Глава 2

МНОГОШАГОВЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

1. Общее представление многошаговых методов. В данной главе мы рассматриваем численные методы решения задачи Коши (1.1), (1.2), которые могут быть заданы формулой

$$y_{n+k} = F(f;\ x_{n+k}, x_{n+k-1}, \ldots, x_n;\ y_{n+k}, y_{n+k-1}, \ldots, y_n). \tag{1}$$

Здесь значение решения y_{n+k} в точке x_{n+k} определяется через значения решения в k точках, предшествующих x_{n+k}. Такой метод называется k-шаговым.

Из класса (1) выделим многошаговые методы вида

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n+i} = h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i}), \quad \alpha_k \neq 0, \tag{2}$$

применяемые на сетке с постоянным шагом

$$x_n = x_0 + n\,h, \quad n = 0, 1, 2, \ldots, N_h, \quad N_h = \left[\frac{X}{h}\right]. \tag{3}$$

Разность между наибольшим и наименьшим значениями индекса неизвестной функции y_n, входящей в уравнение (2), равна k. Поэтому соотношение (2) является разностным уравнением k-го порядка, общее решение которого зависит от k параметров. Чтобы выделить единственное решение этого уравнения, необходимо задать k дополнительных условий на функцию y_n. Этими дополнительными условиями являются значения функции y_n при $n = 0, 1, \ldots, k-1$:

$$y_0 = g_0, \quad y_1 = g_1, \quad \ldots, \quad y_{k-1} = g_{k-1}, \tag{4}$$

которые предполагаются известными.

Используя значения (4), из уравнения (2) при $n = 0$ можно найти y_k, затем, используя значения $g_1, \ldots, g_{k-1}, y_k$ и полагая в (2) $n = 1$, найти y_{k+1} и т. д. Таким образом, данный метод численного решения дифференцального уравнения (1.1), (1.2) состоит в решении разностной задачи Коши для разностного уравнения (2) и начальных условий (4).

Если искомое решение y_{n+k} входит в правую часть этого уравнения, что бывает, когда $\beta_k \neq 0$, то формула (2) определяет *неявный* метод. Если $\beta_k = 0$, то искомое решение в правую часть не входит и уравнение (2) может быть разрешено относительно y_{n+k}. В этом случае формула (2) определяет *явный* метод.

Введем в рассмотрение многочлены

$$\rho(z) = \sum_{i=0}^{k} \alpha_i z^i, \tag{5}$$

$$\sigma(z) = \sum_{i=0}^{k} \beta_i z^i, \tag{6}$$

и оператор E сдвига по узлам:

$$E\,y_n = y_{n+1}, \quad E^i y_n = y_{n+i}.$$

Тогда уравнение (2) может быть представлено в виде

$$\rho(E)\,y_n = h\,\sigma(E)\,f_n, \tag{7}$$

где $f_n = f(x_n, y_n)$.

Наряду с (2) и (7) мы будем пользоваться также следующей записью разностного уравнения:

$$\sum_{i=0}^{k} \frac{\alpha_i y_{n+i}}{h} = \sum_{i=0}^{k} \beta_i\, f(x_{n+i}, y_{n+i}). \tag{8}$$

Уравнения (2), (7) и (8) называются также *конечно-разностными схемами*.

2. Построение разностных схем методом неопределенных коэффициентов. Коэффициенты α_i и β_i выбираются таким образом, чтобы разностное уравнение (2) аппроксимировало дифференциальное уравнение (1.1) с достаточно гладкой правой частью с некоторым порядком s. Это означает, что невязка ρ, которая получается после подстановки точного решения $y(x)$ дифференциального уравнения (1.1) в разностное уравнение (2):

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y(x_{n+i}) - h\sum_{i=0}^{k} \beta_i y'(x_{n+i}) = \rho_{n+k}, \tag{9}$$

является величиной $O(h^{s+1})$. Число s называется *порядком аппроксимации*, или *степенью* разностного уравнения (2). Величина

$$r_{n+k} = \frac{\rho_{n+k}}{h} \tag{10}$$

называется *погрешностью аппроксимации* дифференциального уравнения (1.1) разностным уравнением (2).

Другими словами, погрешность аппроксимации – это невязка, которая получается после подстановки точного решения дифференциального уравнения в разностное уравнение (8).

Если воспользоваться формулой Тейлора для $y(x_{n+i})$ и $y'(x_{n+i})$:

$$\begin{aligned} y(x_{n+i}) &= \sum_{j=0}^{s+1} \frac{(ih)^j}{j!}\, y^{(j)}(x_n) + O(h^{s+2}), \\ y'(x_{n+i}) &= \sum_{j=0}^{s} \frac{(ih)^j}{j!}\, y^{(j+1)}(x_n) + O(h^{s+1}), \end{aligned} \tag{11}$$

то после подстановки (11) в (9) может быть получено разложение величины ρ_{n+k} по степеням h:

$$\begin{aligned} \rho_{n+k} = \Big(\sum_{i=0}^{k} \alpha_i\Big) y(x_n) &+ h\Big(\sum_{i=1}^{k} i\alpha_i - \sum_{i=0}^{k} \beta_i\Big) y'(x_n) + \\ &+ \frac{h^2}{2}\Big(\sum_{i=1}^{k} i^2\alpha_i - 2\sum_{i=1}^{k} i\beta_i\Big) y''(x_n) + \ldots + \\ &+ \frac{h^s}{s!}\Big(\sum_{i=1}^{k} i^s\alpha_i - s\sum_{i=1}^{k} i^{s-1}\beta_i\Big) y^{(s)}(x_n) + \\ &+ \frac{h^{s+1}}{(s+1)!}\Big(\sum_{i=1}^{k} i^{s+1}\alpha_i - (s+1)\sum_{i=1}^{k} i^s\beta_i\Big) y^{(s+1)}(x_n) + O(h^{s+2}). \end{aligned} \tag{12}$$

Из (12) видно, что, для того чтобы величина ρ_{n+k} имела порядок $O(h^{s+1})$, необходимо выполнение условий

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=0}^{k} \alpha_i & = \ 0, \\ \sum\limits_{i=1}^{k} i\alpha_i - \sum\limits_{i=0}^{k} \beta_i & = \ 0, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots & \\ \sum\limits_{i=1}^{k} i^{\nu}\alpha_i - \nu \sum\limits_{i=1}^{k} i^{\nu-1}\beta_i & = \ 0, \quad \nu = 2, 3, \dots, s. \end{cases} \tag{13}$$

Предполагаем, что коэффициенты α_i, β_i удовлетворяют условиям (13) при некотором $s \geq 1$, так что всегда выполняются первые два коэффициентных условия (13).

Подчеркнем, что степень s разностного уравнения (2) определяется только коэффициентами α_i и β_i этого уравнения и не зависит от того конкретного дифференциального уравнения, для решения которого оно применяется. Поэтому, если правая часть дифференциального уравнения (1.1) обладает достаточной гладкостью (а мы в дальнейшем предполагаем, что функция $f(x, y)$ имеет непрерывные частные производные до порядка $s + 1$ включительно и, следовательно, $y(x)$ — непрерывные производные до порядка $s + 2$), то невязка (9) и погрешность аппроксимации (10) на решении такого дифференциального уравнения запишутся в виде

$$\begin{aligned} \rho_{n+k} &= \frac{h^{s+1}}{(s+1)!} \left(\sum_{i=1}^{k} i^{s+1}\alpha_i - (s+1) \sum_{i=1}^{k} i^{s}\beta_i \right) y^{(s+1)}(x_n) + O(h^{s+2}) = \\ &= C_{s+1} h^{s+1} y^{(s+1)}(x_n) + O(h^{s+2}), \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned} r_{n+k} &= \frac{h^{s}}{(s+1)!} \left(\sum_{i=1}^{k} i^{s+1}\alpha_i - (s+1) \sum_{i=1}^{k} i^{s}\beta_i \right) y^{(s+1)}(x_n) + O(h^{s+1}) = \\ &= C_{s+1} h^{s} y^{(s+1)}(x_n) + O(h^{s+1}). \end{aligned} \tag{15}$$

где

$$C_{s+1} = \frac{1}{(s+1)!} \left(\sum_{i=1}^{k} i^{s+1}\alpha_i - (s+1) \sum_{i=1}^{k} i^{s}\beta_i \right).$$

Если же решение дифференциального уравнения не обладает нужным числом производных, то невязка (9) и погрешность аппроксимации (10) имеют, вообще говоря, меньший порядок по h и оценки (14), (15) не выполняются.

Для того чтобы величина ρ_{n+k} и погрешность аппроксимации не изменялись при умножении разностного уравнения (2) на произвольную постоянную, вводится нормировка разностного уравнения с помощью дополнительных условий, налагаемых на коэффициенты уравнения. Обычно полагают

$$\alpha_k = 1 \tag{16}$$

или

$$\sum_{i=0}^{k} \beta_i = 1. \tag{17}$$

При выполнении условия (16) уравнение (2) может быть записано в виде

$$y_{n+k} = -\sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i y_{n+i} + h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i}). \tag{18}$$

В этом случае невязка p_{n+k} (9) называется *локальной погрешностью* формулы (18).

В качестве примера использования условий (13) для построения разностной схемы (2) попробуем найти явный и неявный двухшаговые методы максимально возможной степени, т.е. попытаемся построить разностные схемы

$$y_{n+2} + \alpha_1 y_n + \alpha_0 y_n = h(\beta_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \beta_0 f(x_n, y_n)) \tag{19}$$

и

$$y_{n+2} + \alpha_1 y_{n+1} + \alpha_0 y_n = h\,(\beta_2 f(x_{n+2}, y_{n+2}) + \beta_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \beta_0 f(x_n, y_n)), \tag{20}$$

с наивысшим порядком аппроксимирующие дифференциальное уравнение (1.1).

Коэффициенты α_i и β_i явной схемы (19) должны удовлетворять системе уравнений (13), которая в данном случае имеет вид

$$\begin{cases} 1 + \alpha_1 + \alpha_0 & = \ 0, \\ 2 + \alpha_1 - \beta_0 - \beta_1 & = \ 0, \\ 4 + \alpha_1 - 2\beta_1 & = \ 0, \\ 8 + \alpha_1 - 3\beta_1 & = \ 0, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots & \end{cases}$$

Решая совместно первые четыре уравнения этой системы, находим $\alpha_0 = -5$, $\alpha_1 = 4$, $\beta_0 = 2$, $\beta_1 = 4$. Уравнение из системы (13), соответствующее $\nu = 4$,

$$16 + \alpha_1 - 4\beta_1 = 0$$

не выполняется при найденных значениях коэффициентов. Таким образом, искомая разностная схема (19) имеет степень 3 и записывается в виде

$$y_{n+2} + 4y_{n+1} - 5y_n = h(4f(x_{n+1}, y_{n+1}) + 2f(x_n, y_n)). \tag{21}$$

Коэффициенты неявной схемы (20) должны удовлетворять следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} 1 + \alpha_1 + \alpha_0 & = \ 0, \\ 2 + \alpha_1 - \beta_0 - \beta_1 - \beta_2 & = \ 0, \\ 4 + \alpha_1 - 2(\beta_1 + 2\beta_2) & = \ 0, \\ 8 + \alpha_1 - 3(\beta_1 + 4\beta_2) & = \ 0, \\ 16 + \alpha_1 - 4(\beta_1 + 8\beta_2) & = \ 0, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots & \end{cases}$$

Решая совместно первые пять уравнений, находим $\alpha_0 = -1$, $\alpha_1 = 0$, $\beta_0 = \dfrac{1}{3}$, $\beta_1 = \dfrac{4}{3}$, $\beta_2 = \dfrac{1}{3}$. Уравнение из системы (13), соответствующее $\nu = 5$,

$$32 + \alpha_1 - 5(\beta_1 + 16\beta_2) = 0$$

не выполняется при найденных значениях коэффициентов. Таким образом, искомая разностная схема (20) имеет степень 4 и записывается в виде

$$y_{n+2} - y_n = \frac{h}{3}\,(f(x_{n+2}, y_{n+2}) + 4f(x_{n+1}, y_{n+1}) + f(x_n, y_n)). \tag{22}$$

3. Устойчивость многошаговых методов. Нам нужны сходящиеся методы (2). Метод (2) *сходится*, если для каждой задачи из рассматриваемого класса (1.1), (1.2)

$$\max_{k \leq n \leq N_h} |y(x_n) - y_n| \to 0 \tag{23}$$

при

$$h \to 0,$$
$$\max_{0 \le n \le k-1} |y(x_n) - y_n| \to 0. \tag{24}$$

То обстоятельство, что разностная схема (2) аппроксимирует дифференциальное уравнение (1.1) с некоторым порядком $s \ge 1$, еще, вообще говоря, не означает, что решение разностной задачи (2), (4) сходится к решению дифференциальной задачи (1.1), (1.2). Чтобы это проиллюстрировать, рассмотрим задачу Коши

$$\begin{cases} y'(x) = -x^3, \quad 0 \le x \le X < \infty, \\ y(0) \ = 0. \end{cases} \tag{25}$$

Правая часть дифференциального уравнения (25) сколь угодно раз дифференцируема. Будем решать эту задачу с помощью явного метода (21) третьего порядка аппроксимации, а в качестве начальных условий (4) возьмем точные начальные значения

$$\begin{cases} y_0 = y(0) = 0, \\ y_1 = y(h) = -\dfrac{h^4}{4}. \end{cases} \tag{26}$$

Разностное уравнение (21) для данной задачи запишется в виде

$$y_{n+2} + 4y_{n+1} - 5y_n = -h^4(6n^3 + 12n^2 + 12n + 4). \tag{27}$$

Оно является линейным разностным уравнением с постоянными коэффициентами. Общее решение (27) представляет собой сумму общего решения однородного уравнения

$$y_{n+2} + 4y_{n+1} - 5y_n = 0 \tag{28}$$

и частного решения неоднородного уравнения (27). Общее решение однородного уравнения (28) выражается через корни характеристического уравнения

$$z^2 + 4z - 5 = 0 \tag{29}$$

и имеет вид

$$y_n^0 = C_1 + C_2(-5)^n. \tag{30}$$

Нетрудно убедиться, что частным решением неоднородного уравнения (27) является функция

$$\overline{y}_n = -\frac{(hn)^4}{4} + \frac{h^4 n}{6}. \tag{31}$$

Таким образом, общее решение (27) записывается в виде

$$y_n = C_1 + C_2(-5)^n - \frac{(hn)^4}{4} + \frac{h^4 n}{6}, \tag{32}$$

где константы C_1 и C_2 определяются из начальных условий (26):

$$C_1 = -\frac{h^4}{36}, \quad C_2 = \frac{h^4}{36} \tag{32$'$}$$

Окончательно получаем

$$y_n = -\frac{h^4}{36} + \frac{h^4}{36}(-5)^n - \frac{(hn)^4}{4} + \frac{h^4 n}{6}. \tag{33}$$

Рассмотрим решение (33) задачи (27), (26) при фиксированном $x_n = nh = x^*$. Если $h \to 0$, то частное решение (31) неоднородного уравнения (27) стремится к точному решению задачи (25):

$$\overline{y}_n \to -\frac{(x^*)^4}{4} = y(x^*).$$

Решение (30) однородного уравнения (28), колеблясь, неограниченно возрастает по модулю

$$|y_n^0| \to \infty$$

из-за слагаемого

$$\frac{h^4}{36}\,(-5)^n.$$

Таким образом, построенное численное решение (33) разностной задачи (27), (26) не сходится к решению дифференциальной задачи (25).

