3x/h|, & h \le |x| \le 2h,\\ 0 & \text{– иначе.}\end{cases}$$

Для функций R_k и $(R_k)'_{u_r}$, которые вычисляются в $x = \xi$, используем аппроксимацию второго порядка:

$$W(U(\xi, t)) = W\left(h\sum_j U(x_j, t)d_h^{(4)}(x_j - \xi) + O(h^2)\right) = \sum_j hW(U(x_j, t))d_h^{(4)}(x_j - \xi) + O(h^2) \approx$$

$$\approx a[W(U(x_{I-1}, t)) + W(U(x_{I+2}, t))] + bW(U(x_I, t)) + cW(U(x_{I+1}, t)) \equiv \overline{W},$$

где

$$a = -\rho_I\rho_{I+1}, \quad b = 1 - \rho_I^2, \quad c = 1 - \rho_{I+1}^2, \quad \rho_I = \frac{\xi - x_I}{h}, \quad \rho_{I+1} = \frac{x_{I+1} - \xi}{h}.$$

Опуская слагаемые $O(h^2)$, приходим к системе полудискретных разностных уравнений:

$$\dot{Y}_i = DY_{\bar{x}x, i} - \Omega Y_i + F_i, \quad i = 1, 2, \ldots, I-1, I+2, \ldots, N-1, \tag{16}$$

$$-da\overline{R}'\dot{Y}_{I-1} + (E - db\overline{R}')\dot{Y}_I - dc\overline{R}'\dot{Y}_{I+1} - da\overline{R}'\dot{Y}_{I+2} = DY_{\bar{x}x, I} - \Omega Y_I + F_I, \tag{17}$$

$$-fa\overline{R}'\dot{Y}_{I-1} - fb\overline{R}'\dot{Y}_I + (E - fc\overline{R}')\dot{Y}_{I+1} - fa\overline{R}'\dot{Y}_{I+2} = DY_{\bar{x}x, I+1} - \Omega Y_{I+1} + F_{I+1},$$

где

$$\bullet \equiv \frac{d}{dt}, \quad d = \frac{1}{6}\rho_{I+1}^3 h, \quad e = \rho_{I+1}/h, \quad f = \frac{1}{6}\rho_I^3 h, \quad g = \rho_I/h,$$

$$Y_i = \begin{pmatrix} y_{1,i} \\ \ldots \\ y_{S,i} \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \quad \overline{R}' = \begin{pmatrix} (R_1)'_{u_1}/D_1 \ldots (R_1)'_{u_S}/D_1 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ (R_S)'_{u_1}/D_S \ldots (R_S)'_{u_S}/D_S \end{pmatrix},$$

$$F_I = \begin{pmatrix} e\overline{R}_1 + d\Sigma_{r=1}^S \omega_{1r}\overline{R}_r/D_r \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ e\overline{R}_S + d\Sigma_{r=1}^S \omega_{Sr}\overline{R}_r/D_r \end{pmatrix}, \quad F_{I+1} = \begin{pmatrix} g\overline{R}_1 + f\Sigma_{r=1}^S \omega_{1r}\overline{R}_r/D_r \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ g\overline{R}_S + f\Sigma_{r=1}^S \omega_{Sr}\overline{R}_r/D_r \end{pmatrix}.$$

Подставляя $\dot{Y}_{I-1}$, $\dot{Y}_{I+2}$ из (16) в (17), получаем уравнение в матрично-блочном виде:

$$A(Y)\dot{Y} = \tilde{D}(Y)Y_{\bar{x}x} - \tilde{\Omega}(Y)Y + \tilde{F}(Y), \tag{18}$$

где

$$A(Y) = \begin{pmatrix} E & & & \\ & \ddots & & \\ & E - db\overline{R}' & -dc\overline{R}' & \\ & -fb\overline{R}' & E - fc\overline{R}' & \\ & & \ddots & \\ & & & E \end{pmatrix}, \quad \tilde{\Omega}(Y) = \begin{pmatrix} \Omega & & & & \\ & \ddots & & & \\ -da\overline{R}'\Omega & \Omega & 0 & -da\overline{R}'\Omega & \\ -fa\overline{R}'\Omega & 0 & \Omega & -fa\overline{R}'\Omega & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \Omega \end{pmatrix},$$

$$\tilde{D}(Y) = \begin{pmatrix} D & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & da\bar{R}'D & D & 0 & da\bar{R}'D & \\ & fa\bar{R}'D & 0 & D & fa\bar{R}'D & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & D \end{pmatrix}, \quad \tilde{F}(Y) = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ F_I \\ F_{I+1} \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \dots \\ Y_{N-1} \end{pmatrix}.$$

На заключительном этапе построения разностной схемы нужно осуществить дискретизацию по времени в (17). Производную по времени $\dot{Y}$ следует заменить разностным выражением, а Y и $Y_{\bar{x}x}$ “разнести” с некоторыми весами на два соседних временны́х слоя сетки.

