Глава 5. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ ОБЫКНОВЕНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Наиболее универсальными методами численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений являются разностные методы. Они основаны на замене производных в дифференциальном уравнении разностными отношениями. В результате исходное дифференциальное уравнение сводится к системе алгебраических уравнений, которые называются разностными. Решение этой системы дает приближенное решение исходной задачи.

§1. Разностная аппроксимация производных.

1.1. Сеточные функции.

Пусть на отрезке $[a,b]$ задан набор точек

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n < b. \tag{1}$$

Будем называть его сеткой. Чтобы не усложнять изложения, условимся считать сетку равномерной:

$$x_{i+1} - x_i = h = (b-a)/n,\ 0 \le i \le n-1. \tag{2}$$

Пусть каждой точке сетки x_i сопоставлено по определенному закону число y_i. Совокупность этих чисел $\mathbf{y} = \{y_0, y_1, \ldots, y_n\} = \{y_i\}$ $(0 \le i \le n)$ назовем сеточной функцией. Сеточные функции, определенные на сетке (1), образуют $(n+1)$-мерное линейное пространство.

Чтобы иметь возможность сравнивать сеточные функции между собой, говорить об их близости, нужно ввести в этом пространстве норму. В этой главе мы будем пользоваться нормой C, которая определяется следующим образом:

$$\|\mathbf{y}\|_c = \max_{0 \le i \le n} |y_i|. \tag{3}$$

Это определение законно, поскольку удовлетворяет трем аксиомам нормы:

1. Норма неотрицательна

$$\|\mathbf{y}\|_c \ge 0,$$

причем равенство нулю имеет место только для нулевого элемента.

2. Модуль числового множителя можно вынести за знак нормы

$$\|\alpha\mathbf{y}\|_c = |\alpha|\|\mathbf{y}\|.$$

3. Неравенство треугольника

$$\|\mathbf{y}+\mathbf{z}\|_c \le \|\mathbf{y}\|_c + \|\mathbf{z}\|_c. \tag{4}$$

Справедливость последнего утверждения вытекает из свойства максимума:

$$\max_{0 \le i \le n} |y_i + z_i| \le \max_{0 \le i \le n} |y_i| + \max_{0 \le i \le n} |z_i|.$$

1.2. Разностные аппроксимации первой производной.

Для сеточных функций нельзя ввести обычное понятие производной, включающее операцию предельного перехода при $\Delta x \to 0$. Вместо производной здесь вводятся разностные отношения:

$$L_h^+[y_i] = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, 0 \le i \le n-1; \qquad (5)$$

$$L_h^-[y_i] = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}, 1 \le i \le n; \qquad (6)$$

$$L_h^{(0)}[y_i] = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}, 1 \le i \le n-1. \qquad (7)$$

Отношение (5) называют правой разностной производной, отношение (6) – левой разностной производной и отношение (7) – центральной разностной производной.

Чтобы установить связь разностных отношений (5) – (7) с обычной производной, предположим, что на отрезке $[a,b]$ определена дифференцируемая функция $y(x)$, значения которой в точках сетки (1) равны значениям рассматриваемой сеточной функции: $y_i = y(x_i)$. Вычислим первую производную функции $y(x)$ в точках x_i и сопоставим с разностными отношениями (5) – (7):

$$\psi_i^+ = L_h^+[y_i] - y'(x_i), 0 \le i \le n-1; \qquad (8)$$

$$\psi_i^- = L_h^-[y_i] - y'(x_i), 1 \le i \le n; \qquad (9)$$

$$\psi_i^{(0)} = L_h^{(0)}[y_i] - y'(x_i), 1 \le i \le n-1. \qquad (10)$$

Эти величины представляют собой погрешности аппроксимации производной с помощью разностных отношений (5) – (7) в точке x_i.

Предположим, что функция $y(x)$ дважды непрерывно дифференцируема на отрезке $[a,b]$ и запишем для нее формулу Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа

$$y_{i+1} = y(x_i + h) = y_i + y'(x_i)h + \frac{1}{2}y''(x_i + \theta_i h)h^2, \qquad (11)$$

где θ_i какое-то неизвестное нам число между нулем и единицей. Подставляя разложение (11) в формулу (8), получим

$$\psi_i^+ = \frac{1}{2}y''(x_i + \theta_i h)h. \qquad (12)$$

Аналогичное представление можно получить для величины ψ_i^- (9)

$$\psi_i^- = -\frac{1}{2}y''(x_i - \theta_i h)h. \qquad (13)$$

Формулы (12) и (13) не позволяют вычислить соответствующие погрешности, но дают возможность их оценить. Функция $y''(x)$, по предположению, непрерывна на отрезке $[a,b]$, и, следовательно, ограничена:

$$|y''(x)| \le M_2, \ a \le x \le b. \qquad (14)$$

В результате получаем

$$|\psi_i^+| \le \frac{1}{2}M_2 h, \ |\psi_i^-| \le \frac{1}{2}M_2 h. \qquad (15)$$

Оценки (15) являются равномерными, поскольку не зависят от индекса i. Таким образом, левое и правое разностное отношение аппроксимируют производную $y'(x)$ с первым порядком точности относительно h.

Для оценки $\psi_i^{(0)}$ (10) предположим, что функция $y(x)$ три раза непрерывно дифференцируема на отрезке $[a,b]$ и продолжим разложение (11) еще на один член

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + y'(x_i)h + \tfrac{1}{2}y''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}y'''(x_i+\theta_{1,i}h)h^3, \\ y_{i-1} &= y_i - y'(x_i)h + \tfrac{1}{2}y''(x_i)h^2 - \frac{1}{6}y'''(x_i-\theta_{2,i}h)h^3. \end{aligned} \tag{16}$$

Подставляя разложения (16) в формулу (10), будем иметь

$$\psi_i^{(0)} = \frac{1}{6}\left\{y'''(x_i+\theta_{1,i}h) + y'''(x_i-\theta_{2,i}h)\right\}h^2. \tag{17}$$

По предположению функция $y'''(x)$ непрерывна и, следовательно, ограничена на отрезке $[a,b]$:

$$\left|y'''(x)\right| \le M_3,\ a \le x \le b. \tag{18}$$

В результате из равенства (17) получим оценку

$$\left|\psi_i^{(0)}\right| \le \frac{1}{3}M_3h^2. \tag{19}$$

Оценка (19), как и раньше (15), не зависит от индекса i, она является равномерной. Таким образом, центральная разностная производная дает более хороший результат: она аппроксимирует производную $y'(x_i)$ со вторым порядком точности относительно h для функций, трижды непрерывно дифференцируемых на отрезке $[a,b]$.

Задача 1.

Рассмотреть функцию $y = 1/(1-x)$ на сетке

$$x_0 = -0.1,\ x_1 = 0,\ x_2 = 0.1. \tag{20}$$

Вычислить в точке $x_1 = 0$ правую, левую и центральную разностные производные, найти погрешности аппроксимации производной $y'(0) = 1$, сравнить их с априорными оценками по формулам (15) и (19).

В данном случае

$$L_h^+[y_1] = \frac{1/0.9-1}{0.1} = 1.111111,$$

$$\psi_1^+ = 0.111111;$$

$$L_h^-[y_1] = \frac{1-1/1.1}{0.1} = 0.909090,$$

$$\psi_i^- = -0.090909;$$

$$L_h^{(0)}[y_1] = \frac{1/0.9-1/1.1}{0.2} = 1.010101,$$

$$\psi_i^{(0)} = 0.010101.$$

Перейдем к априорной оценке погрешности. Вторая и третья производные рассматриваемой функции $y(x)$ имеют вид

$$y''(x) = \frac{2}{(1-x)^3},\ y'''(x) = \frac{6}{(1-x)^4}.$$

Для них на отрезке $[-0.1, 0.1]$ справедливы оценки

$$|y''(x)| \le \frac{2}{(0.9)^3} < 2.8,\ |y'''(x)| = \frac{6}{(0.9)^4} < 9.3.$$

Так что неравенства (15) и (19) запишутся следующим образом

$$|\psi_1^+| \le 0.14,\ |\psi_1^-| \le 0.14,\ |\psi_1^{(0)}| \le 0.031.$$

Они выполняются.

1.3. Разностная аппроксимация второй производной.