Если вместо точных начальных условий (26) выбрать для разностного уравнения (27) специальные начальные условия

$$\begin{cases} y_0 = 0, \\ y_1 = -\dfrac{h^4}{12}, \end{cases} \tag{34}$$

то $C_1 = C_2 = 0$ и $y_n \to y(x^*)$. Однако условия (34) в действительности не могут улучшить ситуацию и обеспечить сходимость численного решения к точному решению задачи (25). На самом деле из-за ошибок округления находится решение не уравнения (27), а уравнения с возмущением

$$y_{n+2} + 4y_{n+1} - 5y_n = -h^4(6n^3 + 12n^2 + 12n + 4) + \delta. \tag{35}$$

Предположим, что $\delta = \delta(h) = O(h^q)$. Тогда общее решение (35) запишется в виде

$$y_n = C_1 + C_2(-5)^n - \frac{(hn)^4}{4} + \frac{h^4 n}{6} + \frac{n\delta(h)}{6}. \tag{36}$$

Если C_1 и C_2 определить из специальных начальных условий (34), то

$$C_1 = -\frac{\delta(h)}{36}, \quad C_2 = \frac{\delta(h)}{36} \tag{36$'$}$$

и, как видно из (36), опять нет сходимости из-за того же слагаемого

$$\frac{\delta(h)}{36}\,(-5)^n.$$

Отсутствие сходимости заключается в принципиальном отличии дифференциального уравнения (25) от разностного уравнения (27). Порядок дифференциального уравнения равен единице, а порядок разностного уравнения равен двум. Уравнение (27) имеет два фундаментальных решения 1 и $(-5)^n$, соответствующие двум корням характеристического уравнения (29) $z_1 = 1$ и $z_2 = -5$. Дифференциальное уравнение (25) имеет одно фундаментальное решение $y(x) = 1$, которое аппроксимируется решением $y_n = z_1^n = 1$ разностного уравнения. Можно сказать, что составляющая $C_2 z_2^n = C_2(-5)^n$, соответствующая второму фундаментальному решению разностного уравнения, носит *паразитический* характер. Ее влияние приводит к катастрофическому искажению результата.

Вернемся к общему разностному уравнению (2) и рассмотрим алгебраическое уравнение

$$\rho(z) = 0, \tag{37}$$

где $\rho(z)$ — многочлен, определяемый по формуле (5). Уравнение (37) называется *характеристическим уравнением*, а многочлен $\rho(z)$ — *характеристическим многочленом* разностного уравнения (2).

Допустим, что у многочлена $\rho(z)$ имеется корень z_1, такой, что $|z_1| > 1$, или кратный корень z_2, такой, что $|z_2| = 1$. Применим многошаговый метод (2) к решению задачи Коши

$$y' = 0, \quad y(x_0) = 0. \tag{38}$$

Формула (2) примет вид

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i \, y_{n+i} = 0. \tag{39}$$

В качестве начальных условий для (39) возьмем начальные значения

$$y_0 = h, \quad y_1 = hz_1, \quad y_2 = hz_1^2, \quad \ldots, \quad y_{k-1} = hz_1^{k-1}.$$

Тогда решением уравнения (39) будет сеточная функция

$$y_n = hz_1^n.$$

Если зафиксировать узел $x_n = x_0 + nh = x$, то при $h \to 0$

$$|y_n| = h|z_1|^n = \frac{x - x_0}{n} \, |z_1|^n \to \infty.$$

При наличии кратного корня z_2 в качестве начальных условий для (39) возьмем следующие начальные условия:

$$y_0 = h, \quad y_1 = hz_2, \quad y_1 = 2hz_2^2, \quad \ldots, \quad y_{k-1} = (k-1)hz_2^{k-1}.$$

Тогда решением уравнения (39) будет функция

$$y_n = nhz_2^n.$$

При фиксированном узле $x_n = x_0 + nh = x$ имеем

$$|y_n| = nh|z_2|^n = nh = x - x_0 \neq 0.$$

В обоих случаях решение разностного уравнения не стремится при $h \to 0$ к решению дифференциального уравнения (38), которое тождественно равно нулю. Следовательно, метод (2) не является сходящимся.

Из сказанного выше можно сделать вывод, что не все методы (2), коэффициенты которых удовлетворяют условиям (13), пригодны для численного решения задачи Коши (1.1), (1.2). Среди методов (2) следует забраковать те, для которых характеристический многочлен (5) имеет корни, по модулю большие единицы, или кратные корни, по модулю равные единице.

В связи с этим формулу (2) называют *устойчивой*, если все корни характеристического многочлена (5) расположены в единичном круге на комплексной плоскости с центром в начале координат, а на границе круга нет кратных корней.

Первое условие системы (13) означает, что характеристический многочлен (5) всегда имеет корень $z_1 = 1$. Для устойчивой формулы (2) этот корень называется *главным*. Все остальные $k - 1$ корней называются *посторонними*. Если характеристический многочлен не имеет больше корней на границе, а все посторонние корни лежат внутри единичного круга, то устойчивая формула (2) называется *сильно устойчивой*. Если есть посторонние корни на границе и все они простые, то устойчивая формула называется *слабо устойчивой*.

4. Некоторые явные конечно-разностные формулы. Рассмотрим примеры широко распространенных конечно-разностных формул. Эти формулы имеют следующие коэффициенты:

$$\alpha_k = 1, \quad \alpha_{k-1} = -1, \quad \alpha_{k-2} = \ldots = \alpha_0 = 0,$$

так что

$$y_{n+k} - y_{n+k-1} = h\sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i}).$$

Обозначим $n + k = m + 1$, тогда

$$y_{m+1} - y_m = h\sum_{j=0}^{k} \beta_{k-j} f(x_{m+1-j}, y_{m+1-j}).$$

Переходя от m к n, от j к i и обозначая $\beta_{k-i} = b_i$, получаем

$$y_{n+1} - y_n = h\sum_{i=0}^{k} b_i f(x_{n+1-i}, y_{n+1-i}). \tag{40}$$

В явных формулах неизвестное значение y_{n+1} не входит в правую часть, поэтому явные формулы записываются в виде

$$y_{n+1} - y_n = h\sum_{i=0}^{k} B_i f(x_{n-i}, y_{n-i}). \tag{41}$$

4.1. Экстраполяционная формула Адамса. Коэффициенты B_i в (41) выберем так, чтобы формула (41) имела максимальную степень, или максимальный порядок аппроксимации дифференциального уравнения (1.1) с достаточно гладкой правой частью. Система линейных уравнений (13), которой должны удовлетворять коэффициенты B_i, имеет $k+1$ неизвестных B_i. Определитель системы, составленный из первых $k+1$ уравнений, содержащих эти неизвестные, есть определитель Вандермонда. Следовательно, коэффициенты B_i определяются из этой системы единственным образом.

Итак, для любого k существует явная разностная формула (41) $(k+1)$-й степени, аппроксимирующая дифференциальное уравнение (1.1) с достаточно гладкой правой частью с $(k+1)$-м порядком. Эта формула называется *явной*, или *экстраполяционной*, формулой *Адамса.*

Формула (41) может быть получена другим способом, если исходить не из дифференциального уравнения (1.1), а из интегрального соотношения

$$y(x_{n+1}) - y(x_{n-j}) = \int\limits_{x_{n-j}}^{x_{n+1}} f(x, y(x))\, dx = \int\limits_{x_{n-j}}^{x_{n+1}} y'(x)\, dx. \tag{42}$$

Для этого аппроксимируем подынтегральную функцию одного переменного $f(x, y(x))$ алгебраическим интерполяционным многочленом, который в узлах x_m, $m = n-k, n-k+1, \ldots, n$, принимает значения $f(x_m, y(x_m))$. Запишем это многочлен в форме интерполяционного многочлена Лагранжа

$$L_{k,n} = \sum_{i=0}^{k} f(x_{n-i}, y(x_{n-i}))\, \Phi_i(x), \tag{43}$$

где

$$\Phi_i = \prod_{\substack{m=n-k \\ m\neq n-i}}^{n} \frac{x - x_m}{x_{n-i} - x_m}.$$

Заменим $y'(x)$ в (42) по формуле Лагранжа:

$$y'(x) = f(x, y(x)) = L_{k,n}(x) + r_{k,n}(x), \tag{44}$$

где

$$r_{k,n}(x) = \frac{y^{(k+2)}(\xi)}{(k+1)!} \prod_{m=n-k}^{n} (x - x_m),$$

ξ – промежуточная точка между x_{n-k} и x. Тогда

$$y(x_{n+1}) - y(x_{n-j}) = h \sum_{i=0}^{k} B_i f(x_{n-i}, y(x_{n-i})) + \rho_{n+1}, \tag{45}$$

где

$$B_i = \frac{1}{h} \int\limits_{x_{n-j}}^{x_{n+1}} \Phi_i(x)\, dx = \frac{(-1)^i}{i!(k-i)!} \int\limits_{-j}^{1} \frac{t(t+1)\ldots(t+k)}{t+i}\, dt,$$

$$\rho_{n+1} = \int\limits_{x_{n-j}}^{x_{n+1}} r_{k,n}(x)\, dx = \int\limits_{x_{n-j}}^{x_{n+1}} \frac{y^{(k+2)}(\xi(x))}{(k+1)!} \prod_{m=n-k}^{n} (x - x_m)\, dx = O(h^{k+2}), \tag{46}$$

B_i – вполне определенные числа, не зависящие ни от h, ни от x_n. Отбрасывая в (45) остаточный член, получаем разностное уравнение

$$y_{n+1} - y_{n-j} = h \sum_{i=0}^{k} B_i f(x_{n-i}, y_{n-i}), \tag{47}$$

аппроксимирующее дифференциальное уравнение (1.1) с порядком $k+1$. Разностное уравнение (41) получается из формулы (47) как частный случай при $j = 0$.

Несколько явных формул Адамса различной степени с указанием порядка разностного уравнения и коэффициента при главном члене погрешности ρ_{n+1} этих формул приведены в табл. 1.

Если интерполяционный многочлен представить в форме интерполяционного многочлена Ньютона для равных промежутков

$$L_{k,n}(x) = L_{k,n}(x_n + th) = \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_n \,\frac{t(t+1)\ldots(t+i-1)}{i!}, \tag{48}$$

где $\nabla^i f_n$ — конечная разность i-го порядка назад функции $y'(x) = f(x, y(x))$ в узле x_n, $x = x_n + th$, то формула численного интегрирования может быть получена в разностной форме. Заменим $y'(x)$ в (42) по формуле Ньютона

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)) = f(x_n + th, y(x_n + th)) = \\ &= \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_n \,\frac{t(t+1)\ldots(t+i-1)}{i!} + r_{k,n}(x) \end{aligned} \tag{49}$$

и положим $j = 0$. Тогда

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = h \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \nabla^i f_n + \rho_{n+1}, \tag{50}$$

где

$$\gamma_i = \frac{1}{i!} \int\limits_{0}^{1} t(t+1)\ldots(t+i-1)\, dt, \tag{51}$$

$$\begin{aligned} \rho_{n+1} &= \frac{h^{k+2}}{(k+1)!} \int\limits_{0}^{1} t(t+1)\ldots(t+k) y^{(k+2)}(\xi(x_n + th))\, dt = \\ &= \gamma_{k+1} h^{k+2} y^{(k+2)}(\eta) = \gamma_{k+1} h^{k+2} y^{(k+2)}(x_n) + O(h^{k+3}), \end{aligned} \tag{52}$$

η заключено между x_{n-k} и x_{n+1}. Отбрасывая в (50) остаточный член, получаем разностное уравнение, эквивалентное (41), но представленное в разностной форме:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h\sum_{i=0}^{k} \gamma_i \nabla^i f_n = \\ &= y_n + h\left(f_n + \frac{1}{2}\nabla f_n + \frac{5}{12}\nabla^2 f_n + \frac{3}{8}\nabla^3 f_n + \frac{251}{720}\nabla^4 f_n + \right.\\ &\left. + \frac{95}{288}\nabla^5 f_n + \frac{19087}{60480}\nabla^6 f_n + \frac{5257}{17280}\nabla^7 f_n + \ldots + \gamma_k \nabla^k f_n\right). \end{aligned} \tag{53}$$

4.2. Экстраполяционная формула Нистрёма. Если подынтегральную функцию $y'(x)$ в соотношении (42) заменить многочленом по формуле Ньютона (49) и положить $j = 1$, то это приведет к разностному уравнению

$$y_{n+1} = y_{n-1} + h\sum_{i=0}^{k} A_i \nabla^i f_n \tag{54}$$

с коэфициентами

$$A_i = \frac{1}{i!}\int_{-1}^{1} t(t+1)\ldots(t+i-1)\,dt.$$

Подставляя численные значения коэфициентов, имеем

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_{n-1} + h\left(2f_n + \frac{1}{3}\nabla^2 f_n + \frac{1}{3}\nabla^3 f_n + \frac{29}{90}\nabla^4 f_n + \frac{14}{45}\nabla^5 f_n + \ldots + A_k\nabla^k f_n\right) = \\ &= y_{n-1} + h\left(2f_n + \frac{1}{3}(\nabla^2 f_n + \nabla^3 f_n + \nabla^4 f_n + \nabla^5 f_n) - \right.\\ &\left. - \frac{1}{90}(\nabla^4 f_n + 2\nabla^5 f_n) + \ldots + A_k\nabla^k f_n\right). \end{aligned} \tag{55}$$

Формула (55) называется *экстраполяционной формулой Нистрёма.* Локальная погрешность формулы Нистрёма

$$\begin{aligned} \rho_{n+1} &= hA_{k+1}\nabla^{k+1} f_n + O(h^{k+3}) = hA_{k+1}h^{k+1}f^{(k+1)}(\eta, y(\eta)) + O(h^{k+3}) = \\ &= A_{k+1}h^{k+2}y^{(k+2)}(x_n) + O(h^{k+3}), \end{aligned} \tag{56}$$

η заключено между x_{n-k-1} и x_n.

Из-за простоты коэфициентов счет по формуле (55) реализуется проще, чем по формуле Адамса (53), особенно, если членами $\frac{h}{90}\nabla^4 f_n$, $\frac{2h}{90}\nabla^5 f_n$ и т.д. можно пренебречь.

От разностной формы (55) легко перейти к ординатной форме (47), заменяя конечные разности их выражениями через значения функции

$$\nabla^i f_n = \sum_{l=0}^{i}(-1)^l C_i^l f_{n-l}. \tag{57}$$

Несколько явных формул с указанием порядка разностного уравнения и степени, а также коэфициента при главном члене погрешности ρ_{n+1} приведены в табл. 1.