Теорема 1. *Пусть начальная функция* $\Phi(x)$ *и правая часть* $R(U)$ *из* (3) *удовлетворяют условиям согласования порядка* 0, 1, 2. *Тогда*

$$U(x_i, t) = U_i(t) + O(h^2), \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \tag{19}$$

Кроме того, пусть якобиева матрица $R'(U)$ *ограничена в некоторой матричной норме на решении задачи* (2), (3) *константой* M. *Тогда если шаг по пространству удовлетворяет условию* $h < 64/M$, *то существует обратная к* A *матрица* A^{-1}.

Доказательство. Оценка (19) следует из построения в п. 2.

Матрица A^{-1} существует, если существует A_0^{-1}, где A_0 – блочная матрица:

$$A_0 = \begin{pmatrix} E - db\bar{R}' & -dc\bar{R}' \\ -fb\bar{R}' & E - fc\bar{R}' \end{pmatrix}.$$

Однако для существования A_0^{-1} достаточно обратимости одной из матриц $P = E - db\bar{R}'$ или $Q = E - fc\bar{R}'$. Матрица P^{-1} существует (см. [20]), если $\|P\| \le q < 1$, а для этого достаточно выполнения условия $db\|\bar{R}'\| < 1$. Для Q^{-1} достаточно $fc\|\bar{R}'\| < 1$.

Используя выражения для коэффициентов b, c, d, f, получаем для произведений db и cf, что всегда одно из них меньше или равно $h/64$. Это заканчивает доказательство теоремы.

3. АЛГОРИТМ РАСЩЕПЛЕНИЯ ЛИНЕЙНО-НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ

Как видно из (4)–(7) (и (16), (17) соответственно), построенные на каждом слое по времени разностные системы уравнений содержат большу́ю линейную часть (4) и небольшую нелинейную часть (5). Предложим алгоритм, который выделяет нелинейные уравнения в самостоятельную систему алгебраических уравнений. После нахождения соответствующих неизвестных итерационным методом [20], [21] вычисляются остальные компоненты разностного решения.

1. Построение алгоритма

Представим алгоритм в случае разностных схем первого порядка точности (4)–(7). Для упрощения выкладок рассмотрим чисто неявную разностную схему с $\sigma_k = \sigma_k^s = \sigma_{ks} \equiv 1$, $k, s = 1, 2, \dots, S$. Запишем разностные уравнения для каждого $k = 1, 2, \dots, S$ в виде

$$a_i^k \hat{y}_{k,i-1} + b_i^k \hat{y}_{ki} + c_i^k \hat{y}_{k,i+1} + \sum_{s=1}^{S} d_i^{ks} \hat{y}_{si} = e_i^k, \quad i = 1, 2, \dots, I-1, I+1, \dots, N-1, \tag{20}$$

$$y_{k0} = y_{kN} = 0, \tag{21}$$

$$\hat{y}_{kI} = \rho_k \hat{y}_{k,I+1} - 2\rho_k \hat{y}_{kI} + \rho_k \hat{y}_{k,I-1} - \tau \sum_{s=1}^{S} \omega_{ks} \hat{y}_{sI} + \frac{\tau}{h} R_k(\hat{y}_{1I}, \dots, \hat{y}_{SI}) + y_{kI}, \tag{22}$$

где $a_i^k = -\rho_k$, $b_i^k = 1 + 2\rho_k$, $c_i^k = a_i^k$, $d_i^{ks} = \tau\omega_{ks}$, $e_i^k = y_{ki}$, $\rho_k = D_k\rho = D_k\tau/h^2$.

Для исключения неизвестных y_{ki}, $i = 1, 2, \ldots, I-1, I+1, \ldots, N-1$, $k = 1, 2, \ldots, S$, применим следующий метод встречных прогонок [20], [22]. Допустим, что $\hat{y}_{kI}$, $k = 1, 2, \ldots, S$, известны. При проходе направо будем искать $\hat{y}_{ki}$ в виде

$$\hat{y}_{ki} = \sum_{r=1}^{S} \alpha_i^{kr}\hat{y}_{r,i+1} + \beta_i^k, \quad k = 1, 2, \ldots, S, \quad i = I-1, \ldots, 2, 1, \tag{23}$$

где α_i^{kr} и β_i^k – неизвестные коэффициенты. Из условий (21) и (23) следует, что

$$\alpha_0^{kr} = \beta_0^k = 0, \quad k, r = 1, 2, \ldots, S. \tag{24}$$

Пусть $1 \le i \le I-1$. Введем вспомогательные параметры p_i^{kr}, $k, r = 1, 2, \ldots, S$. При $i := i-1$ умножим первое из равенств (23) (для $k = 1$) на a_i^1, а при $i := i$ умножим каждое из них ($k = 1, 2, \ldots, S$) на p_i^{1r}, $r = k$. Суммируя полученные равенства, находим

$$a_i^1\hat{y}_{1,i-1} + \sum_{r=1}^{S}(p_i^{1r} - a_i^1\alpha_{i-1}^{1r})\hat{y}_{ri} - \sum_{s=1}^{S}\left(\sum_{r=1}^{S} p_i^{1r}\alpha_i^{rs}\right)\hat{y}_{s,i+1} = a_i^1\beta_{i-1}^1 + \sum_{s=1}^{S} p_i^{1s}\beta_i^s.$$

Таким же образом получаются равенства

$$a_i^k\hat{y}_{k,i-1} + \sum_{r=1}^{S}(p_i^{kr} - a_i^k\alpha_{i-1}^{kr})\hat{y}_{ri} - \sum_{s=1}^{S}\left(\sum_{r=1}^{S} p_i^{kr}\alpha_i^{rs}\right)\hat{y}_{s,i+1} = a_i^k\beta_{i-1}^k + \sum_{s=1}^{S} p_i^{kr}\beta_i^r \tag{25}$$

для каждого $k = 1, 2, \ldots, S$.