Для разностной аппроксимации второй производной составим разностное отношение первых разностных производных

$$L_h[y] = \frac{\dfrac{y_{i+1}-y_i}{h} - \dfrac{y_i - y_{i-1}}{h}}{h} = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}. \tag{21}$$

Чтобы установить связь выражения (21) со второй производной, предположим, что на отрезке $[a,b]$ определена дважды непрерывно дифференцируемая функция $y(x)$, значения которой в точках сетки (1) дают значения сеточной функции y_i. Вычислим ее вторую производную в точках сетки x_i и составим разность

$$\psi_i = L_h[y_i] - y''(x_i), 1 \le i \le n-1. \tag{22}$$

Она представляет собой погрешность аппроксимации второй производной с помощью разностного отношения второго порядка (21).

Оценим величину погрешности при предположении, что функция $y(x)$ четыре раза непрерывно дифференцируема на отрезке $[a,b]$. Это предположение позволяет написать разложения Тейлора

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y(x_i+h) = y_i + y'(x_i)h + \frac{1}{2}y''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}y'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}y^{(4)}\left(x_i + \theta_{1,i}h\right)h^4, \\ y_{i-1} &= y(x_i-h) = y_i - y'(x_i)h + \frac{1}{2}y''(x_i)h^2 - \frac{1}{6}y'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}y^{(4)}\left(x_i - \theta_{2,i}h\right)h^4. \end{aligned} \tag{23}$$

Подставляя их в формулы (21), (22), получим

$$\psi_i = \frac{1}{24}\left\{y^{(4)}\left(x_i + \theta_{1,i}h\right) + y^{(4)}\left(x_i - \theta_{2,i}h\right)\right\}h^2. \tag{24}$$

Мы не можем вычислить погрешность по этой формуле, поскольку значения аргументов у функции $y^{(4)}(x)$ нам неизвестны, но можем ее оценить. Функция $y^{(4)}(x)$ непрерывна и, следовательно, ограничена на отрезке

$$|y^{(4)}(x)| \le M_4,\ a \le x \le b. \tag{25}$$

В результате из формулы (24) получаем

$$|\psi_i| \le \frac{1}{12} M_4 h^2 . \tag{26}$$

Таким образом, разностное отношении (21) аппроксимирует вторую производную со вторым порядком точности относительно h для функций, имеющих четыре непрерывные производные на отрезке $[a,b]$. Совершенно аналогично можно строить разностные аналоги производных более высокого порядка.

Задача 2.

Для функции $y = 1/(1-x)$ вычислить на сетке (20) вторую разностную производную в точке $x_1 = 0$. Найти погрешность аппроксимации второй производной $y''(0) = 2$ и сравнить результат с априорной оценкой (26).

В данном случае

$$L_h[y_1] = \frac{1/1.1 - 2 + 1/0.9}{0.01} = 2.020202 ,$$

$$\psi_1 = 0.020202 .$$

Четвертая производная рассматриваемой функции $y(x)$ и мажоранта для нее на отрезке $[-0.1, 0.1]$ имеют вид

$$y^{(4)}(x) = \frac{24}{(1-x)^5} , \left|y^{(4)}(x)\right| \le \frac{24}{(0.9)^5} < 41 .$$

Так что неравенство (26) запишется следующим образом

$$|\psi_1| \le 0.034 .$$

Оно выполняется.

При численном интегрировании дифференциальных уравнений производные в них приближенно заменяются соответствующими разностными отношениями. В результате задача сводится к системе разностных уравнений, которые решаются на компьютере. В качестве ответа получается сеточная функция $\{y_i\}$ $(0 \le i \le n)$. После этого встает вопрос, в какой степени и с какой точностью ее можно рассматривать в качестве приближенного решения исходной задачи. Нужно иметь в виду, что прямое сравнение решения дифференциального уравнения $u(x)$ и рассчитанной сеточной функции невозможно: они принадлежат разным пространствам и их, прежде всего, нужно свести в одно пространство. Это можно сделать двояко.

Во-первых, по сеточной функции с помощью методов интерполирования можно построить функцию непрерывного аргумента $y(x)$ и оценить разность $z(x) = y(x) - u(x)$, например, в норме C

$$\|z\|_c = \max_{a \le x \le b} |y(x) - u(x)| .$$

Во-вторых, наоборот, решению дифференциального уравнения можно сопоставить сеточную функцию $\{u_i = u(x_i)\}$ и сравнить между собой две сеточные функции $\{y_i\}$ и

$\{u_i\}$, составив их разность $z_i = y_i - u_i$. При этом погрешность приближенного решения задачи будет характеризовать норма разности

$$\|\mathbf{z}\|_c = \max_{0 \le i \le n} |y_i - u_i|.$$

Наиболее последовательным является первый путь, но обычно выбирают более простой - второй.

В следующих параграфах мы рассмотрим численное решение с помощью метода конечных разностей задачи Коши и краевой задачи для линейного дифференциального уравнения второго порядка.

§2. Численное решение задачи Коши.

Рассмотрим задачу Коши для дифференциального уравнения первого порядка

$$u' = f(x, u), \tag{27}$$

$$u(x_0) = u_0. \tag{28}$$

Если функция $f(x,u)$ непрерывна и удовлетворяет условию Липшица по аргументу u в некоторой окрестности начальной точки (x_0, u_0), то можно указать такой отрезок $[a,b]$, $a < x_0 < b$, на котором решение задачи (27), (28) $u(x)$ существует и является единственным. В этом параграфе мы обсудим численные методы ее решения.

2.1. Метод Эйлера.

Пусть нам нужно построить решение задачи (27), (28) на отрезке $[x_0, x_0 + l]$ длины l. Возьмем некоторое целое число n, введем шаг $h = l/n$ и образуем на отрезке сетку

$$x_i = x_0 + ih, \ 0 \le i \le n. \tag{29}$$

Сопоставим задаче (27), (28) на отрезке разностную задачу

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i, y_i), \ 0 \le i \le n-1; \tag{30}$$

$$y_0 = u_0. \tag{31}$$

Здесь мы заменили производную $u'(x)$ в уравнении (27) правой разностной производной и сохранили неизменным начальное условие (28).

Уравнение (30) является разностным уравнением первого порядка, которое принято называть схемой Эйлера. Его можно переписать в виде рекуррентного соотношения

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \ 0 \le i \le n-1. \tag{32}$$

Это позволяет последовательно рассчитать все значения сеточной функции $\{y_i\}$, решив тем самым задачу (30), (31). Такую разностную схему называют явной.

Перейдем теперь к обсуждению главного вопроса: с какой точностью рассчитанная сеточная функция $\{y_i\}$ дает решение исходной задачи Коши $u(x)$. Для ответа на него рассмотрим решение задачи (27), (28) в точках сетки (29), образуя из функции непрерывного аргумента сеточную функцию $\{u_i = u(x_i)\}$, и сравним ее с рассчитанной сеточной функцией $\{y_i\}$. Для этого образуем две сеточные функции $\mathbf{z}$, $\boldsymbol{\psi}$:

$$z_i = y_i - u_i,\ 0 \le i \le n; \tag{33}$$

$$\psi_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} - f\left(x_i, u_i\right),\ 0 \le i \le n-1. \tag{34}$$

Смысл первой функции (33) очевиден. Она характеризует разницу между рассчитанными числами y_i и решением $u(x)$ задачи (27), (28) в точках сетки x_i. В соответствии с этим сеточную функцию $\mathbf{z}$ называют погрешностью решения.

Функция $\boldsymbol{\psi}$ (34) получается в результате подстановки решения дифференциального уравнения (27) в разностное уравнение (30). Если бы эти уравнения совпадали, то мы получили бы нуль. Но они различаются и нуля мы не получим. Сеточную функцию $\boldsymbol{\psi}$, характеризующую степень близости дифференциального и разностного уравнений, называют погрешностью аппроксимации уравнения на решении.

Установим связь между сеточными функциями $\mathbf{z}$ и $\boldsymbol{\psi}$. С этой целью выразим из формулы (33) y_i:

$$y_i = u_i + z_i \tag{35}$$

и подставим в разностное уравнение (30). В результате получим

$$\frac{z_{i+1} - z_i}{h} + \frac{u_{i+1} - u_i}{h} = f\left(x_i, u_i + z_i\right)$$

или

$$\frac{z_{i+1} - z_i}{h} = \left\{f\left(x_i, u_i + z_i\right) - f\left(x_i, u_i\right)\right\} - \left\{\frac{u_{i+1} - u_i}{h} - f\left(x_i, u_i\right)\right\}. \tag{36}$$

Здесь в обе фигурные скобки мы добавили величину $f\left(x_i, u_i\right)$. Добавленные члены входят в соотношение (36) с противоположными знаками и благодаря этому не нарушают равенство. После таких преобразований во вторых фигурных скобках получается величина ψ_i.