Таблица 1

Примеры конечно-разностных формул в ординатной форме

№	Формула	Порядок k	Степень s	Локальная погрешность $C_{s+1}\, h^{s+1} y^{(s+1)}(x_n)$
1	2	3	4	5
	Явные формулы Адамса			
1	$y_{n+1} = y_n + hf_n$	1	1	$\frac{1}{2}\, h^2 y^{(2)}$
2	$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{1}{2}\, h\,(3f_{n+1} - f_n)$	2	2	$\frac{5}{12}\, h^3 y^{(3)}$
3	$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{1}{12}\, h\,(23f_{n+2} - 16f_{n+1} + 5f_n)$	3	3	$\frac{3}{8}\, h^4 y^{(4)}$
4	$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{1}{24}\, h\,(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n)$	4	4	$\frac{251}{720}\, h^5 y^{(5)}$
5	$y_{n+5} = y_{n+4} + \frac{1}{720}\, h\,(1901f_{n+4} - 2774f_{n+3} + 2616f_{n+2} - 1274f_{n+1} + 251f_n)$	5	5	$\frac{95}{288}\, h^6 y^{(6)}$
	Формулы Нистрёма			
6	$y_{n+2} = y_n + 2hf_{n+1}$	2	2	$\frac{1}{3}\, h^3 y^{(3)}$
7	$y_{n+3} = y_{n+1} + \frac{1}{3}\, h\,(7f_{n+2} - 2f_{n+1} + f_n)$	3	3	$\frac{1}{3}\, h^4 y^{(4)}$
8	$y_{n+4} = y_{n+2} + \frac{1}{3}\, h\,(8f_{n+3} - 5f_{n+2} + 4f_{n+1} - f_n)$	4	4	$\frac{29}{90}\, h^5 y^{(5)}$
	Формулы Милна			
9	$y_{n+4} = y_n + \frac{4}{3}\, h\,(2f_{n+3} - f_{n+2} + 2f_{n+1})$	4	4	$\frac{14}{45}\, h^5 y^{(5)}$
10	$y_{n+6} = y_n + \frac{3}{10}\, h\,(11f_{n+5} - 14f_{n+4} + 26f_{n+3} - 14f_{n+2} + 11f_{n+1})$	6	6	$\frac{41}{140}\, h^7 y^{(7)}$
	Схема “3/8”			
11	$y_{n+4} = y_{n+1} + \frac{3}{8}\, h\,(7f_{n+3} - 3f_{n+2} + 5f_{n+1} - f_n)$	4	4	$\frac{27}{80}\, h^5 y^{(5)}$
	Формулы Хемминга			
	схема “1/2”			
12	$y_{n+4} = \frac{y_{n+3} + y_{n+2}}{2} + \frac{1}{48}\, h\,(119f_{n+3} - 99f_{n+2} + 69f_{n+1} - 17f_n)$	4	4	$\frac{161}{480}\, h^5 y^{(5)}$
	схема “2/3”			
13	$y_{n+4} = \frac{2y_{n+2} + y_{n+1}}{3} + \frac{1}{72}\, h\,(191f_{n+3} - 107f_{n+2} + 109f_{n+1} - 25f_n)$	4	4	$\frac{707}{2160}\, h^5 y^{(5)}$
	схема “1/3”			
14	$y_{n+4} = \frac{y_{n+3} + y_{n+2} + y_{n+1}}{3} + \frac{1}{36}\, h(91f_{n+3} - 63f_{n+2} + 57f_{n+1} - 13f_n)$	4	4	$\frac{121}{360}\, h^5 y^{(5)}$
	Неявные формулы Адамса			
15	$y_{n+1} = y_n + hf_{n+1}$	1	1	$-\frac{1}{2}\, h^2 y^{(2)}$
16	$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}\, h\,(f_{n+1} + f_n)$	1	2	$-\frac{1}{12}\, h^3 y^{(3)}$

Продолжение таблицы 1

1	2	3	4	5
17	$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{1}{12}\,h\,(5f_{n+2} + 8f_{n+1} - f_n)$	2	3	$-\frac{1}{24}\,h^4 y^{(4)}$
18	$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{1}{24}\,h\,(9f_{n+3} + 19f_{n+2} - 5f_{n+1} + f_n)$	3	4	$-\frac{19}{720}\,h^5 y^{(5)}$
19	$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{1}{720}\,h\,(251f_{n+4} + 646f_{n+3} - 264f_{n+2} + 106f_{n+1} - 19f_n)$	4	5	$-\frac{3}{160}\,h^6 y^{(6)}$
	Неявные формулы Милна			
20	$y_{n+2} = y_n + \frac{1}{3}\,h\,(f_{n+2} + 4f_{n+1} + f_n)$	2	4	$-\frac{1}{90}\,h^5 y^{(5)}$
	схема “3/8”			
21	$y_{n+3} = y_n + \frac{3}{8}\,h\,(f_{n+3} + 3f_{n+2} + 3f_{n+1} + f_n)$	3	4	$-\frac{3}{80}\,h^5 y^{(5)}$
22	$y_{n+4} = y_n + \frac{2}{45}\,h\,(7f_{n+4} + 32f_{n+3} + 12f_{n+2} + 32f_{n+1} + 7f_n)$	4	6	$-\frac{8}{945}\,h^7 y^{(7)}$
23	$y_{n+5} = y_n + \frac{5}{288}\,h\,(19f_{n+5} + 75f_{n+4} + 50f_{n+3} + 50f_{n+2} + 75f_{n+1} + 19f_n)$	5	6	$-\frac{55}{24}\,h^7 y^{(7)}$
	Неявные формулы Хемминга схема “1/2”			
24	$y_{n+3} = \frac{y_{n+2} + y_{n+1}}{2} + \frac{1}{48}\,h\,(17f_{n+3} + 51f_{n+2} + 3f_{n+1} + f_n)$	3	4	$-\frac{3}{160}\,h^5 y^{(5)}$
	схема “2/3”			
25	$y_{n+3} = \frac{2y_{n+1} + y_n}{3} + \frac{1}{72}\,h\,(25f_{n+3} + 91f_{n+2} + 43f_{n+1} + 9f_n)$	3	4	$-\frac{43}{2160}\,h^5 y^{(5)}$
	схема “1/3”			
26	$y_{n+3} = \frac{y_{n+2} + y_{n+1} + y_n}{3} + \frac{1}{72}\,h\,(26f_{n+3} + 73f_{n+2} + 30f_{n+1} + 10f_n)$	3	4	$-\frac{1}{40}\,h^5 y^{(5)}$

4.3. Формулы Милна. Если в (47) положить $j = 3$, $k = 3$ (а это означает, что интегрируется по отрезку $[x_{n-3}, x_{n+1}]$ интерполяционный многочлен $L_{3,n}$, построенный по четырем точкам x_{n-3}, x_{n-2}, x_{n-1}, x_n), то получается разностное уравнение

$$y_{n+1} - y_{n-3} = \frac{4h}{3}\,(2f_n - f_{n-1} + 2f_{n-2}), \tag{58}$$

имеющее четвертую степень. Локальная погрешность формулы (58)

$$\rho_{n+1} = \frac{14}{45}\,h^5 y^{(5)}(x_n) + O(h^6). \tag{59}$$

Если в (47) положить $j = 5$, $k = 5$ (что означает интегрирование по отрезку $[x_{n-5}, x_{n+1}]$ интерполяционного многочлена $L_{5,n}$, построенного по шести узлам x_{n-5}, x_{n-4}, x_{n-3}, x_{n-2}, x_{n-1}, x_n), то получается разностное уравнение

$$y_{n+1} - y_{n-5} = \frac{3h}{10}\,(11f_n - 14f_{n-1} + 26f_{n-2} - 14f_{n-3} + 11f_{n-4}) \tag{60}$$

шестой степени. Погрешность формулы (60)

$$\rho_{n+1} = \frac{41}{140}\,h^7 y^{(7)}(x_n) + O(h^8). \tag{61}$$

Заметим, что формулы (58), (60) характеризуются расположением ординат, симметричным относительно средней ординаты. Они называются *формулами Милна.*

4.4. Схема "1/2". Если взять полусумму разностных уравнений (53) и (54), соответсвующих методам Адамса и Нистрёма, то получим новое разностное уравнение

$$y_{n+1} = \frac{1}{2}\left(y_n + y_{n-1}\right) + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{k}(\gamma_i + A_i) \bigtriangledown^i f_n. \tag{62}$$

Полагая в (62) $k = 3$ и подставляя численные значения коэффициентов γ_i и A_i, имеем

$$y_{n+1} = \frac{1}{2}\left(y_n + y_{n-1}\right) + h\left(\frac{3}{2} f_n + \frac{1}{4} \bigtriangledown f_n + \frac{3}{8} \bigtriangledown^2 f_n + \frac{17}{48} \bigtriangledown^3 f_n\right). \tag{63}$$

Переходя в (63) от конечных разностей к ординатам с помощью (57), получаем разностную формулу

$$y_{n+1} = \frac{1}{2}\left(y_n + y_{n-1}\right) + \frac{h}{48}\left(119 f_n - 99 f_{n-1} + 69 f_{n-2} - 17 f_{n-3}\right). \tag{64}$$

Конечно-разностная схема (64) называется схемой "1/2". Локальная погрешность этой схемы равна полусумме локальных погрешностей формул Адамса (53) и Нистрёма (54) при $k = 3$ и определяется равенством

$$\rho_{n+1} = \frac{161}{480} h^5 y^{(5)}(x_n) + O(h^6). \tag{65}$$

5. Часто используемые неявные разностные формулы. *5.1. Интерполяционная формула Адамса.* Коэфициенты b_i неявной формулы (40) выберем так, чтобы формула (40) имела максимальную степень. Система линейных уравнений (13), которой должны удовлетворять коэфициенты b_i, имеет $k+1$ неизвестных b_i. Определитель системы, состравленной из первых $k+1$ уравнений, содержащих эти неизвестные, есть определитель Вандермонда. Следовательно, коэфициенты b_i определяются из этой системы единственным образом.

Итак, для любого k существует неявная разностная формула (40) $(k+1)$ -й степени, аппроксимирующая дифференциальное уравнение (1.1) с достаточно гладкой правой частью с $(k+1)$ -м порядком. Эта формула называется *неявной*, или *интерполяционной*, формулой Адамса.

Как и явная формула (41), неявная формула (40) может быть получена с помощью интегрального соотношения (42). Для этого подынтегральную функцию одного переменного $f(x, y(x))$ аппроксимируем алгебраическим интерполяционным многочленом, который в узлах x_m, $m = n-k+1$, $n-k+2$, $\ldots$, $n+1$, принимает значения $f(x_m, y(x_m))$. Повторяя предыдущие рассуждения, мы придем к формуле

$$y_{n+1} - y_{n-j} = h\sum_{i=0}^{k} b_i f(x_{n+1-i}, y_{n+1-i}), \tag{66}$$

где

$$b_i = \frac{(-1)^i}{i!(k-i)!}\int_{-j}^{1} \frac{(t-1)t(t+1)\ldots(t+k-1)}{t+i-1}\, dt, \tag{67}$$

b_i – вполне определенные числа, не зависящие ни от h, ни от x_n. Локальная погрешность формулы (66)

$$\rho_{n+1} = \int_{x_{n-j}}^{x_{n+1}} \frac{y^{(k+2)}(\xi(x))}{(k+1)!} \prod_{m=n-k+1}^{n+1} (x - x_m)\, dx = O(h^{k+2}), \tag{68}$$

$\xi(x)$ заключено между x_{n-k+1} и x_{n+1}. Формула (40) получается из формулы (66) как частный случай при $j = 0$.

Несколько неявных формул Адамса различной степени с указанием порядка разностного уравнения и коэффициента при главном члене погрешности ρ_{n+1} приведены в табл. 1.

Если интерполяционный многочлен представить в форме интерполяционного многочлена Ньютона для равных промежутков

$$L_{k,n+1}(x) = L_{k,n+1}(x_n + th) = \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_{n+1} \frac{(t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)}{i!}, \tag{69}$$

где $\nabla^i f_{n+1}$ — конечная разность i-го порядка назад функции $y'(x) = f(x, y(x))$ в узле x_{n+1}, $x = x_n + th$, и положить $j = 0$, то придем к разностной форме неявной формулы Адамса

$$\begin{aligned} y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=0}^{k} \overline{\gamma}_i \nabla^i f_{n+1} = y_n + h \Big(f_{n+1} - \frac{1}{2} \nabla f_{n+1} - \\ - \frac{1}{12} \nabla^2 f_{n+1} - \frac{1}{24} \nabla^3 f_{n+1} - \frac{19}{720} \nabla^4 f_{n+1} - \frac{3}{160} \nabla^5 f_{n+1} - \\ - \frac{863}{60480} \nabla^6 f_{n+1} - \frac{275}{24192} \nabla^7 f_{n+1} - \ldots + \overline{\gamma_k} \nabla^k f_{n+1} \Big), \end{aligned} \tag{70}$$

где

$$\overline{\gamma}_i = \frac{1}{i!} \int_0^1 (t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)\,dt. \tag{71}$$

Для локальной погрешности формулы (70) справедливо равенство

$$\begin{aligned} \rho_{n+1} = \frac{h^{k+2}}{(k+1)!} \int_0^1 (t-1)t(t+1)\dots(t+k-1) y^{(k+2)}(\xi(x_n+th))\,dt = \\ = \overline{\gamma}_{k+1} h^{k+2} y^{(k+2)}(\eta) = \overline{\gamma}_{k+1} h^{k+2} y^{(k+2)}(x_n) + O(h^{k+3}), \end{aligned} \tag{72}$$

η заключено между x_{n-k+1} и x_{n+1}.

Из выражений (51), (71) для коэффициентов γ_i и $\overline{\gamma}_i$ непосредственно следует

$$\gamma_{i-1} + \overline{\gamma}_i = \gamma_i. \tag{73}$$

Суммируя (73), получаем

$$\sum_{i=0}^{i} \overline{\gamma}_i = \gamma_i. \tag{74}$$

Так как $\overline{\gamma}_i < 0$, а $\gamma_i > 0$, то из (73) следует, что γ_i монотонно убывают и

$$|\overline{\gamma}_i| < \gamma_i. \tag{75}$$

Отсюда следует, что константа в главном члене локальной погрешности у интерполяционной формулы Адамса всегда меньше, чем у экстраполяционной формулы Адамса той же степени.

Заметим, что коэффициент b_0 в формуле (40) удовлетворяет соотношению

$$b_0 = \sum_{i=0}^{k} \overline{\gamma}_i = \gamma_k. \tag{76}$$

5.2. Неявные формулы Милна. Класс разностных формул может быть получен интегрированием интерполяционного многочлена Ньютона (69) по отрезку $[x_{n-j}, x_{n+1}]$, $j \geq 1$. Это приводит к неявным разностным формулам Милна

$$y_{n+1} - y_{n-j} = h\sum_{i=0}^{k} a_i \nabla^i f_{n+1} \tag{77}$$

с коэфициентами

$$a_i = \frac{1}{i!} \int\limits_{-j}^{1} (t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)\,dt. \tag{78}$$

Локальная погрешность формулы Милна

$$\begin{aligned}\rho_{n+1} &= ha_{k+1} \nabla^{k+1} f_{n+1} + O(h^{k+3}) = ha_{k+1}h^{k+1}f^{(k+1)}(\eta, y(\eta)) + O(h^{k+3}) = \\ &= a_{k+1}h^{k+2}y^{(k+2)}(x_n) + O(h^{k+3}),\end{aligned} \tag{79}$$

η заключено между x_{n-k+1} и x_{n+1}.