Сравнивая соответствующие коэффициенты при неизвестных в (20) и (25), получаем при k, $r = 1, 2, \ldots, S$ следующие зависимости:

$$p_i^{kr} = a_i^r\alpha_{i-1}^{kr} + \begin{cases} d_i^{kr} + b_i^r, & \text{если } k = r, \\ d_i^{kr} & \text{– иначе,} \end{cases} \tag{26}$$

$$\sum_{r=1}^{S} p_i^{kr}\alpha_i^{rs} = \begin{cases} -c_i^s, & \text{если } k = s, \\ 0, & \text{если } k \ne s, \end{cases} \tag{27}$$

$$\sum_{r=1}^{S} p_i^{kr}\beta_i^r = -a_i^k\beta_{i-1}^k + e_i^k. \tag{28}$$

Для вычисления прогоночных коэффициентов α_i^{kr}, β_i^k получаем следующий рабочий алгоритм.

(i) По формулам (26), учитывая (24), вычисляем вспомогательные параметры p_i^{kr}, k, $r = 1$, $2, \ldots, S$, $i = 1, 2, \ldots, I-1$.

(ii) Для определения коэффициентов α_i^{kr} при фиксированном $i = 1, 2, \ldots, I-1$ решаем S систем линейных уравнений с одинаковой главной частью (27):

$$P_i = (p_i^{kr})_{kr = \overline{1, S}}.$$

(iii) При фиксированном $i = 1, 2, \ldots, I-1$ из (28) при такой же главной части P_i определяем коэффициенты β_i^k, $k = 1, 2, \ldots, S$.

При проходе налево будем искать решения в виде

$$\hat{y}_{k,\,i+1} = \sum_{r=1}^{S} \xi_{i+1}^{kr}\hat{y}_{ki} + \eta_{i+1}^{k}, \quad i = I, \ldots, N-1, \tag{29}$$

$$\xi_N^{kr} = 0, \quad \eta_N^k = 0.$$

Так же как и при движении направо, получается алгоритм для нахождения ξ_i^{kr}, η_i^k, $i = I+1, \ldots$ $\ldots, N-1$, $k, r = 1, 2, \ldots, S$.

(iv) Для $i = N-1, \ldots, I+1$ вычисляем вспомогательные параметры

$$q_i^{kr} = c_i^k\xi_{i+1}^{kr} + \begin{cases} d_i^{kr} + b_i^r, & k = r, \\ d_i^{kr}, & k \neq r, \quad k, r = 1, 2, \ldots, S. \end{cases}$$

(v) При фиксированном $i = I+1, \ldots, N-1$ и при одинаковой главной части $Q_i = (q_i^{kr})_{kr = \overline{1,S}}$ решаем S систем линейных уравнений для определения ξ_i^{kr}, $k, r = 1, 2, \ldots, S$.

(vi) При фиксированном $i = I+1, \ldots, N-1$ и при такой же главной части Q_i определяем коэффициенты η_i^k, $k = 1, 2, \ldots, S$.

Теперь ясно, что если $\hat{y}_{kI}$ найдено каким-то итерационным методом, то y_{ki}, $i = 1, 2, \ldots, I-1$, вычисляются по формулам (23), а $\hat{y}_{ki}$, $i = I+1, \ldots, N-1$, – по формулам (29).

Дальше построенный выше алгоритм будем называть алгоритмом скалярно-встречной прогонки (АСВП).

2. *Устойчивость и корректность алгоритма*

АСВП ориентирован на решение систем с большим числом неизвестных (N, S большие). По своей сущности он эквивалентен встречной матричной прогонке [20], что упрощает исследование условий его применимости (корректность, устойчивость и др.). Однако полученный алгоритм более точно учитывает конкретную структуру рассматриваемых систем и поэтому имеет более простую реализацию, требует меньшего числа операций и, следовательно, более эффективен.