В первых фигурных скобках стоит разность значений функции f при одинаковом первом аргументе x_i и разных значениях второго аргумента. Эту разность с помощью формулы Лагранжа можно представить в виде

$$f\left(x_i, u_i + z_i\right) - f\left(x_i, u_i\right) = \frac{\partial f}{\partial u}\left(x_i, u_i + \theta_i z_i\right) z_i$$

и записать формулу (36) в виде рекуррентного соотношения

$$z_{i+1} = \left\{1 + h\frac{\partial f}{\partial u}\left(x_i, u_i + \theta_i z_i\right)\right\} z_i - \psi_i h,\ 0 \le i \le n-1. \tag{37}$$

Согласно (28) и (31) его следует дополнить нулевым начальным условием

$$z_0 = 0. \tag{38}$$

В отличие от формул (30), (31) формулы (37), (38) не могут быть использованы для вычисления величин z_i. В них входят неизвестные величины: ψ_i, u_i, θ_i. Однако из этой системы рекуррентных равенств можно получить рекуррентные неравенства.

Введем для оценки сеточной функции $\boldsymbol{\psi}$ ее норму

$$\left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c = \max_{0\le i\le n-1}\left|\psi_i\right|, \text{ при этом } \left|\psi_i\right| \le \left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c . \tag{39}$$

Предположим далее, что функция $\frac{\partial f}{\partial u}(x,u)$ в интересующей нас области изменения ее аргументов ограничена

$$\left|\frac{\partial f}{\partial u}(x,u)\right| \le C . \tag{40}$$

Это позволяет написать оценку

$$\left|1 + h\frac{\partial f}{\partial u}\left(x_i, u_i + \theta_i z_i\right)\right| \le 1 + Ch < e^{Ch} = q\,,\ q > 1. \tag{41}$$

С учетом (39) и (41) из формулы (37) следуют рекуррентные неравенства

$$\left|z_{i+1}\right| \le q\left|z_i\right| + \left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c h\,, \tag{42}$$

которые порождают цепочку оценок

$$\begin{aligned}
&z_0 = 0,\\
&\left|z_1\right| \le \left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c h,\\
&\left|z_2\right| \le \left(1+q\right)\left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c h,\\
&\left|z_3\right| \le \left(1+q+q^2\right)\left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c h,\\
&\vdots\\
&\left|z_n\right| \le \left(1+q+q^2+\cdots+q^{n-1}\right)\left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c h.
\end{aligned} \tag{43}$$

Согласно (41) $q > 1$, так что

$$1+q+q^2+\cdots+q^{n-1} < nq^n = ne^{Chn}.$$

Это позволяет заменить индивидуальные оценки (43) универсальной оценкой

$$\left|z_i\right| \le nhe^{Chn}\left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c,\ 0 \le i \le n. \tag{44}$$

Неравенства (44) справедливы при любом i, в частности, при том, при котором $\left|z_i\right|$ достигает своего наибольшего значения и определяет тем самым норму сеточной функции $\left\|\mathbf{z}\right\|_c$. В результате оценка погрешности решения принимает вид

$$\left\|\mathbf{z}\right\|_c \le le^{Cl}\left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c, \tag{45}$$

где l - длина отрезка, на котором рассматривается решение исходной задачи (27), (28).

Мы получили важный результат: оценку погрешности решения через оценку погрешности аппроксимации уравнения с коэффициентом, который не зависит от шага h. Чем лучше разностное уравнение аппроксимирует дифференциальное, тем меньше погрешность решения.

Чтобы завершить исследование метода Эйлера, оценим норму погрешности аппроксимации уравнения $\left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c$. Предположим, что функция $f(x,u)$ имеет в рассматриваемой области изменения аргументов непрерывные и ограниченные первые частные производные $\dfrac{\partial f}{\partial x}$ и $\dfrac{\partial f}{\partial u}$. Это обеспечивает существование у решения задачи (27), (28) непрерывной и ограниченной второй производной

$$u''(x) = \frac{\partial f}{\partial x}(x,u) + \frac{\partial f}{\partial u}(x,u) f(x,u). \qquad (46)$$

Запишем для функции $u(x)$ формулу Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа

$$u_{i+1} = u(x_i + h) = u_i + u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i + \theta_i h)h^2. \qquad (47)$$

Подставляя разложение (47) в формулу (34) для погрешности аппроксимации уравнения, получим

$$\psi_i = \frac{1}{2}u''(x_i + \theta_i h)h. \qquad (48)$$

Согласно формуле (46) функция $u''(x)$ непрерывна и ограничена

$$|u''(x)| \le M_2,\ x_0 \le x \le x_0 + l. \qquad (49)$$

Это позволяет написать оценки

$$\|\boldsymbol{\psi}\|_c \le \frac{M_2}{2}h,\ \|\mathbf{z}\|_c \le \frac{M_2 l}{2}e^{Cl}h. \qquad (50)$$

Неравенства (50) показывают, что при $h \to 0$ погрешность аппроксимации уравнения и связанная с ней неравенством (45) погрешность решения стремятся к нулю со скоростью h. В связи с этим метод Эйлера называют методом первого порядка точности относительно h.

Задача 3.

Рассмотреть задачу Коши

$$u' = \frac{1}{2}u + x, \qquad (51)$$

$$u(0) = 0. \qquad (52)$$

Построить ее численное решение на отрезке $[0,2]$ *по схеме Эйлера с шагами* $h_1 = 0.25$, $h_2 = 0.05$, $h_3 = 0.01$. *Сравнить результаты расчетов между собой и с аналитическим решением задачи*

$$u(x) = -2(x+2) + 4e^{\frac{1}{2}x}. \qquad (53)$$

Результаты расчетов приведены в таблице 1.

Таблица 1

x_i	$h_1 = 0.25$	$h_2 = 0.05$	$h_3 = 0.01$	$u(x_i)$
0,00	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
0,25	0,000000	0,025633	0,031182	0,032594
0,50	0,062500	0,120338	0,132903	0,136102
0,75	0,195313	0,293193	0,314530	0,319966
1,00	0,407227	0,554466	0,586674	0,594885
1,25	0,708130	0,915776	0,961355	0,972984
1,50	1,109146	1,390270	1,452190	1,468000
1,75	1,622789	1,992821	2,074604	2,095501
2,00	2,263138	2,740255	2,846068	2,873127

Здесь в первом столбце выписаны значения независимой переменной x с шагом $h_1 = 0.25$, в трех следующих столбцах - решения разностной задачи с шагами h_1, h_2, h_3. При этом результаты расчетов с шагами h_2 и h_3 в промежуточных точках x_i, которые не вошли в первый столбец, опущены. В последнем пятом столбце приведены для сравнения значения функции $u(x)$ (53), дающей аналитическое решение задачи. Из таблицы видно, как по мере уменьшения шага повышается точность. В то же время следует отметить, что даже при маленьком шаге $h_3 = 0.01$ метод не может обеспечить решению хорошую точность: ошибка в последней точке $x = 2$ составляет $z = \text{-}0.027059$.

Результаты проведенных расчетов представлены также на рис. 1. На нем приведены три кривые, соответствующие численному решению задачи по схеме Эйлера с шагами h_1, h_2, h_3. При выбранном масштабе кривая III практически совпадает с графиком аналитического решения задачи (53) (пунктирная линия). Рисунок наглядно показывает повышение точности приближенного решения по мере уменьшения шага h.

Мы подробно разобрали метод Эйлера, поскольку на примере простой разностной схемы (30) он позволяет поставить и обсудить все основные вопросы численного решения задачи Коши методом конечных разностей. Однако следует отметить, что полученные в этом разделе результаты представляют прежде всего теоретический интерес. Для решения реальных задач разностную схему Эйлера обычно не применяют из-за ее низкой точности: погрешность с уменьшением h убывает как $O(h)$. В следующих разделах мы обсудим пути построения разностных схем более высокого порядка точности.

2.2. Повышение точности разностного метода.

Оценка погрешности решения через погрешность аппроксимации уравнения в методе Эйлера (45) приводит к вполне естественному выводу: чтобы повысить точность метода, нужно улучшить аппроксимацию дифференциального уравнения разностным. Рассмотрим возможные пути реализации этой идеи.

Предположим, что решение дифференциального уравнения $u(x)$ имеет производные достаточно высокого порядка и напишем для него разложение по формуле Тейлора

$$u_{i+1} = u(x_i + h) = u_i + u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}u'''(x_i)h^3 + \cdots. \qquad (54)$$

Если его оборвать на члене порядка h и положить в соответствии с дифференциальным уравнением (27) $u'(x_i) = f(x_i, u_i)$, то мы придем к схеме Эйлера.