Группа неявных формул Милна для нескольких значений j приведена в табл. 2. Выражая разности через значения функции с помощью (57), получим неявные формулы Милна в ординатной форме. Несколько таких формул для $k = j+1$ приведены в табл. 1 вместе с указанием порядка разностного уравнения и степени, а также коэффициента при главном члене локальной погрешности ρ_{n+1}.

Таблица 2

Примеры конечно-разностных формул в разностной форме

$$y_{n+1+l} - y_{n-j} = h\left(C_0 f_{n+1} + C_1 \frac{\nabla f_{n+1}}{2} + C_2 \frac{\nabla^2 f_{n+1}}{12} + C_3 \frac{\nabla^3 f_{n+1}}{24} + \right.$$
$$\left. + C_4 \frac{\nabla^4 f_{n+1}}{720} + C_5 \frac{\nabla^5 f_{n+1}}{1440} + C_6 \frac{\nabla^6 f_{n+1}}{60480} + C_7 \frac{\nabla^7 f_{n+1}}{120960}\right)$$

№	$y_{n+1+l} - y_{n-j}$	C_0	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7
Неявные методы ($l = 0$)									
1	$y_{n+1} - y_n$	1	-1	-1	-1	-19	-27	-863	-1375
2	$y_{n+1} - y_{n-1}$	2	-4	4	0	-8	-16	-592	-1024
3	$y_{n+1} - y_{n-2}$	3	-9	27	-9	-27	-27	-783	-1215
4	$y_{n+1} - y_{n-3}$	4	-16	80	-64	224	0	-512	-1024
5	$y_{n+1} - y_{n-4}$	5	-25	175	-225	2125	-475	-1375	-1375
Явные методы ($l = 1$)									
6	$y_{n+2} - y_{n+1}$	1	1	5	9	251	475	19087	36799
7	$y_{n+2} - y_n$	2	0	4	8	232	448	18224	35424

6. Особенности поведения многошаговых методов на больших интервалах интегрирования. Для формул Адамса (40), (41) характеристическое уравнение (37)

$$z^{n+1} - z^n = 0$$

имеет единственный корень $z_1 = 1$, а остальные корни равны нулю. Поэтому формулы Адамса являются сильно устойчивыми. Они имеют максимальную степень среди тех формул, у которых все посторонние корни равны нулю.

Для формул Нистрёма (55) и Милна (58), (60), (77) характеристическое уравнение (37)

$$z^{n+1} - z^{n-j} = 0 \quad (j \geq 1),$$

или

$$z^{n-j}(z^{j+1} - 1) = 0,$$

имеет помимо главного корня $z_1 = 1$ ещё и посторонние корни, по модулю равные единице. Поэтому формулы Нистрёма и Милна являются слабо устойчивыми.

Применим одну из таких слабо устойчивых формул

$$y_n - y_{n-2} = 2hf_{n-1} \tag{80}$$

к решению задачи Коши

$$\begin{cases} y'(x) = \lambda y + a, \quad \lambda < 0, \quad a = \text{const}, \\ y(0) \ = g_0. \end{cases} \tag{81}$$

Уравнение (81) асимптотически устойчиво и всякое его решение

$$y(x) = -\frac{a}{\lambda} + Ce^{\lambda x} = -\frac{a}{\lambda} + \Big(y(0) + \frac{a}{\lambda}\Big)e^{\lambda x} \tag{82}$$

стремится к постоянному решению

$$y = -\frac{a}{\lambda}$$

при $x \to \propto$. В данном случае разностное уравнение (80) приобретает вид

$$y_n - y_{n-2} = 2h(\lambda y_{n-1} + a),$$

или

$$y_n - 2h\lambda y_{n-1} - y_{n-2} - 2ah = 0. \tag{83}$$

В качестве начальных условий (4) для (83) возьмем значения точного решения (82)

$$y_0 = g_0, \quad y_1 = y(h). \tag{84}$$

Общее решение (83) можно выразить через корни z_1 и z_2 характеристического уравнения

$$z^2 - 2h\lambda z - 1 = 0, \tag{85}$$

а именно

$$y_n = C_1 z_1^n + C_2 z_2^n - \frac{a}{\lambda},$$

где

$$\begin{gathered} z_1 = h\lambda + \sqrt{h^2\lambda^2 + 1} = 1 + h\lambda + \frac{h^2\lambda^2}{2} + O(h^4) = e^{h\lambda} + O(h^3), \\ z_2 = h\lambda - \sqrt{h^2\lambda^2 + 1} = h\lambda - 1 - \frac{h^2\lambda^2}{2} + O(h^4) = \\ = -\left(1 - h\lambda + \frac{h^2\lambda^2}{2}\right) + O(h^4) = -e^{-h\lambda} + O(h^3), \\ 0 < z_1 < 1, \quad 1 < |z_2|. \end{gathered} \tag{86}$$

Определим постоянные C_1 и C_2 из начальных условий (84):

$$C_1 = \frac{y_1 + \dfrac{a}{\lambda} - \left(\dfrac{a}{\lambda} + y_0\right) z_2}{z_1 - z_2} = \frac{y_1 + \dfrac{a}{\lambda} - \left(\dfrac{a}{\lambda} + y_0\right) z_2}{2\sqrt{h^2\lambda^2 + 1}},$$

$$C_2 = \frac{a}{\lambda} + y_0 - \frac{y_1 + \dfrac{a}{\lambda} - \left(\dfrac{a}{\lambda} + y_0\right) z_2}{2\sqrt{h^2\lambda^2 + 1}}.$$

Для решения разностной задачи (83), (84) получаем представление

$$y_n = C_1\Big(h\lambda + \sqrt{h^2\lambda^2 + 1}\Big)^n + C_2\Big(h\lambda - \sqrt{h^2\lambda^2 + 1}\Big)^n - \frac{a}{\lambda}. \tag{87}$$

Параметры a и λ всегда можно выбрать так, чтобы $C_2 \neq 0$. При произвольном фиксированном h с ростом n решение y_n стремится к бесконечности из-за экспоненциального роста второй составляющей:

$$\begin{aligned} C_2\Big(h\lambda - \sqrt{h^2\lambda^2 + 1}\Big)^n &= C_2(-1)^n(e^{-h\lambda} + O(h^3))^n = C_2(-1)^n\Big(e^{-h\lambda + O(h^3)}\Big)^n = \\ &= C_2(-1)^n e^{-\lambda x_n + O(x_n h^2)} = C_2(-1)^n e^{-\lambda x_n(1 + O(h^2))} \underset{\mathrm{n}\to\infty}{\longrightarrow} \infty. \end{aligned} \tag{88}$$

Таким образом с ростом n резко возрастает отклонение численного решения (87) от точного решения (82) задачи (81).

Рассмотрим более подробно причину такого поведения численного решения разностной задачи (83), (84). Первая составляющая (87)

$$\begin{aligned} C_1\Big(h\lambda + \sqrt{h^2\lambda^2 + 1}\Big)^n &= C_1\Big(e^{h\lambda} + O(h^3)\Big)^n = C_1\Big(e^{h\lambda + O(h^3)}\Big)^n = \\ &= C_1 e^{\lambda x_n + O(x_n h^2)} = C_1 e^{\lambda x_n(1 + O(h^2))}. \end{aligned} \tag{89}$$

стремится к нулю при $n \to\propto$ и аппроксимирует слагаемое

$$\Big(y(0) + \frac{a}{\lambda}\Big)e^{\lambda x}$$

в (82), которое является фундаментальным решением дифференциального уравнения (81). Постоянная составляющая в (87) совпадает с постоянной составляющей точного решения (82). Можно сказать, что вторая составляющая $C_2 z_2^n$, соответствующая второму корню характеристического уравнения (85), носит паразитический характер. Ее влияние с ростом n быстро возрастает и приводит катастрофическому искажению результата.

Из всего сказанного следует, что применение слабо устойчивых формул требует осторожности при интегрировании на больших интервалах $[x_0, x_0 + X]$.

При $h \to 0$ корень $z_2 \to -1$, оставаясь по модулю больше единицы (86). Вернемся к общему уравнению (2). Если все посторонние корни характеристического многочлена (5) по модулю меньше единицы, то при достаточно малом h корни уравнения

$$\sum_{i=0}^{k}(\alpha_i - \lambda h\beta_i)z^i = 0 \tag{90}$$

близки к корням характеристического уравнения (37) и все, кроме одного (который стремится к главному корню), по модулю меньше некоторого числа, строго меньшего единицы. Фундаментальные решения разностного уравнения

$$\sum_{i=0}^{k}(\alpha_i - \lambda h\beta_i)y_{n+i} = ha\sum_{i=0}^{k}\beta_i, \tag{91}$$

соответствующие этим корням уравнения (90), стремятся к нулю при $n \to \infty$, и влияние паразитических составляющих убывает.

Например, для явного метода Адамса разностное уравнение (53) для решения задачи (81) записывается в виде

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \nabla^i (\lambda y_n + a). \tag{92}$$

Заменяя разности с помощью соотношения (57), получаем

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \left(\sum_{l=0}^{i} (-1)^l C_i^l y_{n-l} \right) + \gamma_0 a h. \tag{93}$$

Характеристическое уравнение для разностного уравнения (93) имеет вид

$$\rho(z) = z^{k+1} - z^k - h\lambda \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \left(\sum_{l=0}^{i} (-1)^l C_i^l z^{k-l} \right) =$$
$$= z^{k+1} - z^k - h\lambda \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \left(\sum_{l=0}^{i} (-1)^l C_i^l z^{i-l} \right) z^{k-i} = 0,$$

или

$$\rho(z) = z^{k+1} - z^k - h\lambda \sum_{i=0}^{k} \gamma_i (z-1)^i z^{k-i} = 0.$$

При больших по модулю отрицательных z многочлен $\rho(z)$ имеет знак $(-1)^{k+1}$.

$$\rho(-1) = (-1)^{k+1} - (-1)^k - h\lambda \sum_{i=0}^{k} \gamma_i (-2)^i (-1)^{k-i} = (-1)^{k+1} \left(2 + h\lambda \sum_{i=0}^{k} \gamma_i 2^i \right).$$

Если $2 + h\lambda \sum_{i=0}^{k} \gamma_i 2^i < 0$, то $\rho(-1)$ имеет знак $(-1)^k$. Следовательно, характеристический многочлен $\rho(z)$ имеет отрицательный корень, по модулю бóльший единицы, и среди фундаментальных решений уравнения (93) имеется неограниченно растущее по абсолютной величине решение при $n \to \propto$. Это приведет к возрастанию влияния паразитических составляющих в получаемом с помощью (92) численном решении асимптотически устойчивого дифференциального уравнения (81). Поэтому условие

$$2 + h\lambda \sum_{i=0}^{k} \gamma_i 2^i > 0 \tag{94}$$

является необходимым для получения приемлемых результатов.

Заметим, что с увеличением порядка $k+1$ аппроксимации условие (94) для величины шага интегрирования h становится все более жестким, так как с увеличением k растет величина $\sum_{i=0}^{k} \gamma_i 2^i$ и область значений h, для которых выполняется условие (94), уменьшается.

В частности, для дифференциальных уравнений с большим по модулю отрицательным λ условие (94) может приводить к столь малой величине шага интегрирования, что формула (53) оказывается практически непригодной. Для решения таких уравнений необходимо использовать специальные методы.

7. Реализация неявных разностных схем. Рассмотрим нахождение численного решения задачи (1.1), (1.2) с помощью неявных многошаговых методов. Отыскание решения разностного уравнения сводится к решению алгебраического или трансцендентного уравнения. Часто это уравнение решается методом итераций. Обратимся к общей разностной формуле (18). Обозначим $y_{n+k}^{(0)}$ начальное приближение к искомому решению y_{n+k}. Тогда итерационный процесс вычисления y_{n+k} может быть представлен в виде

$$y_{n+k}^{(\nu+1)} = h\beta_k f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(\nu)}) - \sum_{i=0}^{k-1} (\alpha_i y_{n+i} - h\beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i})), \quad \nu = 0, 1, 2, \ldots, \tag{95}$$

или

$$y_{n+k}^{(\nu+1)} = y_{n+k}^{(\nu)} + h\beta_k (f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(\nu)}) - f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(\nu-1)})), \quad \nu = 1, 2, \ldots. \tag{96}$$

Итерационный процесс (95), (96) сходится к решению y_{n+k} уравнения (18), если

$$hL|\beta_k| < 1, \tag{97}$$

где L – константа Липшица функции $f(x, y)$ (см. (1.39) и (1.107)).

Обсудим вопрос о выборе начального приближения для итерационного процесса (95) и о количестве выполняемых итераций. Начальное приближение $y_{n+k}^{(0)}$ может быть выбрано различными способами. Например, можно положить $y_{n+k}^{(0)} = y_{n+k-1}$. В качестве начального приближения можно взять значение, полученное по явной разностной формуле. В таком случае явная формула называется *предсказывающей* (или *предиктором*), неявная формула — *исправляющей* (или *корректором*), а весь комбинированный процесс называется *предсказывающе-исправляющим* методом, или методом *прогноза* и *коррекции* (или методом *предиктор-корректор*).

Количество итераций ν, которое необходимо выполнить, зависит от величины шага интегрирования, степеней явной и неявной формул и требуемой точности решения неявного уравнения. Если степень предсказывающей формулы меньше степени исправляющей формулы, то каждая вновь выполняемая итерация (95) или (96) увеличивает порядок точности очередного приближения на единицу до тех пор, пока не будет достигнут порядок исправляющей формулы. Для того чтобы точность приближенного решения $y_{n+k}^{(\nu)}$ определялась степенью неявной формулы, число итераций должно быть не меньше разности степеней неявной и явной формул.

Если P обозначить вычисление с помощью предсказывающей формулы начального приближения $y_{n+k}^{(0)}$, E — вычисление значения правой части дифференциального уравнения (1.1) $f_{n+k}^{(0)} = f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(0)})$, а C — уточнение полученного приближения $y_{n+k}^{(0)}$ с помощью исправляющей формулы, то методы прогноза и коррекции можно представить в символическом виде PEC, если исправляющая формула применяется один раз, или $P(EC)^\nu$, если исправляющая формула применяется более одного раза. Если полученное после ν итераций приближение $y_{n+k}^{(\nu)}$ к решению y_{n+k} использовать для вычисления значения правой части $f_{n+k} = f_{n+k}^{(\nu)} = f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(\nu)})$ при отыскании решения в следующем узле x_{n+k+1}, то методы прогноза и коррекции принимают следующий вид: $PECE$ или $P(EC)^\nu E$.

