

УДК 519.63: 517.957: 544.72

О. В. Вовк, Г. А. Шинкаренко

ИНТЕГРАЦИЯ НЬЮТОНОВСКОЙ ЛИНЕАРИЗАЦИИ У ЧАСОВУ ДИСКРЕТИЗАЦИЮ 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 стискувачів 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.

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 уравновешивание 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 – Кутта 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