Сделаем следующий шаг. Оборвем разложение (54) на члене порядка h^2 и воспользуемся для вычисления производной $u''(x_i)$ формулой (46). В результате получим новое рекуррентное соотношение, более сложное чем (32),

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y_i) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y_i)f(x_i, y_i)\right\}h^2, \qquad (55)$$

которое можно также записать в виде разностного уравнения

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i, y_i) + \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y_i) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y_i)f(x_i, y_i)\right\}h. \qquad (56)$$

Здесь, как и в предыдущем разделе, мы обозначили искомую функцию в разностном уравнении (56) буквой y, а не u, чтобы подчеркнуть, что (27) и (56) – это два разных уравнения.

Уравнение (55), дополненное начальным условием (31), дает явную разностную схему численного решения рассматриваемой задачи Коши. По рекуррентной формуле можно последовательно рассчитать все значения сеточной функции $y_i, 0 \le i \le n$ и получить таким образом приближенное решение задачи (27), (28). Исследование показывает, что такая усложненная схема имеет второй порядок точности относительно h как для аппроксимации уравнения, так и для погрешности решения. Существенно то, что основная идея данного подхода допускает дальнейшее развитие. Если оборвать разложение (54) на члене порядка h^3, h^4 и т. д., то получатся разностные схемы третьего, четвертого и более высоких порядков точности.

Однако у данного подхода есть существенный недостаток. При расчетах по схеме Эйлера требуется вычислять только значения функции $f(x_i, y_i)$. В схеме же (55) на каждом шаге приходится вычислять не только функцию f, но и ее первые производные $\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y_i)$ и $\frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y_i)$. Если мы, оставив в разложении (54) члены до h^4 включительно, построим схему четвертого порядка точности, то на каждом шаге придется вычислять десять величин: функцию $f(x_i, y_i)$, две ее первых производных, три вторых производных и четыре третьих производных. Это существенно усложнит разработку программы и нарушит важный принцип вычислительной математики – использовать в расчетах только те величины, которые задаются условиями задачи. Формулировка задачи Коши предполагает, что известен алгоритм вычисления функции $f(x, u)$ по значениям ее аргументов. Если этот алгоритм сводится к расчету по простой формуле, то вычисление производных не составляет труда. Однако возможны и такие варианты представления алгоритма, при которых вычисление производных функции $f(x,u)$ либо очень сложно, либо практически невозможно. Поэтому при разработке разностных схем высокого порядка точности стремятся заменить вычисление производных функции $f(x,u)$ вычислением самой функции в нескольких точках. В следующих разделах мы рассмотрим, как это удается сделать.

2.3. Метод Рунге-Кутта.

Рассмотрим правую часть разностного уравнения (56), содержащую первые производные от функции $f(x,u)$. Главная идея метода Рунге-Кутта состоит в том, чтобы приближенно заменить ее на сумму значений функции f в двух разных точках с точностью до членов порядка h^2. С этой целью положим:

$$f(x_i,y_i)+\frac{1}{2}\left\{\frac{\partial f}{\partial x}(x_i,y_i)+\frac{\partial f}{\partial y}(x_i,y_i)f(x_i,y_i)\right\}h= \\ =\beta f(x_i,y_i)+\alpha f(x_i+\gamma h,y_i+\delta h)+O(h^2), \tag{57}$$

где α, β, γ, δ - четыре свободных параметра, которые нужно подобрать так, чтобы правая часть равнялась левой с нужной степенью точности.

Разложим функцию $f(x_i+\gamma h,y_i+\delta h)$ по степеням h:

$$f(x_i+\gamma h,y_i+\delta h)=f(x_i,y_i)+\left\{\gamma\frac{\partial f}{\partial x}(x_i,y_i)+\delta\frac{\partial f}{\partial y}(x_i,y_i)\right\}h+O(h^2), \tag{58}$$

подставим разложение (58) в формулу (57) и приравняем слева и справа члены, не содержащие h и содержащие h в первой степени. В результате получим для четырех параметров три уравнения

$$\alpha+\beta=1,\ \alpha\gamma=\frac{1}{2},\ \alpha\delta=\frac{1}{2}f(x_i,y_i). \tag{59}$$

Они позволяют выразить параметры β, γ, δ через α:

$$\beta=1-\alpha,\ \gamma=\frac{1}{2\alpha},\ \delta=\frac{1}{2\alpha}f(x_i,y_i). \tag{60}$$

Заменяя с помощью (57) левую часть уравнения (56) и отбрасывая члены порядка $O(h^2)$, получим однопараметрическое семейство разностных схем Рунге-Кутта:

$$\frac{y_{i+1}-y_i}{h}=(1-\alpha)f(x_i,y_i)+\alpha f\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},y_i+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,y_i)\right). \tag{61}$$

Уравнение (61), как и (30), можно записать в виде удобного для расчетов рекуррентного соотношения

$$y_{i+1}=y_i+\left[(1-\alpha)f(x_i,y_i)+\alpha f\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},y_i+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,y_i)\right)\right]h. \tag{62}$$

Наиболее удобные разностные схемы этого семейства соответствуют двум значениям параметра α: $\alpha = \frac{1}{2}$ и $\alpha = 1$. При $\alpha = \frac{1}{2}$ рекуррентная формула (62) принимает вид

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left\{ f\left(x_i, y_i\right) + f\left(x_i + h, y_i + hf\left(x_i, y_i\right)\right)\right\}. \qquad (63)$$

Она определяет следующую процедуру расчета y_{i+1}. Сначала делается шаг h по схеме Эйлера и вычисляется величина

$$\tilde{y}_{i+1} = y_i + f\left(x_i, y_i\right)h. \qquad (64)$$

Затем находится значение функции f в точке $\left(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1}\right)$, составляется полусумма

$$\frac{f\left(x_i, y_i\right) + f\left(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1}\right)}{2}$$

и проводится окончательный расчет величины

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f\left(x_i, y_i\right) + f\left(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1}\right)}{2}h. \qquad (65)$$

Такая схема вычислений называется «предиктор-корректор» или буквально «предсказание-исправление». Вычисление $\tilde{y}_{i+1}$ по схеме Эйлера (64) – это грубое предсказание результата. Вторичный расчет (65), сделанный на основании первого, является уточнением результата, его коррекцией.

При $\alpha = 1$ рекуррентная формула (62) имеет вид

$$y_{i+1} = y_i + f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} f\left(x_i, y_i\right)\right). \qquad (66)$$

Здесь схема расчета заключается в следующем. Сначала делается половинный шаг $\frac{h}{2}$: по схеме Эйлера вычисляется величина

$$y_{i+\frac{1}{2}} = y_i + \frac{h}{2} f\left(x_i, y_i\right). \qquad (67)$$

Затем находится значение функции f в точке $\left(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{i+\frac{1}{2}}\right)$. Оно определяет по формуле (66) очередное значение y_{i+1}.

Следует заметить, что процедура расчета приближенного решения задачи Коши (27), (28) по схеме (61) по сравнению со схемой Эйлера усложняется: теперь на каждом шаге функцию $f\left(x, u\right)$ приходится считать не один, а два раза. Однако такое усложнение оказывается оправданным благодаря более высокой точности метода. К исследованию проблемы точности мы теперь и переходим.

Введем, как и в предыдущем разделе, две сеточные функции: погрешность решения $\mathbf{z}$ (33) и погрешность аппроксимации уравнения $\boldsymbol{\psi}$. В рассматриваемом случае она определяется формулой

$$\psi_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} - \left[\left(1-\alpha\right) f\left(x_i, u_i\right) + \alpha f\left(x_i + \frac{h}{2\alpha}, u_i + \frac{h}{2\alpha} f\left(x_i, u_i\right)\right)\right]. \qquad (68)$$

Выразим y_i по формуле (35) через u_i и z_i и подставим в разностное уравнение (56). В результате получим

$$\frac{z_{i+1}-z_i}{h}+\frac{u_{i+1}-u_i}{h}=(1-\alpha)f(x_i,u_i+z_i)+\alpha f\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},u_i+z_i+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,u_i+z_i)\right). \quad (69)$$

Формулу (69) можно переписать в виде

$$\frac{z_{i+1}-z_i}{h}=\left\{\left[(1-\alpha)f(x_i,u_i+z_i)+\alpha f\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},u_i+z_i+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,u_i+z_i)\right)\right]-\right.$$
$$\left.-\left[(1-\alpha)f(x_i,u_i)+\alpha f\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},u_i+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,u_i)\right)\right]\right\}- \quad (70)$$
$$-\left\{\frac{u_{i+1}-u_i}{h}-\left[(1-\alpha)f(x_i,u_i)+\alpha f\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},u_i+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,u_i)\right)\right]\right\}.$$

Здесь мы перенесли член $(u_{i+1}-u_i)/h$ слева направо и в каждое из двух выражений, собранных в фигурных скобках, добавили одно и то же слагаемое. Поскольку между фигурными скобками стоит знак минус, значение правой части формулы (70) в целом при этом не меняется. Однако благодаря таким преобразованиям мы собрали во вторых фигурных скобках члены, которые дают погрешность аппроксимации дифференциального уравнения $\boldsymbol{\psi}$ (68).