Рассмотрим интерполяционный метод Адамса в ординатной форме (40). Обозначим $y_{n+1}^{(0)}$ начальное приближение к искомому значению решения y_{n+1} и определим первое приближение с помощью соотношения

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = y_n + hb_0 f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(\nu)}) + h\sum_{i=1}^{k} b_i f(x_{n+1-i}, y_{n+1-i}),$$

или в силу (76)

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = h\gamma_k f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(\nu)}) + g(h, y_n, f_n, f_{n-1}, \ldots, f_{n+1-k}). \tag{98}$$

Здесь g — известная функция своих аргументов, $\nu = 0, 1, 2, \ldots$. Итерации повторяются до тех пор, пока в пределах заданной точности не установятся приближения к решению. Итерационный процесс (98) сходится к решению y_{n+1} уравнения (40), если

$$hL < \frac{1}{\gamma_k}. \tag{99}$$

Из (98) следует, что

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = y_{n+1}^{(\nu)} + h\gamma_k(f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(\nu)}) - f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(\nu-1)})). \tag{100}$$

Если интерполяционный метод Адамса использовать в разностной форме (70), то итерационный процесс строится с помощью соотношения

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = y_n + h\sum_{i=0}^{k} \overline{\gamma}_i \,\nabla^i\, f_{n+1}^{(\nu)}, \tag{101}$$

где $\nabla^i f_{n+1}^{(\nu)} = \nabla^i f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(\nu)})$. Как и в случае (98) или (100), для начала итерационного процесса (101) требуется знать начальное приближение $y_{n+1}^{(0)}$ для y_{n+1}. Однако итерационный процесс можно начать, если выбрать начальное приближение $\nabla^k f_{n+1}^{(0)}$ для $\nabla^k f_{n+1}$. Например, можно положить

$$\nabla^k f_{n+1}^{(0)} = \nabla^k f_n \tag{102}$$

и по формулам составления конечных разностей

$$\nabla^{i-1} f_{n+1} = \nabla^i f_{n+1} + \nabla^{i-1} f_n, \quad i = k, k-1, \dots, 1, \tag{103}$$

вычислить все разности, входящие в (101):

$$\nabla^{k-1} f_{n+1}^{(0)}, \nabla^{k-2} f_{n+1}^{(0)}, \dots, \nabla f_{n+1}^{(0)}, f_{n+1}^{(0)}.$$

Затем при помощи (101) при $\nu = 0$ находим

$$y_{n+1}^{(1)} = y_n + h\sum_{i=0}^{k} \overline{\gamma}_i \,\nabla^i\, f_{n+1}^{(0)}.$$

Определяем правую часть $f_{n+1}^{(1)} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(1)})$ и ее конечные разности

$$\nabla f_{n+1}^{(1)}, \nabla^2 f_{n+1}^{(1)}, \dots, \nabla^{k-1} f_{n+1}^{(1)}, \nabla^k f_{n+1}^{(1)}$$

по формулам составления конечных разностей

$$\nabla^i f_{n+1} = \nabla^{i-1} f_{n+1} - \nabla^{i-1} f_n, \quad i = 1, 2, \dots, k. \tag{104}$$

Далее при помощи (101) при $\nu = 1$ получаем $y_{n+1}^{(2)}$. Итерационный процесс повторяем до тех пор, пока в пределах заданной точности не установятся приближения $y_{n+1}^{(\nu)}$.

Начальное приближение $\nabla^k f_{n+1}^{(0)}$ можно получить экстраполяцией по нескольким предыдущим значениям $\nabla^k f_n$, $\nabla^k f_{n-1}$, … .

Формулу (101) можно преобразовать к другому виду. Для этого воспользуемся формулами (104) составления конечных разностей и свойствами (73), (74) для коэффициентов γ_i и $\overline{\gamma}_i$ формул Адамса (53), (70). Рассмотрим сумму в (70):

$$\sum_{i=0}^{k} \overline{\gamma}_i \,\nabla^i\, f_{n+1} = \sum_{i=0}^{k} \overline{\gamma}_i \left(f_{n+1} - \sum_{j=0}^{i-1} \nabla^j f_n\right) = f_{n+1}\sum_{i=0}^{k} \overline{\gamma}_i - \sum_{i=0}^{k-1} \nabla^i f_n \sum_{j=i+1}^{k} \overline{\gamma_j} =$$

$$= \gamma_k f_{n+1} - \sum_{i=0}^{k-1} (\gamma_k - \gamma_i)\,\nabla^i\, f_n = \gamma_k f_{n+1} + \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \,\nabla^i\, f_n - \gamma_k \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_n.$$

Подставляя полученное выражение в (70), имеем

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=0}^{k} \gamma_i \,\nabla^i\, f_n - h\gamma_k \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_n + h\gamma_k f_{n+1}. \tag{105}$$

Обозначая P_{n+1} приближение к y_{n+1}, полученное по явной формуле Адамса (53),

$$P_{n+1} = y_n + h\sum_{i=0}^{k} \gamma_i \nabla^i f_n,$$

формулу (105) можно представить так:

$$y_{n+1} = P_{n+1} - h\gamma_k \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_n + h\gamma_k f_{n+1}. \tag{106}$$

Тогда итерационный процесс принимает вид

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = P_{n+1} - h\gamma_k \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_n + h\gamma_k f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(\nu)}). \tag{107}$$

Естественно принять P_{n+1} в качестве начального приближения $y_{n+1}^{(0)}$ для итерационного процесса (107). Тогда получается предсказывающе-исправляющий метод. Формула (107) более удобна для счета по сравнению со (101), так как здесь не требуется пересчитывать конечные разности на каждой итерации. Конечные разности $\nabla^i f_{n+1}$ вычисляются только один раз после окончания итерационного процесса.

Заметим, что формула (100) может быть использована для проведения итерационного процесса в любом случае независимо от того, в какой форме используется формула Адамса: в ординатной форме (40) или разностной форме (70).

Приведем метод прогноза и коррекции, основанный на формулах Милна. Для неявной формулы четвертого порядка аппроксимации

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1}) \tag{108}$$

соответствующий итерационный процесс имеет вид

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(f_{n+1}^{(\nu)} + 4f_n + f_{n-1}), \quad \nu = 0, 1, \ldots . \tag{109}$$

Начальное приближение $y_{n+1}^{(0)}$ для y_{n+1} вычисляется по явной формуле (58), тоже имеющей четвертый порядок аппроксимации:

$$y_{n+1}^{(0)} = y_{n-3} + \frac{4h}{3}(2f_n - f_{n-1} + 2f_{n-2}). \tag{110}$$

Для неявной формулы шестого порядка аппроксимации

$$y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4h}{90}(7f_{n+1} + 32f_n + 12f_{n-1} + 32f_{n-2} + 7f_{n-3}) \tag{111}$$

соответствующий итерационный процесс имеет вид

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = y_{n-3} + \frac{4h}{90}(7f_{n+1}^{(\nu)} + 32f_n + 12f_{n-1} + 32f_{n-2} + 7f_{n-3}), \quad \nu = 0, 1, \ldots, \tag{112}$$

или

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = \frac{14}{45}hf(x_{n+1}, y_{n+1}^{(\nu)}) + y_{n-3} + \frac{4h}{90}(32f_n + 12f_{n-1} + 32f_{n-2} + 7f_{n-3}), \quad \nu = 0, 1, \ldots . \tag{112'}$$

Начальное приближение $y_{n+1}^{(0)}$ для y_{n+1} вычисляется по явной формуле (60), тоже имеющей шестой порядок аппроксимации:

$$y_{n+1}^{(0)} = y_{n-5} + \frac{3h}{10}(11f_n - 14f_{n-1} + 26f_{n-2} - 14f_{n-3} + 11f_{n-4}). \tag{113}$$

Метод прогноза и коррекции, основанный на (109), (110) и (112), (113), называется *методом Милна.*

Если неявная формула Милна используется в разностной форме, например

$$y_{n+1} = y_{n-1} + h\Big(2f_n + \frac{1}{3}\,\nabla^2\, f_{n+1} - \frac{1}{90}(\nabla^4 f_{n+1} + \nabla^5 f_{n+1})\Big), \qquad (114)$$

то соответствующий итерационный процесс имеет вид

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = y_{n-1} + h\Big(2f_n + \frac{1}{3}\,\nabla^2\, f_{n+1}^{(\nu)} - \frac{1}{90}(\nabla^4 f_{n+1}^{(\nu)} + \nabla^5 f_{n+1}^{(\nu)})\Big), \quad \nu = 0, 1, \ldots. \qquad (115)$$

Итерационный процесс может быть начат, если выбрать начальное приближение $\nabla^5 f_{n+1}^{(0)}$ для $\nabla^5 f_{n+1}$. Для этого можно положить

$$\nabla^5 f_{n+1}^{(0)} = \nabla^5 f_n,$$

где $\nabla^5 f_n$ — известная величина, и по формулам (103) составления конечных разностей вычислить разности

$$\nabla^4 f_{n+1}^{(0)}, \nabla^3 f_{n+1}^{(0)}, \nabla^2 f_{n+1}^{(0)}.$$

Затем при помощи (115) при $\nu = 0$ находится $y_{n+1}^{(1)}$. Определяется правая часть

$$f_{n+1}^{(1)} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(1)})$$

и ее конечные разности

$$\nabla f_{n+1}^{(1)}, \nabla^2 f_{n+1}^{(1)}, \ldots, \nabla^5 f_{n+1}^{(1)}.$$

Далее по формуле (115) при $\nu = 1$ получаем $y_{n+1}^{(2)}$. Итерационный процесс повторяется до тех пор, пока не совпадут с заданной точностью очередные приближения к решению.

8. Построение начальных значений. Разностная формула (2), предназначенная для нахождения решения y_{n+k} в точке x_{n+k}, содержит значения решения $y_n, y_{n+1}, \ldots, y_{n+k-1}$ в предыдущих узлах $x_n, x_{n+1}, \ldots, x_{n+k-1}$ и соответствующие значения правой части $f(x_n, y_n)$, $f(x_{n+1}, y_{n+1}), \ldots, f(x_{n+k-1}, y_{n+k-1})$. Предполагается, что указанные величины заранее известны. Совокупность этих величин составляет так называемый *фронт многошагового метода.*

Если формула численного интегрирования используется в разностной форме, например, (53), (55), (105), то ее применение также предполагает знание входящих в нее конечных разностей $\nabla^i f_n$ правой части $f(x, y)$. Совокупность этих разностей также образует фронт разностного метода. В начале интегрирования фронт включает в себя начальные значения (4) и соответствующие значения правых частей или значения конечных разностей. Однако значения этих величин нам неизвестны. Поэтому применение многошаговых методов требует предварительного построения недостающих начальных значений или конечных разностей.

Недостающие начальные значения могут быть найдены с помощью одношаговых методов, описанных в гл. 1, например, методом Рунге–Кутта или методом ряда Тейлора. Рассмотренные в данной главе конечно-разностные схемы также могут быть использованы для вычисления начальных значений. Построение фронта многошагового метода в начале интегрирования иногда называют *разгоном.*

Рассмотрим процедуру разгона для методов Адамса (53), (105). Эта процедура основана на итерационном применении разностных формул с последовательно увеличивающейся степенью. Используя начальные значения задачи Коши (1.1), (1.2) и явную формулу Адамса (53) первого порядка аппроксимации, вычисляем

$$y_1^{(1)} = y_0 + hf_0.$$

Погрешность $y_1^{(1)}$ составляет $O(h^2)$. Находим $f_1^{(1)}$, $\nabla f_1^{(1)}$ и полагаем

$$\nabla f_0 = \nabla f_1^{(1)}.$$

Используя явную формулу Адамса (53) второго порядка аппроксимации, вычисляем

$$y_1^{(2)} = y_0 + h\Big(f_0 + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_0\Big),$$

$$y_2^{(2)} = y_1^{(2)} + h\Big(f_1^{(2)} + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_1^{(2)}\Big).$$

Погрешность $y_1^{(2)}$, $y_2^{(2)}$ составляет $O(h^3)$. Находим $f_2^{(2)}$, $\bigtriangledown f_2^{(2)}$, $\bigtriangledown^2 f_2^{(2)}$ и полагаем

$$\bigtriangledown^2 f_0 = \bigtriangledown^2 f_1 = \bigtriangledown^2 f_2^{(2)},$$

$$\bigtriangledown f_0 \; = \bigtriangledown f_2^{(2)} - 2 \bigtriangledown^2 f_2^{(2)}.$$

Используя явную формулу Адамса (53) третьего порядка аппроксимации, вычисляем

$$y_1^{(3)} = y_0 + h\Big(f_0 + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_0 + \frac{5}{12} \bigtriangledown^2 f_0\Big),$$

$$y_2^{(3)} = y_1^{(3)} + h\Big(f_1^{(3)} + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_1^{(3)} + \frac{5}{12} \bigtriangledown^2 f_1\Big),$$

$$y_3^{(3)} = y_2^{(3)} + h\Big(f_2^{(3)} + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_2^{(3)} + \frac{5}{12} \bigtriangledown^2 f_2^{(3)}\Big).$$

Погрешность $y_1^{(3)}$, $y_2^{(3)}$, $y_3^{(3)}$ составляет $O(h^4)$. Находим $f_3^{(3)}$, $\bigtriangledown f_3^{(3)}$, $\bigtriangledown^2 f_3^{(3)}$, $\bigtriangledown^3 f_3^{(3)}$ и полагаем

$$\bigtriangledown^3 f_0 = \bigtriangledown^3 f_1 = \bigtriangledown^3 f_2 = \bigtriangledown^3 f_3^{(3)},$$

$$\bigtriangledown^2 f_0 = \bigtriangledown^2 f_3^{(3)} - 3 \bigtriangledown^3 f_3^{(3)},$$

$$\bigtriangledown^2 f_1 = \bigtriangledown^2 f_3^{(3)} - 2 \bigtriangledown^3 f_3^{(3)},$$

$$\bigtriangledown f_0 \; = \bigtriangledown f_3^{(3)} - 3 \bigtriangledown^2 f_3^{(3)} + 3 \bigtriangledown^3 f_3^{(3)}.$$

Используя формулу Адамса (53) четвертого порядка аппроксимации, вычисляем

$$y_1^{(4)} = y_0 + h\Big(f_0 + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_0 + \frac{5}{12} \bigtriangledown^2 f_0 + \frac{3}{8} \bigtriangledown^3 f_0\Big),$$

$$y_2^{(4)} = y_1^{(4)} + h\Big(f_1^{(4)} + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_1^{(4)} + \frac{5}{12} \bigtriangledown^2 f_1 + \frac{3}{8} \bigtriangledown^3 f_1\Big),$$

$$y_3^{(4)} = y_2^{(4)} + h\Big(f_2^{(4)} + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_2^{(4)} + \frac{5}{12} \bigtriangledown^2 f_2^{(4)} + \frac{3}{8} \bigtriangledown^3 f_2\Big),$$

$$y_4^{(4)} = y_3^{(4)} + h\Big(f_3^{(4)} + \frac{1}{2} \bigtriangledown f_3^{(4)} + \frac{5}{12} \bigtriangledown^2 f_3^{(4)} + \frac{3}{8} \bigtriangledown^3 f_3^{(4)}\Big).$$

Погрешность $y_1^{(4)}$, $y_2^{(4)}$, $y_3^{(4)}$, $y_4^{(4)}$ составляет $O(h^5)$. Находим $f_4^{(4)}$, $\bigtriangledown f_4^{(4)}$, $\bigtriangledown^2 f_4^{(4)}$, $\bigtriangledown^3 f_4^{(4)}$, $\bigtriangledown^4 f_4^{(4)}$ и полагаем

$$\begin{aligned}
\bigtriangledown^4 f_0 &= \bigtriangledown^4 f_4^{(4)},\\
\bigtriangledown^3 f_0 &= \bigtriangledown^3 f_4^{(4)} - 4 \bigtriangledown^4 f_4^{(4)},\\
\bigtriangledown^2 f_0 &= \bigtriangledown^2 f_4^{(4)} - 4 \bigtriangledown^3 f_4^{(4)} + 6 \bigtriangledown^4 f_4^{(4)},\\
\bigtriangledown f_0 \; &= \bigtriangledown f_4^{(4)} - 4 \bigtriangledown^2 f_4^{(4)} + 6 \bigtriangledown^3 f_4^{(4)} - 4 \bigtriangledown^4 f_4^{(4)}.
\end{aligned} \qquad (116)$$

Погрешность вычисления конечных разностей $\nabla^i f_0$ составляет $O(h^5)$. Если снова воспользоваться формулой Адамса (53) пятого порядка точности, то вычисленные значения $y_1^{(5)}$, $y_2^{(5)}$, $y_3^{(5)}$, $y_4^{(5)}$, $y_5^{(5)}$ будут иметь погрешность порядка $O(h^6)$. Тогда определяемые с их помощью конечные разности $\nabla^i f_5^{(5)}$, $i = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, в точке x_5 также будут иметь погрешность порядка $O(h^6)$, а следовательно, такую же погрешность будут иметь и разности $\nabla^i f_0$.