Для простоты рассмотрим вопрос о достаточных условиях применимости построенного алгоритма в случае систем из двух уравнений, $S = 2$. Запишем систему (20), (21) в виде

$$A_iY_{i-1} + B_iY_i + C_iY_{i+1} = F_i, \quad Y_0 = Y_N = 0, \tag{30}$$

где

$$A_i = \begin{pmatrix} a_i^1 & 0 \\ 0 & a_i^2 \end{pmatrix}, \quad B_i = \begin{pmatrix} b_i^1 & d_i^1 \\ d_i^2 & b_i^2 \end{pmatrix}, \quad C_i = \begin{pmatrix} c_i^1 & 0 \\ 0 & c_i^2 \end{pmatrix}, \quad F_i = \begin{pmatrix} e_i^1 \\ e_i^2 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \quad i \neq I, I+1.$$

Соответствующие формулы метода матричной прогонки для системы (30) имеют вид

$$\begin{gathered} y_i = \lambda_i y_{i+1} + \mu_i, \quad i = I-1, \ldots, 1, \\ \lambda_i = -(B_i + A_i\lambda_{i-1})^{-1}C_i, \quad i = 1, 2, \ldots, I-1, \quad \lambda_0 = 0, \\ \mu_i = -(B_i + A_i\lambda_{i-1})^{-1}(F_i - A_i\mu_{i-1}), \quad i = 1, 2, \ldots, I-1, \quad \mu_0 = F_0, \\ y_{i+1} = \rho_{i+1}y_i + \nu_{i+1}, \quad i = I+1, \ldots, N-2, \\ \rho_i = -(B_i + C_i\rho_{i+1})^{-1}A_i, \quad i = N-1, \ldots, I+1, \quad \rho_N = 0, \\ \nu_i = (B_i + C_i\rho_{i+1})^{-1}(F_i - C_i\nu_{i+1}), \quad i = N-1, \ldots, I+1, \quad \nu_N = F_N, \end{gathered} \tag{31}$$

где

$$\lambda_i = \begin{pmatrix} \alpha_i^{11} & \alpha_i^{12} \\ \alpha_i^{21} & \alpha_i^{22} \end{pmatrix}, \quad \mu_i = \begin{pmatrix} \beta_i^1 \\ \beta_i^2 \end{pmatrix}, \quad \rho_i = \begin{pmatrix} \zeta_i^{11} & \zeta_i^{12} \\ \zeta_i^{21} & \zeta_i^{22} \end{pmatrix}, \quad \nu_i = \begin{pmatrix} \eta_i^1 \\ \eta_i^2 \end{pmatrix}, \quad y_i = \begin{pmatrix} y_i^1 \\ y_i^2 \end{pmatrix}.$$

Алгоритм (31) называется корректным, если матрицы B_1, $B_i + A_i\lambda_{i-1}$, $i = 2, 3, \ldots, I-1$, и B_N, $B_i + C_i\rho_{i+1}$, $i = N-1, \ldots, I+1$, невырожденные, и устойчивым, если выполнены неравенства $\|\lambda_i\| < 1$, $i = 1, 2, \ldots, I-1$, $\|\rho_i\| < 1$, $i = N-1, \ldots, I+1$.

Проведем исследование корректности и устойчивости только для правой части алгоритма (i)–(iii)

Известно [20], что если матрицы B_i, $i = 1, 2, \ldots, N$, $i \neq I$, невырожденные, а матрицы A_i, C_i, $i = 1, 2, \ldots, N-1$, ненулевые и для произвольной матричной нормы $\|\cdot\|$ выполняются условия

$$\|B_i^{-1}A_i\| + \|B_i^{-1}C_i\| \le 1, \quad i = 1, 2, \ldots, N, \quad i \neq I, \tag{32}$$

причем хотя бы для одного номера i имеет место строгое неравенство, то алгоритм матричной прогонки (31) устойчив и корректен.

АСВП назовем корректным, если для всех i числа $\det(P_i)$ и $\det(Q_i)$ отличны от нуля, и устойчивым, если выполняются неравенства

$$\left|\det(\alpha_i^{kr})_{kr = \overline{1, S}}\right| < 1, \quad i = 1, 2, \ldots, I-1,$$
$$\left|\det(\zeta_i^{kr})_{kr = \overline{1, S}}\right| < 1, \quad i = I+1, \ldots, N-1.$$

Имеет место следующая

Теорема 2. *Пусть выполнены условия* (32). *Тогда АСВП корректен и устойчив.*

Доказательство. Из (31) имеем $\|\lambda_0\| = 0 < 1$. Предположим, что $\|\lambda_{i-1}\| < 1$, $i \ge 1$. Тогда из условия (32) получаем оценку

$$\|B_i^{-1}A_i\lambda_{i-1}\| \le \|B_i^{-1}A_i\|\|\lambda_{i-1}\| \le \|B_i^{-1}A_i\| \le 1 - \|B_i^{-1}C_i\| < 1.$$

Следовательно, существует обратная матрица к $(E + B_i^{-1}A_i\lambda_{i-1})$ (см. [20]), а в силу невырожденности B_i, существует и обратная к $B_i + A_i\lambda_{i-1}$. При этом

$$\|(E + B_i^{-1}A_i\lambda_{i-1})^{-1}\| \le 1/\|B_i^{-1}C_i\|.$$

Из существования обратной к $B_i + A_i\lambda_{i-1}$ матрицы следует, что ее определитель отличен от нуля. Отсюда с помощью формул (26) находим

$$\det(B_i + A_i\lambda_{i-1}) = \left(\begin{pmatrix} b_i^1 & d_i^1 \\ d_i^2 & b_i^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_i^1 & 0 \\ 0 & a_i^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_{i-1}^{11} & \alpha_{i-1}^{12} \\ \alpha_{i-1}^{21} & \alpha_{i-1}^{22} \end{pmatrix}\right) =$$

$$= \begin{pmatrix} b_i^1 + a_i^1\alpha_{i-1}^{11} & d_i^1 + a_i^1\alpha_{i-1}^{12} \\ d_i^2 + a_i^2\alpha_{i-1}^{21} & b_i^2 + a_i^2\alpha_{i-1}^{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_i^{11} & p_i^{12} \\ p_i^{21} & p_i^{22} \end{pmatrix} = \det(P_i) \neq 0.$$