Перейдем к дальнейшему исследованию соотношения (70). Рассмотрим функцию

$$F(v)=(1-\alpha)f(x_i,v)+\alpha f\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},v+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,v)\right). \quad (71)$$

Выражение, стоящее в первых фигурных скобках формулы (70), можно записать как разность значений этой функции при $v=u_i+z_i$ и $v=u_i$ и преобразовать эту разность с помощью формулы конечных приращений Лагранжа

$$F(u_i+z_i)-F(u_i)=F'(u_i+\theta_i z_i)z_i,\ 0<\theta_i<1, \quad (72)$$

где

$$F'(v)=(1-\alpha)\frac{\partial f}{\partial v}(x_i,v)+\alpha\frac{\partial f}{\partial v}\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},v+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,v)\right)\left(1+\frac{h}{2\alpha}\frac{\partial f}{\partial v}(x_i,v)\right). \quad (73)$$

Подставим полученные выражения для отдельных слагаемых в формулу (70). В результате она примет вид рекуррентной формулы

$$z_{i+1}=\left\{1+hF'(u_i+\theta_i z_i)\right\}z_i-\psi_i h,\ 0\le i\le n-1, \quad (74)$$

которую нужно дополнить нулевым начальным условием (38). Использовать эту формулу для последовательного вычисления значений сеточной функции $\mathbf{z}$ нельзя: в ее правую часть входят неизвестные аргументы: ψ_i, u_i, θ_i. Однако эту систему рекуррентных равенств можно заменить системой рекуррентных неравенств для последующей оценки z_i.

Предположим, как и при исследовании метода Эйлера, что частная производная $\frac{\partial f}{\partial u}(x,u)$ в интересующей нас области изменения ее аргументов ограничена (40). Тогда с учетом формулы (73) для производной $F'(v)$ получим

$$\left|1+hF'(u_i+\theta_i z)\right| \le 1+Ch+\frac{1}{2}C^2h^2 < e^{Ch}=q\,,\ q>1. \tag{75}$$

С учетом этого рекуррентные равенства (74) можно заменить рекуррентными неравенствами

$$|z_{i+1}| \le q|z_i| + \|\boldsymbol{\psi}\|_c\, h\,, \tag{76}$$

которые полностью совпадают с неравенствами (42) предыдущего раздела. Мы уже знаем, что из них следует оценка нормы погрешности решения через норму погрешности аппроксимации уравнения

$$\|\mathbf{z}\|_c \le le^{Cl}\,\|\boldsymbol{\psi}\|_c. \tag{77}$$

Теперь нужно оценить норму погрешности аппроксимации уравнения (68). Предположим, что функция $f(x,u)$ имеет в интересующей нас области изменения своих аргументов непрерывные вторые производные и, следовательно, решение дифференциального уравнения $u(x)$ трижды непрерывно дифференцируемо. Это позволяет написать следующие разложения Тейлора

$$u_{i+1}=u(x_i+h)=u_i+u'(x_i)h+\frac{1}{2}u''(x_i)h^2+\frac{1}{6}u'''(\bar{x}_i)h^3, \tag{78}$$

$$\begin{gathered}
f\left(x_i+\frac{h}{2\alpha},u_i+\frac{h}{2\alpha}f(x_i,u_i)\right)=f(x_i,u_i)+\frac{h}{2\alpha}\left\{\frac{\partial f}{\partial x}(x_i,u_i)+\frac{\partial f}{\partial u}(x_i,u_i)f(x_i,u_i)\right\}+\\
+\frac{h^2}{8\alpha^2}\left\{\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\tilde{x}_i,\tilde{u}_i)+2\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial u}(\tilde{x}_i,\tilde{u}_i)f(\tilde{x}_i,\tilde{u}_i)+\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}(\tilde{x}_i,\tilde{u}_i)f^2(\tilde{x}_i,\tilde{u}_i)\right\},
\end{gathered} \tag{79}$$

где

$$\bar{x}_i=x_i+\bar{\theta}_i h\,,\ \tilde{x}_i=x_i+\tilde{\theta}_i\frac{h}{2\alpha}\,,\ \tilde{u}_i=u_i+\tilde{\theta}_i\frac{h}{2\alpha}f(x_i,u_i),$$
$$0<\bar{\theta}_i<1\,,\ 0<\tilde{\theta}_i<1\,.$$

Здесь последние слагаемые в обоих разложениях представляют собой остаточные члены в форме Лагранжа, которые берутся в неизвестных нам промежуточных точках.

Подставим разложения (78), (79) в формулу (68) для погрешности аппроксимации дифференциального уравнения (27) и примем во внимание соотношения, вытекающие из этого уравнения

$$\begin{aligned}
&u'(x_i)=f(x_i,u_i),\\
&u''(x_i)=\frac{\partial f}{\partial x}(x_i,u_i)+\frac{\partial f}{\partial u}(x_i,u_i)f(x_i,u_i).
\end{aligned} \tag{80}$$

Благодаря (80) члены нулевого и первого порядков относительно h сокращаются и остаются только члены второго порядка, обязанные своим происхождением остаточным членам в разложениях (78), (79). В результате получается следующее представление для погрешности аппроксимации уравнения

$$\psi_i = h^2 \left\{ \frac{1}{6} u'''(\bar{x}_i) - \frac{1}{8\alpha} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i) + \right.\right.$$
$$\left.\left. +2\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial u}(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i) f(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i) + \frac{\partial^2 f}{\partial u^2}(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i) f^2(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i) \right] \right\}. \tag{81}$$

Функции, входящие в правую часть этого соотношения, по предположению непрерывны и ограничены в интересующей нас области изменения своих аргументов. Это позволяет заменить равенство (81) неравенством

$$|\psi_i| \le \|\boldsymbol{\psi}\|_c \le Mh^2, \tag{82}$$

где M - константа, мажорирующая выражение в фигурных скобках формулы (81). Подставляя оценку (82) в неравенство (77), получим

$$\|\mathbf{z}\|_c \le Mle^{Cl} h^2. \tag{83}$$

Таким образом, при $h \to 0$ погрешность аппроксимации уравнения и, как следствие, погрешность решения стремятся к нулю со скоростью h^2. Это означает, что разностное уравнение (61), полученное по схеме Рунге-Кутта, имеет второй порядок точности относительно h.

Второй порядок точности лучше, чем первый, однако практика показывает, что этой точности также недостаточно. Наиболее часто при проведении реальных расчетов используется схема Рунге-Кутта четвертого порядка точности следующего вида

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right), \tag{84}$$

где

$$k_1 = f(x_i, y_i), \quad k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right),$$
$$k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right), \quad k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3). \tag{85}$$

Если в схеме второго порядка точности на каждом шаге функцию $f(x, y)$ приходилось вычислять два раза, то здесь – четыре раза. Однако это усложнение схемы расчета окупается высокой точностью. На более подробном обсуждении схемы (84), (85) останавливаться не будем и ограничимся конкретным примером.

Задача 4.

Построить решение задачи Коши (51), (52) на отрезке $[0,2]$ *с шагом* $h = 0.25$ *по схеме Рунге-Кутта второго порядка типа «предиктор-корректор» (65) и по схеме Рунге-Кутта четвертого порядка (84), (85). Сравнить результаты расчетов между собой и с аналитическим решением задачи (53).*

Результаты расчетов по этой задаче приведены в таблице 2. Здесь в первом столбце даны значения переменной x_i, во втором и третьем столбцах – результаты расчетов по схемам Рунге-Кутта второго и четвертого порядков, в последнем шестом столбце – значения аналитического решения (53) в узлах сетки. В четвертом и пятом столбцах приведены результаты расчетов по методу Адамса. Они будут обсуждаться в следующем разделе.