Таким способом вычисляются недостающие начальные значения вместе с соответствующими разностями. Продолжая этот итерационный процесс, можно вычислить необходимые для использования разностной формулы (2) начальные значения (4) решения $y_0, y_1, \ldots, y_{k-1}$ и соответствующие им конечные разности с любым порядком точности относительно h. После этого может быть начато вычисление всех последующих значений решения y_n, $n = k, k+1, \ldots$.

9. Сходимость многошаговых методов. 9.1. *Классификация погрешностей.* Обозначим y_n решение разностного уравнения (2) с начальными условиями (4), совпадающими с точными значениями решения дифференциальной задачи (1.1), (1.2). Разность между решением исходной задачи Коши (1.1). (1.2) и решением разностной задачи (2), (4)

$$\varepsilon_n = y(x_n) - y_n \tag{117}$$

называется *погрешностью метода* (2). В действительности вследствие ошибок округления, неточного вычисления правой части дифференциального уравнения и приближенного решения неявного разностного уравнения (2) вычисляется не функция y_n, а другая сеточная функция $\tilde{y}_n$, удовлетворяющая разностному уравнению

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i \tilde{y}_{n+i} - h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+i}, \tilde{y}_{n+i}) = \delta_{n+k} \tag{118}$$

с некоторой невязкой δ_{n+k}. Величина δ_{n+k} называется *погрешностью округления.*

Функция $\tilde{y}_n$ является решением разностного уравнения (118) с начальными условиями

$$\tilde{y}_0 = \tilde{g}_0, \quad \tilde{y}_1 = \tilde{g}_1, \quad \ldots, \quad \tilde{y}_{k-1} = \tilde{g}_{k-1}, \tag{119}$$

которые приближенно находятся с помощью некоторой процедуры разгона. Разность между точным решением разностной задачи (2), (4) и решением возмущенной разностной задачи (118) и (119)

$$\eta_n = y_n - \tilde{y}_n \tag{120}$$

называется *вычислительной погрешностью.* Разность между точным решением дифференциальной задачи (1.1), (1.2) и решением возмущенной разностной задачи (118), (119)

$$R_n = y(x_n) - \tilde{y}_n \tag{121}$$

называется *полной погрешностью приближенного решения* $\tilde{y}_n$. Из (117), (120), и (121) следует, что полная погрешность равна сумме погрешности метода и вычислительной погрешности

$$R_n = \varepsilon_n + \eta_n. \tag{122}$$

Вычитая (118) из (9), получаем, что полная погрешность удовлетворяет разностному уравнению

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i (y(x_{n+i}) - \tilde{y}_{n+i}) - h \sum_{i=0}^{k} \beta_i \Big(f(x_{n+i}, y(x_{n+i})) - f(x_{n+i}, \tilde{y}_{n+i}) \Big) = \rho_{n+k} - \delta_{n+k},$$

или

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i R_{n+i} - h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f'_y(x_{n+i}, \xi_{n+i}) R_{n+i} = \rho_{n+k} - \delta_{n+k}, \tag{123}$$

где ξ_{n+i} лежит между $\tilde{y}_{n+i}$ и $y(x_{n+i})$, $n = 0, 1, \ldots, N-k$.

9.2. Мажорантная оценка полной погрешности. Если разностное уравнение (2) устойчиво и правая часть дифференциального уравнения удовлетворяет сформулированным выше условиям, то при всех достаточно малых h, удовлетворяющих условию

$$h < h_0, \quad h_0 \left|\frac{\beta_k}{\alpha_k}\right| L < 1,$$

справедлива мажорантная оценка полной погрешности, сходная с оценкой (1.39) для одношаговых методов:

$$|R_n| \leq Ce^{G\tilde{L}X}\Big(\max_{0 \leq j \leq k-1} |Rj| + \sum_{j=k}^{n} (|\rho_j| + |\delta_j|)\Big), \tag{124}$$

где $G, \tilde{L}, C$ — некоторые постоянные, зависящие от коэффициентов разностного уравнения (2) и дифференциального уравнения (1.1) и не зависящие от h. В частности, если погрешность на начальном участке

$$|R_j| < C_1 h^{\sigma}, \quad \sigma > 0, \quad j = 0, 1, \ldots, k-1, \tag{125}$$

погрешность округления

$$|\delta_j| \leq C_2 h^p, \quad p > 1, \quad j = k, k+1, \ldots, N, \tag{126}$$

формула (2) имеет степень $s \geq 1$, т.е.

$$|\rho_j| \leq C_3 h^{s+1}, \quad j = k, k+1, \ldots, N, \tag{127}$$

то имеет место оценка

$$|R_n| \leq Ce^{G\tilde{L}X}\Big(C_1 h^{\sigma} + X(C_3 h^s + C_2 h^{p-1})\Big), \tag{128}$$

из которой следует сходимость приближенного решения $\tilde{y}_n$ к точному решению задачи Коши $y(x_n)$ при $h \to 0$.

Как и для одношаговых методов, полная погрешность состоит из трех частей: во-первых, из погрешности, обусловленной приближенным заданием начальных условий (119) (эта погрешность не превосходит величины $CC_1 e^{G\tilde{L}X} h^{\sigma}$); во-вторых, из глобальной погрешности метода, которая не превосходит величины $CC_3 e^{G\tilde{L}X} X h^s$; в-третьих, из вычислительной погрешности, обусловленной ошибками округления и неточным решением неявного разностного уравнения (эта погрешность не превосходит $CC_2 e^{G\tilde{L}X} X h^{\rho-1}$).

Для многошаговых методов справедливы многие утверждения, сходные с приведенными в гл. 2 для одношаговых методов. Поэтому подробно останавливаться на них мы не будем.

10. Вычисление решения между узлами сетки. Рассмотрим случай, когда точка x^*, в которой требуется вычислить решение дифференциального уравнения (1.1), не совпадает ни с одним узлом x_n сетки, на которой ищется решение y_n разностного уравнения. В этом случае можно поступить следующим образом.

Предположим, что точка x^* лежит между двумя соседними узлами $x_{m-1} < x^* < x_m$, в которых вычислено решение разностного уравнения. Пусть разностное уравнение используется в ординатной форме (2). Допустим, что его степень $s \leq k+1$. Построим интерполяционный многочлен Лагранжа (43) по значениям функции $f(x, y(x))$ в узлах x_j, $j = m-k, m-k+1, \ldots, m$:

$$L_{k,m}(x) = \sum_{i=0}^{k} f(x_{m-i}, y(x_{m-i}))\, \Phi_i(x).$$

Подставляя

$$f(x, y(x)) = L_{k,m}(x) + r_{k,m}(x)$$

в интегральное соотношение

$$y(x^*) - y(x_m) = \int\limits_{x_m}^{x*} f(x, y(x))\, dx, \tag{129}$$

получаем

$$y(x^*) - y(x_m) = h \sum_{i=0}^{k} B_i(\xi) f(x_{m-i}, y(x_{m-i})) + \rho, \tag{130}$$

где

$$B_i(\xi) = \frac{(-1)^i}{i!(k-i)!} \int\limits_0^{\xi} \frac{t(t+1)\dots(t+k)}{t+i}\, dt,$$

$$\rho = \int\limits_{x_m}^{x*} r_{k,m}(x)\, dx = O(h^{k+2}),$$

$$\xi = \frac{x^* - x_m}{h}.$$

Отбрасывая ρ в (130), получаем конечно-разностную формулу для вычисления искомого решения $y(x^*)$:

$$y(x^*) \cong y_m + h \sum_{i=0}^{k} B_i(\xi) f(x_{m-i}, y_{m-i}). \tag{131}$$

Приведем коэффициенты $B_i(\xi)$ для $k = 3$:

$$\begin{aligned} B_0(\xi) &= \frac{\xi^4 + 8\xi^3 + 22\xi^2 + 24\xi}{24}, \\ B_1(\xi) &= -\frac{3\xi^4 + 20\xi^3 + 36\xi^2}{24}, \\ B_2(\xi) &= \frac{3\xi^4 + 16\xi^3 + 18\xi^2}{24}, \\ B_3(\xi) &= -\frac{\xi^4 + 4\xi^3 + 4\xi^2}{24}. \end{aligned} \tag{132}$$

Если степень разностного уравнения (2) $s \geq k+2$, то для вычисления решения в точке x^* можно воспользоваться интерполяционным многочленом Эрмита $H(x)$, построенным по значениям решения y_j, и его производной $f(x_j, y_j)$ в узлах x_j, $j = m-k, m-k+1, \dots, m-1, m$, и найти его значение $H(x^*)$.

Теперь предположим, что разностное уравнение используется в разностной форме, например, в виде (53) или (70). Построим интерполяционный многочлен Ньютона (48)

$$L_{k,m}(x) = L_{k,m}(x_m + th) = \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_m \frac{t(t+1)\dots(t+i-1)}{i!}.$$

Подставляя

$$f(x, y(x)) = L_{k,m} + r_{k,m}(x)$$

в (129), получаем

$$y(x^*) - y(x_m) = h \sum_{i=0}^{k} \gamma_i(\xi)\, \nabla^i f_m + \rho, \tag{133}$$

где

$$\gamma_i(\xi) = \frac{1}{i!} \int\limits_0^{\xi} t(t+1)\dots(t+i-1)\,dt, \quad \rho = O(h^{k+2}).$$

Отбрасывая в (133) остаточный член ρ, получаем конечно-разностную формулу для вычисления искомого решения $y(x^*)$:

$$y(x^*) \cong y_m + h\sum_{i=0}^{k} \gamma_i(\xi)\, \nabla^i\, f_m. \tag{134}$$

Приведем выражения для нескольких коэффициентов $\gamma_i(\xi)$:

$$\begin{aligned}
&\gamma_0(\xi) = \xi,\\
&\gamma_1(\xi) = \frac{1}{2}\,\xi^2,\\
&\gamma_2(\xi) = \frac{2\xi^3+3\xi^2}{12},\\
&\gamma_3(\xi) = \frac{\xi^4+4\xi^3+4\xi^2}{24},\\
&\gamma_4(\xi) = \frac{6\xi^5+45\xi^4+110\xi^3+90\xi^2}{720}.
\end{aligned} \tag{135}$$

11. Практические способы оценки погрешности приближенного решения. Из выражения (14) для невязки (9) разностной формулы (2) s-й степени на решении дифференциального уравнения (1.1) вытекает следующая асимптотическая оценка локальной погрешности метода:

$$u(x_m) - u_m = Ch^{s+1}u^{(s+1)}(x_m) + O(h^{s+2}). \tag{136}$$

Здесь $u(x_m)$ — точное решение дифференциального уравнения (1.1), удовлетворяющее условию $u(x_{m-k}) = y_{m-k}$, C — известная постоянная, u_m — точное решение разностного уравнения

$$\alpha_k u_m + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i u(x_{m-k+i}) = h\beta_k f(x_m, u_m) + h\sum_{i=0}^{k-1} \beta_i f(x_{m-k+i}, u(x_{m-k+i})). \tag{137}$$

Заметим, что если

$$u_{m-k+i} - u(x_{m-k+i}) = O(h^{s+1}),$$

то решение $\overline{u}_m$ уравнения

$$\alpha_k \overline{u}_m + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i u_{m-k+i} = h\beta_k f(x_m, \overline{u}_m) + h\sum_{i=0}^{k-1} \beta_i f(x_{m-k+i}, u_{m-k+i}) \tag{137$'$}$$

имеет оценку того же порядка, что и решение u_m:

$$u(x_m) - \overline{u}_m = \overline{C}h^{s+1}u^{(s+1)}(x_m) + O(h^{s+2}).$$

Если

$$u_{m-k+i} - u(x_{m-k+i}) = O(h^{s+2}), \tag{138}$$

то решение $\overline{u}_m$ уравнения (137$'$) имеет такую же оценку (136), что и решение u_m:

$$u(x_m) - \overline{u}_m = Ch^{s+1}u^{(s+1)}(x_m) + O(h^{s+2}). \tag{136$'$}$$

Рассмотрим способ оценки локальной погрешности метода прогноза и коррекции в предположении, что степени предсказывающей и исправляющей формул вида (2) равны s. Локальные погрешности этих формул можно представить согласно (136) в виде

$$u(x_m) - u_m^{(P)} = \rho_m^{(P)} = C^{(P)} h^{s+1} u^{(s+1)}(x_m) + O(h^{s+2}), \tag{139}$$

$$u(x_m) - u_m^{(C)} = \rho_m^{(C)} = C^{(C)} h^{s+1} u^{(s+1)}(x_m) + O(h^{s+2}). \tag{140}$$

Погрешность приближенного решения $u_m^{(\nu)}$, полученного в результате уточнения предсказанного значения $u_m^{(0)} = u_m^{(P)}$, имеет тот же главный член, что и в (140). Поэтому

$$u(x_m) - u_m^{(\nu)} = \rho_m^{(\nu)} = C^{(C)} h^{s+1} u^{(s+1)}(x_m) + O(h^{s+2}). \tag{140$'$}$$

Решая систему двух уравнений (139), (140′) относительно $h^{s+1} u^{(s+1)}(x_m)$, получаем

$$h^{s+1} u^{(s+1)}(x_m) = \frac{u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}}{C^{(P)} - C^{(C)}} + O(h^{s+2}).$$

Отсюда следуют апостериорные асимптотические оценки для локальных погрешностей предсказанного значения $u_m^{(0)}$ и исправленного значения $u_m^{(\nu)}$:

$$\rho_m^{(P)} = \frac{C^{(P)}}{C^{(P)} - C^{(C)}} \left(u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}\right) + O(h^{s+2}), \tag{141}$$

$$\rho_m^{(\nu)} = \frac{C^{(C)}}{C^{(P)} - C^{(C)}} \left(u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}\right) + O(h^{s+2}). \tag{142}$$

Оценка (142) может быть использована для уточнения полученного приближенного решения $u_m^{(\nu)}$:

$$u_m = u_m^{(\nu)} + \frac{C^{(C)}}{C^{(P)} - C^{(C)}} \left(u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}\right), \tag{143}$$

при этом локальная погрешность u_m составляет $O(h^{s+2})$.