Кроме того, из формул (31) видим, что $(B_i + A_i\lambda_{i-1})\lambda_i = C_i$, откуда $\lambda_i = -(E + B_i^{-1}A_i\lambda_{i-1})^{-1}B_i^{-1}C_i$. Теперь $\|\lambda_i\| \le 1$. Методом индукции приходим к утверждению теоремы.

Применим АСВП к решению систем (20)–(22) (или (31)). При этом рассмотрим стационарные системы диффузии ($\partial U/\partial t = 0$), так как при дискретизации нестационарных задач запас устойчивости всегда больше.

Тогда разностные уравнения (18) принимают вид

$$\tilde{D}Y_{\bar{x}x} - \tilde{\Omega}Y + \tilde{F}(Y) = 0, \tag{33}$$

где $\tilde{D} = \operatorname{diag}(D, \ldots, D)$, $\tilde{\Omega} = \operatorname{diag}(\Omega, \ldots, \Omega)$, а $\tilde{F}$ сохраняется.

Следствие. Для устойчивости и корректности АСВП в применении к решению системы (33) достаточно, чтобы параметр $y = h^{-2}$ удовлетворял неравенствам

$$4(4\overline{\omega}_{11}\overline{\omega}_{22} - (\overline{\omega}_{12} + \overline{\omega}_{21})^2)y^2 + 4\Delta(\overline{\omega}_{11} + \overline{\omega}_{22})y + \Delta^2 > 0, \tag{34}$$

$$8(\overline{\omega}_{11} + \overline{\omega}_{22})y^3 + 2((\overline{\omega}_{11} + \overline{\omega}_{22})^2 - (\overline{\omega}_{12} - \overline{\omega}_{21})^2 + 6\Delta)y^2 + 4(\overline{\omega}_{11} + \overline{\omega}_{22})\Delta y + \Delta^2 > 0, \tag{35}$$

где $\Delta = \overline{\omega}_{11}\overline{\omega}_{22} - \overline{\omega}_{12}\overline{\omega}_{21}$, $\overline{\omega}_{ij} = \omega_{ij}/D_i$, $i, j = 1, 2$.

Доказательство. Известно [20], что евклидова норма произвольной матрицы Q определяется формулой

$$\|Q\|^2 = \max_{i = 1, 2}\left|\lambda_i(Q^{\mathrm{T}}Q)\right|,$$

где Q^{T} – транспонированная к Q матрица, а $\lambda_{1,2}$ – собственные значения матрицы $Q^{\mathrm{T}}Q$. В нашем случае $A_i = C_i$ и условие (32) принимает вид $\|B_i^{-1}A_i\| \le 0.5$, $i = 1, 2, \ldots, N$, $i \ne I$.

Пусть $Q_i = B_i^{-1}A_i$. Тогда корни $\lambda_{1,2}$ квадратного уравнения $\lambda^2 - b\lambda + c = 0$ являются собственными значениями матрицы $Q^{\mathrm{T}}Q$, где

$$b = y^2[(2y + \overline{\omega}_{22})^2 + \overline{\omega}_{21}^2 + (2y + \overline{\omega}_{11})^2 + \overline{\omega}_{12}^2]/[(2y + \overline{\omega}_{11})(2y + \overline{\omega}_{21}) - \overline{\omega}_{12}\overline{\omega}_{21}]^2,$$

$$c = y^4/[(2y + \overline{\omega}_{11})(2y + \overline{\omega}_{22}) - \overline{\omega}_{12}\overline{\omega}_{21}]^2.$$

Исследование расположения корней этого уравнения приводит к выводу, что если выполнены неравенства (34), (35), то $0 < \lambda_{1,2} < 1/4$, а следовательно, $\|B^{-1}A\| \le 0.5$, что и требовалось доказать.

Замечание. Анализ задач реакции–диффузии с малыми коэффициентами диффузии базируется на принципе максимума. Можно показать, что если $R_s(U) \le 0$, $s = 1, 2, \ldots, S$, и выполнены условия

$$\omega_{ss} > 0, \quad \sum_{s \ne r}|\omega_{sr}| \le \omega_{ss}, \quad s, r = 1, 2, \ldots, S, \tag{36}$$

тогда решение задачи (1) (как и в стационарном случае) удовлетворяет принципу максимума. Легко проверить, что если имеют место (36), то неравенства (34), (35) выполнены и АСВП безусловно устойчив (для любых τ и h).

4. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ И ВЫВОДЫ

Рассмотрим методы реализации разностных схем (18), которые применяются при решении нелинейных задач в [11], [20], [21], [23].