Таблица 2.

x_i	Р.К. - II	Р.К. - IV	Ад. - II	Ад. - IV	$u(x_i)$
0,00	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
0,25	0,031250	0,032593	0,031250	0,032593	0,032594
0,50	0,133057	0,136099	0,130859	0,136099	0,136102
0,75	0,314791	0,319962	0,309692	0,319962	0,319966
1,00	0,587068	0,594879	0,578331	0,594826	0,594885
1,25	0,961913	0,972975	0,948662	0,972847	0,972984
1,50	1,452948	1,467988	1,434141	1,467772	1,468000
1,75	2,075605	2,095486	2,050001	2,095159	2,095501
2,00	2,847365	2,873107	2,813492	2,872644	2,873127

Сравнение результатов второго столбца таблицы 1, рассчитанных по методу Эйлера с шагом $h = 0.25$, с результатами второго и третьего столбца таблицы 2 показывает как уменьшается погрешность при фиксированном шаге h по мере перехода к более точным методам. Так метод Рунге-Кутта четвертого порядка, несмотря на достаточно крупный шаг, дает погрешность решения $\|\mathbf{z}\|_c = 0.00002$. Это на много лучше, чем при расчете по схеме Эйлера с шагом $h = 0.01$ (см. четвертый столбец в таблице 1). В то же время при расчете по схеме Эйлера было сделано двести шагов с однократным вычислением функции $f(x, y)$ на каждом шаге, а при расчете по схеме Рунге-Кутта – восемь шагов с четырехкратным вычислением функции $f(x, y)$ на каждом шаге. Таким образом, более сложный, но и более совершенный метод позволяет при меньшем объеме вычислений получить более точный результат.

В заключение сделаем следующее замечание. Априорные оценки погрешности по схеме Эйлера (50) или Рунге-Кутта (83) представляют теоретический интерес. Они определяют скорость, с которой погрешность стремится к нулю при $h \to 0$. Однако на практике оценки подобного типа неэффективны, поскольку содержат производные искомого решения $u(x)$. Обычно точность численного решения задачи устанавливают с помощью апостериорных оценок, основанных на сравнении результатов расчетов с шагом h и $h/2$. Процедура их вывода и применения была описана в предыдущей главе в связи с задачей численного интегрирования.

2.4. Метод Адамса.

Адамс – английский астроном и математик XIX века, который много занимался небесной механикой. При изучении траекторий планет ему постоянно приходилось численно интегрировать уравнения их движения. Желая минимизировать объем вычислений, Адамс разработал один из наиболее экономичных методов численного решения дифференциальных уравнений, к обсуждению которого мы теперь переходим.

Пусть $u(x)$ - решение дифференциального уравнения (27). Для производной этой функции имеет место равенство

$$u'(x) = f(x, u(x)) = F(x). \tag{86}$$

Интегрируя его между двумя точками сетки, получим соотношение

$$u_{i+1} = u_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x)\,dx. \tag{87}$$

Мы не можем использовать это соотношение непосредственно для перехода в процессе решения задачи от i-ой точки сетки к $(i+1)$-ой, поскольку функция $F(x)$ нам не известна. Чтобы сделать следующий шаг, нужно приближенно заменить эту функцию на такую функцию, которую можно вычислить. Опишем, как эта проблема решается в методе Адамса.

Пусть в процессе численного решения задачи мы довели расчет до точки x_i. В результате проведенных расчетов нам оказались известными величины y_j и $f(x_j, y_j)$, $0 \le j \le i$. Возьмем некоторое фиксированное целое число $m \le i$ и построим интерполяционный многочлен m-ой степени, принимающий в точках x_j, $i-m \le j \le i$ значения $f(x_j, u_j)$

$$P_m(x_j) = f(x_j, u_j),\ i-m \le j \le i. \tag{88}$$

Его можно записать по формуле Лагранжа

$$P_m(x) = \sum_{j=i-m}^{i} f(x_j, y_j) Q_{m,j}(x), \tag{89}$$

где $Q_{m,j}(x)$ специальные многочлены вида

$$Q_{m,j}(x) = \frac{(x - x_{i-m})\cdots(x - x_{j-1})(x - x_{j+1})\cdots(x - x_i)}{(x_j - x_{i-m})\cdots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\cdots(x_j - x_i)}, \tag{90}$$

которые мы уже рассматривали в третьей главе.

Главная идея метода Адамса заключается в том, чтобы для расчета y_{i+1} использовать формулу типа (87), приближенно заменяя в ней функцию $F(x)$ на интерполяционный многочлен $P_m(x)$, составленный согласно (89) по результатам предыдущих вычислений. Это приводит к рекуррентной формуле

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_m(x)\,dx = y_i + \sum_{j=i-m}^{i} a_j f(x_j, y_j), \tag{91}$$

где

$$a_j = \int_{x_i}^{x_{i+1}} Q_{m,j}(x)\,dx. \tag{92}$$

Рассмотрим более подробно данную схему численного решения задачи Коши в простейших случаях $m=0$ и $m=1$, когда технические трудности не закрывают прозрачную идею метода. При $m=0$ для аппроксимации функции $F(x)$ используется полином нулевой степени, т. е. постоянная

$$F(x) \approx P_0 = f(x_i, y_i).$$

В этом случае формула (91) переходит в рекуррентную формулу метода Эйлера

$$y_{i+1} = y_i + hf\left(x_i, y_i\right),$$

обеспечивающую первый порядок точности. Такой результат сам по себе тривиален. Мы привели его только для того, чтобы показать, что для метода Адамса, как и для метода Рунге-Кутта, исходной точкой является схема Эйлера.

Перейдем к исследованию варианта $m=1$. В этом случае для аппроксимации функции $F\left(x\right)$ используется полином первой степени, построенный по значениям функции f в двух точках $\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)$ и $\left(x_i, y_i\right)$:

$$P_1\left(x\right) = f\left(x_i, y_i\right)\frac{x - x_{i-1}}{h} - f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)\frac{x - x_i}{h}.$$

Подставляя его в формулу (91) и проводя интегрирование, получим

$$y_{i+1} = y_i + \left\{\frac{3}{2}f\left(x_i, y_i\right) - \frac{1}{2}f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)\right\}h. \tag{93}$$

Отметим следующую особенность рекуррентной формулы (93). Для расчета очередного значения сеточной функции y_{i+1} нужно знать ее значения в двух предыдущих точках y_i и y_{i-1}. Таким образом, формула (93) начинает работать только со второй точки. Вычислить по ней y_1 нельзя. Это значение решения разностной задачи приходится вычислять каким-нибудь другим методом, например, методом Рунге-Кутта.

Рекуррентную формулу (93) можно записать в виде разностного уравнения

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \frac{3}{2}f\left(x_i, y_i\right) - \frac{1}{2}f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right). \tag{94}$$

Подсчитаем для него погрешность аппроксимации дифференциального уравнения

$$\psi_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} - \left\{\frac{3}{2}f\left(x_i, u_i\right) - \frac{1}{2}f\left(x_{i-1}, u_{i-1}\right)\right\} = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} - \left\{\frac{3}{2}u'\left(x_i\right) - \frac{1}{2}u'\left(x_{i-1}\right)\right\}. \tag{95}$$

Предположим, что функция $f\left(x, u\right)$ имеет в интересующей нас области изменения аргументов непрерывные вторые производные, так что решение задачи $u\left(x\right)$ трижды непрерывно дифференцируемо. Запишем разложения Тейлора

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_i + u'\left(x_i\right)h + \frac{1}{2}u''\left(x_i\right)h^2 + \frac{1}{6}u'''\left(x_i + \tilde{\theta}_i h\right)h^3, \\ u'\left(x_{i-1}\right) &= u'\left(x_i\right) - u''\left(x_i\right)h + \frac{1}{2}u'''\left(x_i - \tilde{\tilde{\theta}}_i h\right)h^2. \end{aligned} \tag{96}$$

Подставляя их в формулу (95), получим

$$\psi_i = \left\{\frac{1}{6}u'''\left(x_i + \tilde{\theta}_i h\right) + \frac{1}{4}u'''\left(x_i - \tilde{\tilde{\theta}}_i h\right)\right\}h^2. \tag{97}$$

Отсюда можно написать оценку

$$\left|\psi_i\right| \le \left\|\boldsymbol{\psi}\right\|_c \le \frac{5}{12}M_3 h^2, \tag{98}$$

где M_3 - постоянная, мажорирующая третью производную функции $u\left(x\right)$:

$$\left|u'''(x)\right| \le M_3,\ x_0 \le x \le x_0 + l. \tag{99}$$

Мы видим, что разностное уравнение метода Адамса, соответствующее случаю $m=1$, аппроксимирует дифференциальное уравнение (27) со вторым порядком точности относительно h. Как и в случае метода Рунге-Кутта, это обеспечивает второй порядок точности для погрешности решения $\|\mathbf{z}\|_c$ при предположении, что значение y_1, которое рассчитывается нестандартно, вычислено со вторым порядком точности.