Из (136′) следует, что оценки (141), (142) остаются в силе, если для вычисления $u_m^{(0)}$ и $u_m^{(\nu)}$ использовать не точные значения решения $u(x_{m-k+i})$, $i = 0, 1, \ldots, k-1$, а приближенные значения, удовлетворяющие условию (138). Практическое значение этого замечания состоит в том, что при интегрировании дифференциального уравнения с помощью рассматриваемого метода прогноза и коррекции использование оценок (141), (142) обоснованно только тогда, когда производится уточнение найденного решения по формуле (143).

Если разностная формула используется в разностной форме, то оценка погрешности может быть получена следующим способом, который мы проиллюстрируем на примере методов Адамса. Если применяется явная формула Адамса (53), то локальная погрешность приближенного решения u_{n+1} равна

$$u(x_{n+1}) - u_{n+1} = h\gamma_{k+1} \nabla^{k+1} f_n + O(h^{k+3}). \tag{144}$$

Отсюда получается асимптотическая оценка

$$u(x_{n+1}) - u_{n+1} \cong h\gamma_{k+1} \nabla^{k+1} f_n, \tag{145}$$

которая представляет собой первый отброшенный член разностной формулы (53). В частности, оценка

$$u(x_1) - u_1 \cong h\gamma_{k+1} \nabla^{k+1} f_0, \tag{145$'$}$$

вытекающая из (145), может быть использована для оценки точности при разгоне.

Заметим, что так как в формулах Адамса (53) и (70) коэффициенты γ_i и $\overline{\gamma}_i$ имеют противоположные знаки: $\gamma_i > 0$, $\overline{\gamma}_i < 0$, $i \geq 1$, то при использовании метода прогноза и коррекции, основанного на явной и неявной формулах Адамса (53), (70), предсказанное $y^{(0)}_{n+1}$ и исправленное $y^{(\nu)}_{n+1}$ значения при достаточно малом h дают двусторонние приближения к точному решению задачи. Поэтому

$$\max\Big\{|u(x_{n+1}) - u^{(0)}_{n+1}|, |u(x_{n+1}) - u^{(\nu)}_{n+1}|\Big\} \leq |u^{(\nu)}_{n+1} - u^{(0)}_{n+1}|. \tag{146}$$

Кроме (146) могут быть использованы оценки (141) и (142), которые в данном случае принимают вид

$$\rho^{(P)}_{n+1} = \frac{\gamma_{k+1}}{\gamma_{k+1} - \overline{\gamma}_{k+1}}\,(u^{(\nu)}_{n+1} - u^{(0)}_{n+1}) + O(h^{k+3}), \tag{147}$$

$$\rho^{(\nu)}_{n+1} = \frac{\overline{\gamma}_{k+1}}{\gamma_{k+1} - \overline{\gamma}_{k+1}}\,(u^{(\nu)}_{n+1} - u^{(0)}_{n+1}) + O(h^{k+3}), \tag{148}$$

или с учетом (73)

$$\rho^{(P)}_{n+1} = \frac{\gamma_{k+1}}{\gamma_k}\,(u^{(\nu)}_{n+1} - u^{(0)}_{n+1}) + O(h^{k+3}), \tag{147$'$}$$

$$\rho^{(\nu)}_{n+1} = \frac{\overline{\gamma}_{k+1}}{\gamma_k}\,(u^{(\nu)}_{n+1} - u^{(0)}_{n+1}) + O(h^{k+3}), \tag{148$'$}$$

12. Автоматический выбор шага интегрирования. Как и для одношаговых методов, вопрос о выборе величины шага интегрирования для многошаговых методов имеет существенное значение, так как от него зависит не только точность вычисления решения, но и общий объем вычислительной работы, а значит, и машинное время, необходимое для решения задачи. Имея оценки для локальной погрешности, можно организовать для многошаговых методов автоматический выбор шага интегрирования, руководствуясь теми же соображениями, что и для одношаговых методов. Однако использование конечно-разностных схем вносит свою особенность в этот процесс, обсуждением которой мы сейчас и займемся.

12.1. Удвоение и деление шага пополам. Пусть интегрирование ведется с использованием конечно-разностной формулы (2). Допустим, что после оценки погрешности принято решение об изменении величины шага интегрирования. Рассмотрим сначала случай удвоения шага. Для того чтобы продолжить счет по той же формуле (2), но с удвоенным шагом, необходимо помнить значения решения и правой части в $[k/2]$ дополнительных точках (заметим, что если используется формула Адамса (40) или (41), то запоминаются только значения правой части).

Рассмотрим случай деления шага пополам. Для того чтобы продолжить счет по той же формуле (2), но с половинным шагом, необходимо заново вычислить значения решения и правой части в $[k/2]$ дополнительных точках. Эти дополнительные точки расположены посередине между узлами сетки. Дополнительные значения могут быть вычислены с помощью интерполяционных или конечно-разностных формул. Чтобы точность вновь вычисляемых значений решения соответствовала степени разностной формулы (2) численного интегрирования, можно привлекать для их вычисления кроме значений решения в узловых точках значения правых частей. Это может быть сделано с помощью интерполяционного полинома Эрмита. Проиллюстрируем эту идею на примере метода Милна (110), (109) четвертого порядка точности.

Пусть интегрирование выполнено до точки $x = x_n$. Если принято решение о делении шага пополам, то для того чтобы продолжить счет по формулам (110), (109) с половинным шагом, необходимо иметь значения решения в промежуточных точках $x_{n-\frac{1}{2}} = x_n - \dfrac{h}{2}$ и $x_{n-\frac{3}{2}} = x_{n-1} - \dfrac{h}{2}$. Эти значения могут быть найдены с помощью интерполяционного многочлена Эрмита пятой степени, построенного по значениям решения y_n, y_{n-1}, y_{n-2} и производной $f(x_n, y_n)$, $f(x_{n-1}, y_{n-1})$, $f(x_{n-2}, y_{n-2})$. Построить многочлен Эрмита можно, записав его в виде

$$H_5(x) = L_2(x) + \omega_2(x) H_2(x), \tag{149}$$

где $L_2(x)$ — интерполяционный многочлен Лагранжа

$$L_2(x) = \sum_{i=0}^{2} y_{n-i}\Phi_i(x), \quad \omega_2(x) = \prod_{i=0}^{2}(x - x_{n-i}).$$

Многочлен $H_2(x)$ второй степени определим из условия совпадения производных многочлена Эрмита $H_5(x)$ и решения дифференциального уравнения в узлах x_{n-2}, x_{n-1}, x_n сетки:

$$H_5'(x_{n-2}) = f_{n-2}, \quad H_5'(x_{n-1}) = f_{n-1}, \quad H_5'(x_n) = f_n. \tag{150}$$

Условия (150) дают

$$H_2(x_{n-2}) = \frac{f_{n-2} + \dfrac{3}{2}\,\dfrac{y_{n-2}}{h} - \dfrac{2y_{n-1}}{h} + \dfrac{y_n}{2h}}{2h^2},$$

$$H_2(x_{n-1}) = \frac{f_{n-1} + \dfrac{y_{n-2}}{2h} - \dfrac{y_n}{2h}}{h^2},$$

$$H_2(x_n) \quad = \frac{f_n - \dfrac{y_{n-2}}{2h} + \dfrac{2y_{n-1}}{h} - \dfrac{3}{2}\,\dfrac{y_n}{h}}{2h^2}.$$

Следовательно,

$$H_2(x) = \sum_{i=0}^{2} H_2(x_{n-i})\,\Phi_i(x). \tag{151}$$

Подставляя (151) в (149), получаем следующее выражение для многочлена Эрмита:

$$H_5(x) = \sum_{i=0}^{2} y_{n-i}\,\Phi_i(x) + \omega_2(x)\sum_{i=0}^{2} H_2(x_{n-i})\,\Phi_i(x). \tag{152}$$

Полагая в (152) $x = x_{n-\frac{1}{2}}$ и $x = x_{n-\frac{3}{2}}$, имеем интерполяционные формулы

$$\begin{aligned} y_{n-\frac{1}{2}} = H_5(x_{n-\frac{1}{2}}) &= \frac{1}{128}\,(45y_n + 72y_{n-1} + 11y_{n-2} + h(-9f_n + 36f_{n-1} + 3f_{n-2})),\\ y_{n-\frac{3}{2}} = H_5(x_{n-\frac{3}{2}}) &= \frac{1}{128}\,(11y_n + 72y_{n-1} + 45y_{n-2} - h(3f_n + 36f_{n-1} - 9f_{n-2})), \end{aligned} \tag{153}$$

которые имеют остаточный член $O(h^6)$. Таким образом, вновь вычисленные значения $y_{n-\frac{1}{2}}$ и $y_{n-\frac{3}{2}}$ не изменяют главного члена локальной погрешности формул (109), (110).

Располагая узлами

$$x^*_{n-3} = x_{n-\frac{3}{2}}, \quad x^*_{n-2} = x_{n-1}, \quad x^*_{n-1} = x_{n-\frac{1}{2}}, \quad x^*_n = x_n$$

и значениями решения в них

$$y^*_{n-3} = y_{n-\frac{3}{2}}, \quad y^*_{n-2} = y_{n-1}, \quad y^*_{n-1} = y_{n-\frac{1}{2}}, \quad y^*_n = y_n,$$

можем продолжить интегрирование по формулам (109), (110) с шагом $h^* = \dfrac{h}{2}$ для нахождения решения в узлах $x^*_{n+i} = x^*_n + ih^*$, $i > 0$.

12.2. Переход к произвольному шагу. Переход к произвольному шагу может быть осуществлен тем же способом, что и к половинному шагу, а именно с помощью интерполяционного полинома Эрмита (152). Пусть

$$h^* = \xi h \tag{154}$$

— новая длина шага интегрирования. Обозначим новые узлы

$$x_{n-i}^* = x_n^* - ih^*, \quad i = 0, 1, 2, 3. \tag{155}$$

Решение в этих узлах найдем по интерполяционной формуле Эрмита

$$y_{n-i}^* = H_5(x_{n-i}^*), \quad i = 0, 1, 2, 3.$$

Теперь можем продолжить интегрирование по формулам (109), (110) с шагом h^* для нахождения решения в узлах $x_{n+i}^* = x_n + ih^*$, $i > 0$.

Таким образом, при переходе к новому шагу интегрирования (154) используется та же конечно-разностная схема, но с другим фронтом.

Теперь предположим, что интегрирование ведется с помощью многошагового метода, записанного в разностной форме. Проиллюстрируем переход к новому шагу на примере методов Адамса (53), (70). Начнем с произвольного изменения шага (154), а удвоение и деление шага пополам получим как частный случай.

Допустим, что с помощью формулы (53) интегрирование выполнено с постоянным шагом h до точки $x = x_n$. Если и дальше интегрирование продолжать с тем же шагом, то значение решения в следующем узле $x_{n+1} = x_n + h$ вычислялось бы по той же формуле (53):

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \nabla^i f_n.$$

Допустим, что на основе оценки погрешности полученного приближения принято решение об изменении шага интегрирования. Пусть новый шаг интегрирования определяется с помощью (154). Если бы интегрирование дифференциального уравнения с самого начала велось с постоянным шагом h^*, то разностная формула для вычисления решения имела бы вид

$$y_{n+1}^* = y_n^* + h^* \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \nabla^i f_n^*, \tag{156}$$

где конечные разности $\nabla^i f_n^*$ составлены по значениям $f_{n-j}^* = f(x_{n-j}^*, y_{n-j}^*)$ функции $f(x, y)$ на новой сетке узлов $x_n - jh^*$, $j = 0, 1, \ldots, k$, с шагом h^*.

Можно сказать, что переход к новому шагу в точке x_n означает переход от интегрирования по формуле (53) к интегрированию по формуле (156). Это в свою очередь подразумевает переход от конечных разностей $\nabla^i f_n$, составленных по узлам x_{n-j}, $j = 0, 1, \ldots, k$, к конечным разностям $\nabla^i f_n^*$, составленным по другим узлам x_{n-j}^*. Такой переход может быть выполнен несколькими способами.

Например, с помощью интерполяционного многочлена Ньютона (48)

$$L_{k,n}(x) = L_{k,n}(x_n + th) = \sum_{i=0}^{k} \nabla^i f_n \, \frac{t(t+1)\ldots(t+i-1)}{i!} \tag{157}$$

можно вычислить значения

$$f_{n-j}^* = f(x_n - jh^*, y(x_n - jh^*)) = f(x_n - j\xi h, y(x_n - j\xi h)).$$

С точностью $O(h^{k+1})$, полагая $t = -j\xi$:

$$f_{n-j}^* = L_{k,n}(x_n - j\xi h), \quad j = 1, 2, \ldots, k. \tag{158}$$

По найденным значениям можно составить конечные разности $\nabla^i f_n^*$, $i = 1, \ldots, k$ и продолжить интегрирование дифференциального уравнения по формуле (156). Погрешность (52) формулы (156) и ошибка, вносимая в нее за счет неточности вычисления $\nabla^i f_n^*$, имеют одинаковый порядок $O(h^{k+2})$. Для того чтобы эта ошибка не изменяла главного члена погрешности (52), необходимо повысить точность вычисления конечных разностей $\nabla^i f_n^*$. Этого можно достичь тремя путями.

Во-первых, можно использовать полученные разности $\nabla^i f_n^*$ для нахождения по формуле (156) значения решения y_{n+j}^* в узлах $x_{n+j}^* = x_n + jh^*$, $j = 1, \ldots, k$, с погрешностью $O(h^{k+2})$. Затем по вычисленным значениям правых частей $f_{n+j}^* = f(x_{n+j}^*, y_{n+j}^*)$ составить конечные разности $\nabla f_{n+k}^*, \ldots, \nabla^k f_{n+k}^*$, а из них по формулам типа (116), применяемым в процедуре разгона, найти разности $\nabla^i f_n^*$. Теперь погрешность этих разностей будет иметь порядок $O(h^{k+2})$, а ошибка, вносимая ими в формулу (156), соответственно — $O(h^{k+3})$.

Во-вторых, в интерполяционном многочлене Ньютона (157) можно использовать значение параметра k на единицу больше его значения в формуле Адамса (53), т. е. $k + 1$. В этом случае погрешность вычисляемых по формуле (158) правых частей f_{n-j}^* имеет порядок $O(h^{k+2})$ и не изменяет главного члена погрешности формулы (156). Если же дополнительной конечной разности нет, то она может быть вычислена по формулам (147), (148).

В-третьих, можно определить решение дифференциального уравнения y_{n-j}^* в узлах x_{n-j}^* по формуле (134) с погрешностью $O(h^{k+2})$, вычислить значения правых частей $f_{n-j}^* = f(x_{n-j}^*, y_{n-j}^*)$ и составить разности $\nabla^i f_n^*$, $i = 1, 2, \ldots, k$. Теперь погрешность этих разностей имеет порядок $O(h^{k+2})$.

Сохранение главного члена погрешности разностной формулы (156) после перехода к новому шагу имеет практическое значение, так как тем самым обосновывается использование рассмотренных ранее асимптотических оценок локальной погрешности метода.