Метод 1 (линейно-неявная разностная схема (ЛРС)). Для схем второго порядка точности (18) ЛРС записывается в виде

$$A(Y)\frac{\hat{Y} - Y}{\tau} = \tilde{D}(Y)\hat{Y}_{\bar{x}x} - \tilde{\Omega}(Y)\hat{Y} + \tilde{F}(Y).$$

Эту линейную систему алгебраических уравнений можно решить с использованием АСВП. Однако, как показано в [5], [6], иногда ЛРС является неустойчивой при любых шагах по времени τ и по пространству h.

Метод 2 (метод раздельных прогонок (МРП)). Разностные схемы делятся на S групп. Каждая группа включает разностные уравнения, соответствующие одному из дифференциальных уравнений системы (1), которые решаются итерационным методом Ньютона с последующими дополнительными итерациями между группами. В нашем случае этот метод был бы эффективным, если бы в уравнениях системы (1) участвовали не только локализованные в точке $x = \xi$ нелинейности вида R_k, $k = 1, 2, \ldots, S$, но и глобальные нелинейности.

Метод 3 (метод Ньютона с матричной прогонкой). Для решения чисто неявной схемы

$$A(\hat{Y})\frac{\hat{Y}-Y}{\tau} = \tilde{D}(\hat{Y})\hat{Y}_{\bar{x}x} - \tilde{\Omega}(\hat{Y})\hat{Y} + \tilde{F}(\hat{Y})$$

воспользуемся методом Ньютона. Введем в рассмотрение векторы

$$\delta \overset{l+1}{Z_i} = (\delta \overset{l+1}{Y_{1i}}, \ldots, \delta \overset{l+1}{Y_{Si}}), \quad i = 1, 2, \ldots, N-1,$$

где l – номер итерации по Ньютону, $\delta \overset{l+1}{W} = \overset{l+1}{W} - \overset{l}{W}$, а W – любой из векторов $Y_1, \ldots, Y_S$. Тогда линеаризованную систему можно записать в матричном виде:

$$\delta \overset{l+1}{Z_0} = 0, \quad \delta \overset{l+1}{Z_N} = 0,$$

$$\overset{l}{A_i}\overset{l+1}{Z_{i-1}} + \overset{l}{B_i}\overset{l+1}{Z_i} + \overset{l}{C_i}\overset{l+1}{Z_{i+1}} = \overset{l}{F_i}, \quad i = 1, 2, \ldots, I-1, I+2, \ldots, N-1,$$

$$\overset{l}{A_I}\overset{l+1}{Z_{I-1}} + \overset{l}{B_I}\overset{l+1}{Z_I} + \overset{l}{C_I}\overset{l+1}{Z_{I+1}} + \overset{l}{D_I}\overset{l+1}{Z_{I+2}} = \overset{l}{F_I},$$

$$\overset{l}{A_I}\overset{l+1}{Z_{I-1}} + \overset{l}{B_{I+1}}\overset{l+1}{Z_I} + \overset{l}{C_{I+1}}\overset{l+1}{Z_{I+1}} + \overset{l}{D_I}\overset{l+1}{Z_{I+2}} = \overset{l}{F_{I+1}}.$$

Здесь $\overset{l}{A_i}$, $\overset{l}{B_i}$, $\overset{l}{C_i}$, $i = 1, 2, \ldots, N-1$, $\overset{l}{D_I}$, $\overset{l}{D_{I+1}}$ – матрицы S-го порядка, их легко написать, а $\overset{l}{F_i}$, $i = 1, 2, \ldots, N-1$, суть S-мерные векторы. Теперь, чтобы решить эту систему, можно воспользоваться АСВП. Для $\overset{l+1}{Z_I}$ и $\overset{l+1}{Z_{I+1}}$ получается система линейных алгебраических уравнений. Решая ее, потом можно найти остальные неизвестные по формулам (23), (29).

Метод 4 (обратный методу 3) состоит в применении АСВП к (31) с последующим применением метода Ньютона для приближенного нахождения неизвестных Y_I, Y_{I+1}.

Самым простым примером задачи (2), (3) является следующая скалярная задача.

Пример 1. Пусть имеется задача

$$u_t = Du_{xx}, \quad x \in (0, 1), \quad x \neq \xi, \quad 0 < t \leq T,$$

$$[u]_\xi = 0, \quad D[u_x]_\xi = -cu(\xi, t), \quad 0 < t \leq T,$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T.$$

В случае $D = 1$, $c = 1$, $\xi = 1/3$ рассматривались два начальных условия:

$$\Phi_1(x) = \begin{cases} \sin(\lambda x)/\sin(\lambda\xi), & 0 \leq x \leq \xi, \\ \sin[\lambda(1-x)]/\sin[\lambda(1-\xi)], & \xi \leq x \leq 1, \end{cases}$$

где λ – наименьшее положительное решение тригонометрического уравнения $1 = \lambda[\cot(\lambda\xi) +$