Процесс построения более точных схем можно продолжить за счет увеличения m. При $m=2$ получается схема третьего порядка точности, при $m=3$ - четвертого и т.д. Схема четвертого порядка, как и в методе Рунге-Кутта, является наиболее употребительной, поэтому мы коротко остановимся на ее выводе и обсуждении.

Если написать интерполяционный полином третьей степени $P_3(x)$ (89) на сетке из четырех точек x_i, x_{i-1}, x_{i-2}, x_{i-3} и провести интегрирование (92), то рекуррентная формула (91) примет вид:

$$y_{i+1} = y_i + h\left\{\frac{55}{24} f\left(x_i, y_i\right) - \frac{59}{24} f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right) + \frac{37}{24} f\left(x_{i-2}, y_{i-2}\right) - \frac{9}{24} f\left(x_{i-3}, y_{i-3}\right)\right\}. \tag{100}$$

Приведем еще одно форму записи этой формулы через так называемые конечные разности

$$y_{i+1} = y_i + hf_i + \frac{1}{2}h^2\Delta^1 f_i + \frac{5}{12}h^3\Delta^2 f_i + \frac{3}{8}h^4\Delta^3 f_i, \tag{101}$$

где

$$\begin{aligned} f_i &= f\left(x_i, y_i\right), \\ \Delta^1 f_i &= \frac{1}{h}\left\{f\left(x_i, y_i\right) - f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)\right\}, \\ \Delta^2 f_i &= \frac{1}{h^2}\left\{f\left(x_i, y_i\right) - 2f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right) + f\left(x_{i-2}, y_{i-2}\right)\right\}, \\ \Delta^3 f_i &= \frac{1}{h^3}\left\{f\left(x_i, y_i\right) - 3f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right) + 3f\left(x_{i-2}, y_{i-2}\right) - f\left(x_{i-3}, y_{i-3}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{102}$$

Первая, вторая и третья разности (102) приближенно соответствуют первой, второй и третьей производной функции $F(x) = f\left(x, u(x)\right)$. Эквивалентность формул (100) и (101) легко проверить непосредственно. Формула (101) иногда более удобна для организации вычислительного процесса и контроля точности.

Особенность метода Адамса проявляется в формуле (100) еще сильнее, чем в формуле (93). Здесь для расчета очередного значения y_{i+1} нужно знать значения y в четырех предыдущих точках - y_i, y_{i-1}, y_{i-2}, y_{i-3}. Таким образом, формула (100) начинает работать только с четвертой точки. Вычислить по ней y_1, y_2, y_3 нельзя. Эти значения решения разностной задачи приходится рассчитывать другим методом, например, методом Рунге-Кутта.

Перейдем к обсуждению точности схемы (100). Если функция $f(x,u)$ имеет непрерывные четвертые производные по своим аргументам в интересующей нас области их изменения, так что решение задачи $u(x)$ пять раз непрерывно дифференцируемо, то разностное уравнение (100) аппроксимирует дифференциальное уравнение (27) с четвертым порядком точности относительно h. Доказательство этого утверждения проводится также, как и для схемы второго порядка (93), только теперь в разложениях типа (96) нужно удерживать больше членов. Четвертый порядок точности при аппроксимации уравнения обеспечивает четвертый порядок точности для погрешности решения $\|\mathbf{z}\|_c$ при предположении, что начальные значения для метода Адамса y_1, y_2, y_3 вычислены с такой же точностью. Они рассчитываются независимо и при этом важно, чтобы начальный этап вычислительного процесса не внес такую погрешность, которая исказит все последующие результаты.

Задача 5.

Построить решение задачи Коши (51), (52) на отрезке $[0,2]$ *с шагом* $h = 0.25$ *по схеме Адамса второго (93) и четвертого (100) порядка. Сравнить результаты расчетов между собой, с результатами расчетов по схеме Рунге-Кутта и с аналитическим решением задачи.*

Результаты расчетов приведены в четвертом и пятом столбцах таблицы 2. В соответствии с заданием, нужно сравнивать четвертый столбец со вторым и шестым, а пятый – с третьим и шестым. Напомним, что в шестом столбце приведено аналитическое решение (53) рассматриваемой задачи, так что сравнение с ним позволяет судить о точности приближенного решения по схеме Рунге-Кутта и схеме Адамса.

Расчет по схеме Адамса второго порядка точности начинается с y_2, четвертого - с y_4. Значение y_1 в четвертом столбце, y_1, y_2, y_3 в пятом столбце рассчитывались по схеме Рунге-Кутта соответствующего порядка, поэтому в таблице они оказываются одинаковыми с соответствующими данными второго и третьего столбцов. Сравнение результатов проведенных расчетов двумя методами с аналитическим решением задачи показывает, что их точность примерно одинакова.

Сравним схемы четвертого порядка точности в методе Рунге-Кутта (84) и Адамса (100) с точки зрения организации вычислительного процесса. Чтобы сделать один шаг по методу Рунге-Кутта, необходимо вычислить функцию $f(x, y)$ четыре раза (85), а в методе Адамса только один раз. В трех предшествующих точках функция $f(x, y)$ была уже вычислена на предыдущих шагах и вычислять ее снова нет необходимости. В этом заключается главное достоинство метода Адамса, которое особенно высоко ценилось в докомпьютерную эру.

Главный недостаток метода Адамса мы уже отмечали: при его применении первые шаги приходится делать с помощью другого метода, например, с помощью метода Рунге-Кутта и только после этого можно перейти на расчет по схеме Адамса. Таким образом, программа решения задачи Коши по методу Адамса должна включать в себя как элемент программу метода Рунге-Кутта для расчета начальной стадии вычислительного процесса.

С этой особенностью метода Адамса связана еще одна проблема. При численном интегрировании дифференциального уравнения часто приходится менять шаг h. В методе Рунге-Кутта это не составляет труда, поскольку каждый шаг делается независимо от предыдущего. В методе Адамса ситуация иная. Здесь нужно либо изначально программировать весьма сложные формулы расчета с переменным шагом, либо после каждой смены шага заново проводить расчет первых трех точек по методу Рунге-Кутта. Только после этого можно переходить на стандартный счет по методу Адамса. Эти недостатки приводят к тому, что сегодня при компьютерных расчетах предпочтение часто отдается более удобному методу Рунге-Кутта.

§3. Численное решение краевой задачи для линейного дифференциального уравнения второго порядка.

Рассмотрим следующую задачу для линейного дифференциального уравнения второго порядка:

$$u'' - q(x)u = -f(x), \quad a < x < b, \tag{103}$$

$$u(a) = u_1, \quad u(b) = u_2. \tag{104}$$

Здесь два дополнительных условия заданы в граничных точках отрезка $[a,b]$, поэтому задачу (103), (104) называют краевой.

Пусть функции $f(x)$ и $q(x)$ непрерывны на отрезке $[a,b]$, причем

$$q(x) \ge q_0 > 0. \tag{105}$$

При сделанных предположениях, как известно из курса дифференциальных уравнений, решение задачи (103), (104) существует и является единственным.

Перейдем к обсуждению вопросов, связанных с его расчетом с помощью численного метода. Возьмем некоторое целое число n, введем шаг $h = (b-a)/n$ и построим сетку

$$x_i = a + ih, \quad 0 \le i \le n. \tag{106}$$

Заменим дифференциальное уравнение (103) его разностным аналогом. В результате получим следующую задачу:

$$\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} - q_i y_i = -f_i, \quad 1 \le i \le n-1, \tag{107}$$

$$y_0 = u_0, \quad y_n = u_2. \tag{108}$$

Здесь $q_i = q(x_i)$, $f_i = f(x_i)$, граничные условия (108) для сеточной функции $\{y_i\}$ взяты такими же, что и в дифференциальной задаче.

Разностные уравнения (107) можно переписать в виде

$$y_{i-1} - \left(2 + q_i h^2\right) y_i + y_{i+1} = -f_i h^2, \quad 1 \le i \le n-1. \tag{109}$$

Мы получили линейную систему из $(n-1)$-го уравнения с $(n-1)$-им неизвестным y_i, $1 \le i \le n-1$. Значения y_0 и y_n неизвестными не являются: они задаются граничными условиями (108).