Таблица 1

N	$T = 0.00005$		$T = 0.001$		$T = 0.1$	
	E_∞	ratio	E_∞	ratio	E_∞	ratio
20	5.0676×10^{-6}	–	8.3255×10^{-5}	–	1.2901×10^{-3}	–
40	2.3309×10^{-6}	2.17	2.7379×10^{-5}	3.04	3.2715×10^{-4}	3.94
80	9.7051×10^{-7}	2.40	7.6631×10^{-6}	3.57	8.2723×10^{-5}	3.95
160	3.1206×10^{-7}	3.11	2.0361×10^{6}	3.76	2.0837×10^{-5}	3.97
320	8.4569×10^{-8}	3.69	5.2240×10^{-7}	3.89	5.2354×10^{-6}	3.99
640	2.1574×10^{-8}	3.92	1.3061×10^{-7}	4.00	1.3088×10^{-6}	4.00

Таблица 2

N	$T = 0.00005$		$T = 0.001$		$T = 0.1$	
	$E_{N,\,2560}$	ratio	$E_{N,\,2560}$	ratio	$E_{N,\,2560}$	ratio
20	5.3980×10^{-3}	–	5.9913×10^{-3}	–	3.6567×10^{-3}	–
40	5.4817×10^{-3}	0.98	1.8812×10^{-3}	3.18	9.5470×10^{-4}	3.83
80	1.9863×10^{-3}	2.76	4.4060×10^{-4}	4.27	2.4440×10^{-4}	3.91
160	5.0380×10^{-4}	3.94	1.0630×10^{-4}	4.14	6.1599×10^{-5}	3.97
320	3.1310×10^{-4}	1.61	2.5800×10^{-5}	4.12	1.5477×10^{-5}	3.98
640	3.2500×10^{-4}	0.96	6.2880×10^{-6}	4.10	3.8596×10^{-6}	4.01

$+ \cot(\lambda(1 - \xi))]$,

$$\Phi_2(x) = \begin{cases} 10x, & 0 \le x \le \xi, \\ -5x + 5, & \xi \le x \le 1. \end{cases}$$

Отметим, что $\Phi_1(x)$ выполняет все условия согласования порядка 0, 1, 2, а $\Phi_2(x)$ – нет. В табл. 1 дана ошибка

$$E_\infty = \max_i |u(x_i, t_i) - y_N(x_i, t_i)|,$$

где $u(x, t)$ – точное решение, $u(x, t) = \Phi_1(x)e^{-\lambda^2 t}$, а $y_N(x_i)$ – численное решение, когда число узлов по x равно N.

В табл. 2 дана ошибка

$$E_{\infty,\,2560} = \max_i |y_{2560}(x_i, t_i) - y_N(x_i, t_i)|,$$

когда в качестве начального условия берется функция Φ_2, а за точное решение принимается численное решение при достаточно большом числе узлов по пространству, $N = 2560$.

Результаты табл. 1, 2 показывают, что неудовлетворение условиям согласования ведет к потери точности при малых T. Скорость сходимости есть (ratio) $O(h^2)$, что соответствует утверждению теоремы 1.

Методы 3, 4 сравнивались на следующем примере.

Пример 2. Рассмотрим задачу

$$\partial u_1/\partial t = \partial^2 u_1/\partial x^2 - 2u_2 + 2u_1(u_1 + u_2)\delta(x),$$

$$\partial u_2/\partial t = 2\partial^2 u_2/\partial x^2 - u_1 + u_2(4u_2 + 4u_1)\delta(x),$$

$$u_1(x, 0) = \begin{cases} 1 + x, & -1 \le x \le 0, \\ 1 - x, & 0 \le x \le 1, \end{cases} \quad u_2(x, 0) = \frac{1}{2}u_1(x, 0).$$

Соответствующая стационарная задача имеет три решения: нулевое $u_1^0 = u_2^0 \equiv 0$,

$$u_1^1(x) = \begin{cases} \dfrac{2}{3}\dfrac{\operatorname{ch}1}{\operatorname{sh}^2 1}\operatorname{sh}(1 + x), & -1 \le x \le 0, \\ \dfrac{2}{3}\dfrac{\operatorname{ch}1}{\operatorname{sh}^2 1}\operatorname{sh}(1 - x), & 0 \le x \le 1, \end{cases} \quad u_2^1(x) = \frac{1}{2}u_1^1(x),$$

Таблица 3

N	Схема п. 2.1		Схема п. 2.2	
	E_∞	ratio	E_∞	ratio
31	3.7827×10^{-2}	–	2.4152×10^{-3}	–
63	1.8425×10^{-2}	2.05	6.1458×10^{-4}	3.93
187	9.0946×10^{-3}	2.03	1.5497×10^{-4}	3.96
255	4.5183×10^{-3}	2.01	3.8908×10^{-5}	3.98
511	2.2520×10^{-3}	2.01	9.7475×10^{-6}	3.99
1023	1.1242×10^{-3}	2.00	2.4394×10^{-6}	4.00

$$u_1^2(x) = \begin{cases} 2\dfrac{\cos 1}{\sin^2 1}\sin(1+x), & -1 \le x \le 0, \\ 2\dfrac{\cos 1}{\sin^2 1}\sin(1-x), & 0 \le x \le 1, \end{cases} \qquad u_2^2(x) = -\frac{1}{2}u_1^2(x).$$

Результаты экспериментов для решения $u_1^1(x)$ приведены в табл. 3. Из них видно, что скорость сходимости при использовании схемы п. 1 разд. 2 есть $O(h)$, а при использовании схемы п. 2 есть $O(h^2)$. Подобные результаты получены как для других стационарных решений, так и для нестационарного решения.