Между разностными схемами для задачи Коши и для краевой задачи есть существенное различие. В первом случае для определения сеточной функции $\{y_i\}$ мы имели рекуррентные соотношения, которые позволяли последовательно рассчитать все ее значения. Такие разностные схемы называются явными. В краевой задаче (107),

(108) сеточная функция $\{y_i\}$ определяется из решения системы линейных алгебраических уравнений. Такая разностная схема называется неявной.

Из записи разностных уравнений в форме (109) видно, что мы получили систему уравнений с трехдиагональной матрицей с диагональным преобладанием: диагональный элемент $\left(2+q_i h^2\right)$ больше суммы двух других элементов той же строки, равной 2. Системы такого типа мы уже встречали в третьей главе в связи с задачей интерполяции кубическим сплайном. Диагональное преобладание гарантирует существование и единственность решения системы, которое может быть построено методом прогонки.

Перейдем к обсуждению основного вопроса: с какой точностью сеточная функция $\{y_i\}$, полученная в результате решения задачи (107), (108), приближает решение краевой задачи (103), (104). Пусть $u(x)$ решение исходной краевой задачи. Обозначим через $u_i = u(x_i)$ его значения в узлах сетки и введем две сеточные функции: погрешность решения и погрешность аппроксимации уравнения

$$z_i = y_i - u_i, \quad 0 \le i \le n, \tag{110}$$

$$\psi_i = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} - q_i u_i + f_i, \quad 1 \le i \le n-1. \tag{111}$$

Выразим из соотношения (110) y_i через u_i и z_i и подставим в разностное уравнение (107). Оставим члены, содержащие z_i, слева, а остальные члены перенесем направо. В результате получим

$$\frac{z_{i-1} - 2z_i + z_{i+1}}{h^2} - q_i z_i = -\left\{\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} - q_i u_i + f_i\right\} = -\psi_i, \; 1 \le i \le n-1. \tag{112}$$

Граничные условия в дифференциальной и разностной задачах совпадают, так что значения сеточной функции z_i в граничных точках будут нулевыми

$$z_0 = z_n = 0. \tag{113}$$

Мы не можем рассчитать погрешность $\{z_i\}$, решая задачу (112), (113), поскольку в правые части уравнений входят неизвестные величины u_i и ψ_i. Однако задача (112), (113) позволяет оценить погрешность.

Пусть максимальное по модулю число z_i соответствует индексу $i = j$:

$$\|\mathbf{z}\|_c = |z_j| \ge |z_i|, \; 0 \le i \le n. \tag{114}$$

В граничных точках z_i обращается в ноль (113), так что индекс j не равен ни нулю, ни n. Рассмотрим уравнение (112) для этого значения индекса и запишем его в виде:

$$\left(2 + q_j h^2\right) z_j = z_{j-1} + z_{j+1} + \psi_j h^2. \tag{115}$$

Возьмем модуль от обеих частей равенства и оценим правую часть сверху

$$\left(2 + q_j h^2\right)|z_j| = \left(2 + q_j h^2\right)\|\mathbf{z}\|_c \le |z_{j-1}| + |z_{j+1}| + |\psi_j| h^2 \le 2\|\mathbf{z}\|_c + 2\|\boldsymbol{\psi}\|_c h^2$$

или

$$\|\mathbf{z}\|_c \le \frac{1}{q_0}\|\boldsymbol{\psi}\|_c. \tag{116}$$

Здесь мы сократили одинаковые члены слева и справа, разделили обе части неравенства на множитель $q_j h^2$ и заменили q_j в знаменателе на минимально возможное значение функции $q(x)$ на отрезке $[a,b]$, равное q_0 (105). Таким образом нам удалось оценить погрешность решения $\|\mathbf{z}\|_c$ через погрешность аппроксимации уравнения $\|\boldsymbol{\psi}\|_c$.

Для оценки погрешности аппроксимации уравнения предположим, что функции $f(x)$ и $q(x)$ дважды непрерывно дифференцируемы на отрезке $[a,b]$. В этом случае уравнение (103) допускает двухкратное дифференцирование, что обеспечивает существование у решения краевой задачи (103), (104) четырех непрерывных производных и позволяет написать разложения

$$\begin{aligned} u_{i-1} &= u_i - u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 - \frac{1}{6}u'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}u^{(4)}\left(x_i - \tilde{\theta}_i h\right)h^4, \\ u_{i+1} &= u_i + u'(x_i)h + \frac{1}{2}u''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}u'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}u^{(4)}\left(x_i + \tilde{\tilde{\theta}}_i h\right)h^4. \end{aligned} \qquad (117)$$

Подставляя их в формулу (111), получим следующее выражение для ψ_i:

$$\psi_i = \left\{u''(x_i) - q_i u_i + f_i\right\} + \frac{h^2}{24}\left\{u^{(4)}\left(x_i - \tilde{\theta}_i h\right) + u^{(4)}\left(x_i + \tilde{\tilde{\theta}}_i h\right)\right\}. \qquad (118)$$

Выражение в первых фигурных скобках равно нулю в силу дифференциального уравнения (103). В результате в правой части формулы (118) остается только вторая группа членов, обязанная своим происхождением остаточным членам в разложениях (117). Оценим ее следующим образом. Функция $u^{(4)}(x)$ непрерывна и, следовательно, ограничена на отрезке $[a,b]$. Пусть

$$\left|u^{(4)}(x)\right| \le M_4, \quad a \le x \le b, \qquad (119)$$

тогда из формул (116) и (118) получаем

$$\|\boldsymbol{\psi}\|_c \le \frac{M_4}{12}h^2, \ \|\mathbf{z}\|_c \le \frac{M_4}{12 q_0}h^2. \qquad (120)$$

Мы видим, что разностная схема (107) обеспечивает второй порядок аппроксимации уравнения и, как следствие неравенства (116), второй порядок точности для погрешности решения.

Задача 6.

Рассмотреть на отрезке $[-1,1]$ *краевую задачу*

$$u'' - u = -1, \qquad (121)$$

$$u(-1) = u(1) = 0. \qquad (122)$$

Выписать и решить соответствующую разностную задачу с шагом $h = 0.5$. *Сравнить решение разностной задачи с аналитическим решением*

$$u(x) = 1 - \frac{chx}{ch1}. \qquad (123)$$

Система трех уравнений относительно y_1, y_2, y_3 с учетом нулевых граничных условий имеет вид

$$\begin{cases} -2.25y_1 + y_2 = -0.25 \\ y_1 - 2.25y_2 + y_3 = -0.25. \\ y_2 - 2.25y_3 = -0.25 \end{cases} \tag{124}$$

Решение системы (124), как и решение исходной дифференциальной задачи, симметрично относительно средней точки, так что $u_1 = u_3$. С учетом этой особенности система (124) сводится к системе двух уравнений с двумя неизвестными:

$$-2.25y_1 + y_2 = -0.25$$

$$2y_1 - 2.25y_2 = -0.25,$$

решение которой имеет вид

$$y_1 = y_3 = \frac{0.8125}{3.0625} = 0.265306, \; y_2 = \frac{1.0625}{3.0625} = 0.346939.$$

В таблице 3 приведены значения x_i, соответствующие узлам сетки, решение разностной задачи y_i, аналитическое решение (123), вычисленное в узлах сетки $u_i = u(x_i)$, погрешность решения z_i (110) и погрешность аппроксимации уравнения ψ_i (111). Согласно двум последним столбцам

$$\|\mathbf{z}\|_c = 0.005007, \; \|\boldsymbol{\psi}\|_c = 0.015352 \tag{125}$$

Таблица 3

x_i	y_i	$u(x_i)$	z_i	ψ_i
-1,0	0,000000	0,000000	0,000000	
-0,5	0,265306	0,269237	-0,003931	-0,015352
0,0	0,346939	0,351946	-0,005007	-0,013614
0,5	0,265306	0,269237	-0,003931	-0,015352
1,0	0,000000	0,000000	0,000000	

Погрешность аппроксимации уравнения $\boldsymbol{\psi}$ определена только для внутренних точек сетки, поэтому первая и последняя строчки последнего столбца остались незаполненными.

Теперь обратимся к теоретической оценке погрешности решения и погрешности аппроксимации уравнения (120). В данном случае

$$u^{(4)}(x) = -\frac{chx}{ch1}, \text{ так что } \left|u^{(4)}(x)\right| \le M_4 = 1.$$

В результате оценки (120) с учетом того, что $q = 1$, дают

$$\|\mathbf{z}\|_c \le \frac{0.25}{12} = 0.020833, \; \|\boldsymbol{\psi}\|_c \le \frac{0.25}{12} = 0.020833.$$

Это согласуется с фактическими значениями погрешности (125), подсчитанными непосредственно по известному решению краевой задачи (123).