Разностные системы уравнений (4)–(7) и (16), (17) решались методами 3, 4. Число итераций зависит как от выбора начального приближения, так и от метода. За начальное приближение для метода Ньютона в точках x_I, x_{I+1} были взяты $\overset{0}{y}_l(x_i) = ku_l^m(x_i)$, $l = 1, 2$, $m = 0, 1, 2$, $i = I, I+1$, где u_l^m – одно из точных решений, а k – коэффициент. При $m = 1, 2$ и $k > 0.5$ численное решение сходится к соответствующему точному решению, а при $k \le 0.5$ сходится к нулевому u_l^0, $l = 1, 2$. При $k = 0.9$ в методе 3 для решения нелинейных уравнений проводятся в среднем 13 итераций, а в методе 4 проводятся 8 итераций. Во втором случае время в два раза меньше. Отметим еще, что хотя условия устойчивости и корректности (34), (35) АСВП для данного примера 2 не выполнены, но алгоритм работал корректно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Слинько М.Г., Зеленяк Т.И., Акрамов Т.А. и др.* Нелинейная динамика каталитических реакций и процессов // Матем. моделирование. 1997. Т. 9. № 12. С. 87–109.
2. *Bimpong-Bota K., Nizan A., Ortoleva P., Ross J.* Cooperative phenomena in analysis of catalytic sites // J. Chem. Phys. 1970. V. 66. P. 3650–3678.
3. *Peirce A.P., Rabitz H.* An analysis of the effect of defect structures on catalitic surfaces by the boundary element technique // Surface Sci. 1988. V. 202. P. 1–31.
4. *Peirce A.P., Askar A., Rabitz H.* Convergence properties of a class of boundary element approximations to linear diffusion problems with localized nonlinear reactions // Numer. Meth. for PDEs. 1990. V. 6. P. 75–108.
5. *Мажорова О.С., Попов Ю.П., Похилко В.И.* Исследование алгоритмов численного решения систем параболических уравнений с нелинейными граничными условиями // Дифференц. ур-ния. 1987. Т. 23. № 7. С. 1240–1250.
6. *Мажорова О.С., Попов Ю.П., Сахарчук А.С.* Устойчивость разностных задач для систем параболических уравнений с нетрадиционными граничными условиями // Дифференц. ур-ния. 1997. Т. 33. № 7. С. 867–875.
7. *Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.: Наука, 1967.
8. *Chadam J.M., Peirce A.P., Yin H.-M.* The blowup property of solutions to some diffusion equations with localized nonlinear reactions // J. Math. Analys. and Appl. 1992. V. 169. № 2. P. 313–327.
9. *Chadam J.M., Yin H.-M.* A diffusio equations with localized chemical reactions // Proc. Edinsburgh Math. Soc. 1993. V. 37. P. 101–118.

10. *Карслоу П.Д., Егер Д.* Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964.
11. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
12. *Вабищевич П.Н.* Численные методы решения задач со свободной границей. М.: МГУ, 1987.
13. *Вабищевич П.Н.* Разностные схемы сквозного счета для некоторых задач математической физики // Дифференц. ур-ния. 1988. Т. 23. № 7. С. 1161–1166.
14. *Beyer R.P., LeVeque R.J.* Analysis of a one-dimensional model for the immersed boundary method // SIAM J. Numer. Analys. 1992. V. 29. № 2. P. 332–364.
15. *Li Z.* Immersed interface methods for moving interface problems // Numer. Algorithms. 1997. V. 14. P. 269–293.
16. *Wiegmann A., Bube K.P.* The immersed interface method for nonlinear differential equations with discontinuous coefficients and singular sources // SIAM J. Numer. Analys. 1998. V. 35. № 1. P. 177–201.
17. *Самарский А.А., Моисеенко Б.Д.* Экономическая схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1965. Т. 5. № 5. С. 816–827.
18. *Kandilarov J.* A second-order difference method for solution of diffusion problems with localized chemical reactions // Proc. of Second Int. Conf. Finite Difference Methods: Theory and Appl. Minsk, 1999. P. 63–67.
19. *Braianov I.A., Kandilarov J.D.* On the realization and stability of difference schemes for diffusion problems with localized reactions // Notes Numer. Fluid Mech. 1997. V. 62. P. 201–209.
20. *Самарский А.А., Николаев Е.Ц.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
21. *Ортега Д., Рейнболдт Б.* Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений с многими неизвестными. М.: Мир, 1975.
22. *Ильин В.П., Кузнецов Ю.И.* Тридиагональные матрицы и их приложения. М.: Наука, 1985.
23. *Самарский А.А., Попов Ю.П.* Разностные методы решения задач газовой динамики. М.: Наука, 1980.