Рассмотрим теперь другой подход, который позволяет перейти от разностей $\nabla^i f_n$, соответствующих шагу h, непосредственно к разностям $\nabla^i f_n^*$, соответствующим новому шагу (154), минуя этап вычисления правых частей f_{n-j}^*, $i = 1, 2, \ldots, k$. Найдем коэффициенты в разложении

$$\nabla f_n^* = \alpha_1 \nabla f_n + \alpha_2 \nabla^2 f_n + \alpha_3 \nabla^3 f_n + \ldots + \alpha_k \nabla^k f_n + O(h^{k+1}). \tag{159}$$

Для этого разложим по степеням h все разности в левой и правой частях этого равенства:

$$\nabla^r f_n = \sum_{i=0}^{r} (-1)^i C_r^i f_{n-i} = \sum_{i=0}^{r} (-1)^i C_r^i \sum_{j=0}^{k} \frac{(-ih)^j f^{(j)}}{j!} + O(h^{k+1}) =$$

$$= \sum_{j=0}^{k} \frac{h^j f^{(j)}}{j!} \sum_{i=0}^{r} (-1)^i C_r^i (-i)^j + O(h^{k+1}) =$$

$$= \sum_{j=r}^{k} \frac{h^j f^{(j)}}{j!} \sum_{i=1}^{r} (-1)^i C_r^i (-i)^j + O(h^{k+1}), \quad r = 1, 2, \ldots, k.$$

Подставим полученное выражение в (159):

$$-\sum_{j=1}^{k} \frac{\xi^j h^j f^{(j)}}{j!} (-1)^j = \sum_{r=1}^{k} \alpha_r \nabla^r f_n + O(h^{k+1}) =$$

$$= \sum_{r=1}^{k} \alpha_r \sum_{j=r}^{k} \frac{h^j f^{(j)}}{j!} \sum_{i=1}^{r} (-1)^i C_r^i (-i)^j + O(h^{k+1}) =$$

$$= \sum_{j=1}^{k} \frac{h^j f^{(j)}}{j!} \sum_{r=1}^{j} \alpha_r \sum_{i=1}^{r} (-1)^i C_r^i (-i)^j + O(h^{k+1}).$$

Приравняем коэффициенты при одинаковых степенях h:

$$\begin{aligned} \xi &= \quad \alpha_1, \\ -\xi^2 &= -\alpha_1 + 2\alpha_2, \\ \xi^3 &= \quad \alpha_1 - 6\alpha_2 + 6\alpha_3, \\ -\xi^4 &= -\alpha_1 + 14\alpha_2 - 36\alpha_3 + 24\alpha_4 \end{aligned} \tag{160}$$

и т. д. Решая полученную систему уравнений (160), последовательно находим

$$\alpha_1 = \quad \xi;$$

$$\alpha_2 = -\frac{\xi(\xi-1)}{2};$$

$$\alpha_3 = \quad \frac{\xi(\xi-1)(\xi-2)}{6};$$

$$\alpha_4 = -\frac{\xi(\xi-1)(\xi-2)(\xi-3)}{24};\ldots$$

Аналогично находятся коэффициенты в разложениях

$$\nabla^2 f_n^* = \beta_2 \nabla^2 f_n + \beta_3 \nabla^3 f_n + \ldots + \beta_k \nabla^k f_n + O(h^{k+1}), \tag{161}$$

$$\nabla^3 f_n^* = \gamma_3 \nabla^3 f_n + \ldots + \gamma_k \nabla^k f_n + O(h^{k+1}), \tag{162}$$

$$\nabla^4 f_n^* = \delta_4 \nabla^4 f_n + \ldots + \delta_k \nabla^k f_n + O(h^{k+1}) \tag{163}$$

и т. д. Если ограничиться членами до четвертого порядка включительно (т. е. $k = 4$), то (159) и (161)—(163) можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \nabla f_n^* &= \xi \nabla f_n - \frac{\xi(\xi-1)}{2} \nabla^2 f_n + \frac{\xi(\xi-1)(\xi-2)}{6} \nabla^3 f_n - \\ &\quad - \frac{\xi(\xi-1)(\xi-2)(\xi-3)}{24} \nabla^4 f_n + O(h^5), \\ \nabla^2 f_n^* &= \xi^2 \nabla^2 f_n - \xi^2(\xi-1) \nabla^3 f_n + \frac{7\xi^2(\xi-1)\left(\xi-\frac{11}{7}\right)}{12} \nabla^4 f_n + O(h^5), \\ \nabla^3 f_n^* &= \xi^3 \nabla^3 f_n - \frac{3\xi^3(\xi-1)}{2} \nabla^4 f_n + +O(h^5), \\ \nabla^4 f_n^* &= \xi^4 \nabla^4 f_n + O(h^5). \end{aligned} \tag{164}$$

Так как в формулу Адамса (156) этот фронт входит с множителем h, то в локальную погрешность этой формулы он внесет ошибку $O(h^{k+2})$. При удвоении шага интегрирования формулы (164) принимают вид

$$\left.\begin{aligned} \nabla f_n^* &= \nabla f_n^{(2h)} = 2 \nabla f_n - \nabla^2 f_n \\ \nabla^2 f_n^* &= \nabla^2 f_n^{(2h)} = 4 \nabla^2 f_n - 4 \nabla^3 f_n + \nabla^4 f_n \\ \nabla^3 f_n^* &= \nabla^3 f_n^{(2h)} = 8 \nabla^3 f_n - 12 \nabla^4 f_n \\ \nabla^4 f_n^* &= \nabla^4 f_n^{(2h)} = 16 \nabla^4 f_n \end{aligned}\right\} + O(h^5), \tag{165}$$

а при делении шага пополам —

$$\left.\begin{aligned}
\nabla f_n^* &= \nabla f_n^{(\frac{1}{2}h)} = \frac{1}{2}\nabla f_n + \frac{1}{8}\nabla^2 f_n + \frac{1}{16}\nabla^3 f_n + \frac{5}{128}\nabla^4 f_n \\
\nabla^2 f_n^* &= \nabla^2 f_n^{(\frac{1}{2}h)} = \frac{1}{4}\nabla^2 f_n + \frac{1}{8}\nabla^3 f_n + \frac{5}{64}\nabla^4 f_n \\
\nabla^3 f_n^* &= \nabla^3 f_n^{(\frac{1}{2}h)} = \frac{1}{8}\nabla^3 f_n + \frac{3}{32}\nabla^4 f_n \\
\nabla^4 f_n^* &= \nabla^4 f_n^{(\frac{1}{2}h)} = \frac{1}{16}\nabla^4 f_n
\end{aligned}\right\} + O(h^5). \tag{166}$$

13. Конечно-разностные методы решения дифференциальных уравнений второго порядка. Рассмотрим разностные методы решения задачи Коши для дифференциальных уравнений второго порядка

$$y'' = f(x, y, y') \tag{167}$$

с начальными условиями

$$\begin{cases} y(x_0) = y_0, \\ y'(x_0) = y_0'. \end{cases} \tag{168}$$

Существуют два подхода к решению задачи (167), (168). Первый заключается в том, чтобы свести уравнение второго порядка к системе уравнений первого порядка и полученную задачу решать каким-нибудь из рассмотренных выше методов. Второй подход состоит в применении таких численных методов, которые специально приспособлены для решения уравнения (167) и обладают более высокой эффективностью. На этом втором подходе мы остановимся более подробно и рассмотрим конечно-разностные методы решения задачи (167), (168). Для построения формул численного интегрирования уравнений второго порядка поступим так же, как и при выводе конечно-разностных схем для интегрирования уравнений первого порядка.

13.1. Экстраполяционные формулы. Предположим, что нам известны значения решения $y(x_i)$ и его производной $y'(x_i)$ в узлах x_i, $i = n-k, n-k+1, \ldots, n-1, n$. Построим интерполяционный многочлен $L_{k,n}(x)$, принимающий в этих узлах значения $f(x_i, y(x_i), y'(x_i))$. Запишем его в виде интерполяционного многочлена Ньютона (48). Подставляя

$$f(x, y(x), y'(x)) = L_{k,n}(x) + r_{k,n}(x) \tag{169}$$

в интегральное соотношение

$$y'(x) - y'(x_n) = \int_{x_n}^{x} y''(\xi)\,d\xi = \int_{x_n}^{x} f(\xi, y'(\xi), y''(\xi))\,d\xi, \tag{170}$$

имеем

$$y'(x) - y'(x_n) = y'(x_n + \zeta h) - y'(x_n) = h\int_0^{\zeta} L_{k,n}(x_n + th)\,dt + h\int_0^{\zeta} r_{k,n}(x_n + th)\,dt, \tag{171}$$

где $x = x_n + \zeta h$.

Интегрируя (171) по отрезку $[x_n, x_{n+1}]$, получаем

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) - y'(x_n)h = \int\limits_{x_n}^{x_{n+1}} dx \int\limits_{x_n}^{x} y''(\xi)\, d\xi =$$

$$= h^2 \int\limits_0^1 d\xi \int\limits_0^{\xi} L_{k,n}(x_n + th)\, dt + \rho_1 = \tag{172}$$

$$= h^2 \sum_{i=0}^{k} \mu_i \bigtriangledown^i f_n + \rho_1,$$

где $f_n = f(x_n, y(x_n), y'(x_n))$,

$$\mu_i = \frac{1}{i!} \int\limits_0^1 d\zeta \int\limits_0^{\zeta} t(t+1)\ldots(t+i-1)\, dt, \tag{173}$$

$$\rho_1 = h^2 \int\limits_0^1 d\zeta \int\limits_0^{\zeta} r_{k,n}(x_n + th)\, dt =$$

$$= \frac{h^{k+3}}{(k+1)!} \int\limits_0^1 d\zeta \int\limits_0^{\zeta} t(t+1)\ldots(t+k) f^{(k+1)}(x, y(x), y'(x))\Big|_{x=\xi(t)} dt = \tag{174}$$

$$= h^{k+3}\mu_{k+1} f^{(k+1)}(\eta, y(\eta), y'(\eta)) = h^{k+3}\mu_{k+1} y^{(k+3)}(\eta) =$$

$$= h^{k+3}\mu_{k+1} y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+4}).$$

Отбрасывая в (172) остаточный член, получаем явную конечно-разностную схему

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + h^2 \sum_{i=0}^{k} \mu_i \bigtriangledown^i f_n. \tag{175}$$

Величина $h^{-2}\rho_1$ называется *погрешностью аппроксимации* дифференциального уравнения (167) разностным уравнением (175). Таким образом, разностное уравнение (175) аппроксимирует дифференциальное уравнение (167) с погрешностью $O(h^{k+1})$, или с порядком $k+1$.

Приведем несколько значений μ_i:

$$\mu_0 = \frac{1}{2}, \quad \mu_1 = \frac{1}{6}, \quad \mu_2 = \frac{1}{8}, \quad \mu_3 = \frac{19}{180}, \quad \mu_4 = \frac{3}{32}.$$

Если в (171) положить $x = x_{n+1}$, то

$$y'(x_{n+1}) = y'(x_n) + h \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \bigtriangledown^i f_n + \rho', \tag{176}$$

где γ_i — коэффициенты экстраполяционной формулы Адамса, определяемые с помощью (51),

$$\rho' = h^{k+2}\gamma_{k+1} y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+3}). \tag{177}$$

Отбрасывая остаточный член в (176), получаем разностное уравнение для определения производной y'_{n+1}:

$$y'_{n+1} = y'_n + h \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \bigtriangledown^i f_n. \tag{178}$$

Равенство (178) — экстраполяционная формула Адамса для производной.

Интегрирование дифференциального уравнения (167) с начальными условиями (168) может быть выполнено с помощью разностных уравнений (175), (178), если известны конечные разности $\nabla^i f_n$, решение y_n и производная y'_n в точке x_n. Мы предполагаем, что эти величины известны. Тогда из (175) находится решение y_{n+1}, а по формуле (178) — производная y'_{n+1} в следующем узле x_{n+1}. После этого определяется $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1}, y'_{n+1})$ и по формулам составления конечных разностей находятся $\nabla^i f_{n+1}, i = 1, 2, \ldots, k$. Узел x_{n+1} принимается за текущий, и все вычисления повторяются. Таким образом могут быть найдены во всех узлах сетки производная y'_n и решение y_n дифференциального уравнения.

Допустим, что правая часть дифференциального уравнения не содержит производную, т. е.

$$y'' = f(x, y). \tag{179}$$

В этом часто встречающемся в приложениях случае при вычислении y_{n+1} можно исключить все промежуточные производные, если только значения производной не требуются в качестве одного из результатов решения задачи. Для этого поступим следующим образом. Проинтегрируем (171) по отрезку $[x_{n-1}, x_n]$:

$$\begin{aligned} y(x_n) - y(x_{n-1}) - y'(x_n)h &= \int\limits_{x_{n-1}}^{x_n} dx \int\limits_{x_n}^{x} y''(\xi)\, d\xi = \\ &= h^2 \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} L_{k,n}(x_n + th)\, dt + \rho_2 = h^2 \sum_{i=0}^{k} \nu_i \nabla^i f_n + \rho_2, \end{aligned} \tag{180}$$

где

$$\nu_i = \frac{1}{i!} \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} t(t+1)\ldots(t+i-1)\, dt, \tag{181}$$

$$\begin{aligned} \rho_2 &= h^2 \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} r_{k,n}(x_n + th)\, dt = \\ &= \frac{h^{k+3}}{(k+1)!} \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} t(t+1)\ldots(t+k) f^{(k+1)}(x, y(x), y'(x))\Big|_{x=\xi(t)} dt = \\ &= h^{k+3}\nu_{k+1} f^{(k+1)}(\eta, y(\eta), y'(\eta)) = h^{k+3}\nu_{k+1} y^{(k+3)}(\eta) = \\ &= h^{k+3}\nu_{k+1} y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+4}). \end{aligned} \tag{182}$$

Вычитая (180) из (172), находим

$$y(x_{n+1}) - 2y(x_n) + y(x_{n-1}) = h^2 \sum_{i=0}^{k} æ_i \nabla^i f_n + \rho, \tag{183}$$

где

$$\begin{aligned} æ_i = \mu_i - \nu_i &= \frac{1}{i!}\Big(\int\limits_{0}^{1} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} t(t+1)\ldots(t+i-1)\, dt - \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} t(t+1)\ldots(t+i-1)\, dt \Big) = \\ &= \frac{1}{i!} \int\limits_{0}^{1} d\zeta \int\limits_{-\zeta}^{\zeta} t(t+1)\ldots(t+i-1)\, dt. \end{aligned} \tag{184}$$

Остаточный член в (183) равен разности остаточных членов ρ_1 (174) и ρ_2 (182):

$$\rho = h^{k+3}(\mu_{k+1} - \nu_{k+1})y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+4}) = h^{k+3}æ_{k+1}y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+4}). \tag{185}$$

Отбрасывая в (183) остаточный член, получаем разностное уравнение

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = h^2 \sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n, \tag{186}$$

аппроксимирующее дифференциальное уравнение (179) или (167) с $(k+1)$-м порядком.

Итак, из разностного уравнения (186) полностью исключены все производные. Решение задачи может быть найдено, если известны y_n, y_{n-1} и конечные разности $\bigtriangledown^i f_n$ в некотором узле x_n. Предполагаем, что эти величины нам известны. Очевидно, что разностная схема (186) более удобна для интегрирования дифференциального уравнения (179), чем схема (175), так как в этом случае нет необходимости проводить вычисления производной y'_n по формуле (178).

Формула (186) называется *экстраполяционной формулой Штермера.* Она может быть представлена также в виде

$$y_{n+1} = y_n + \bigtriangledown y_n + h^2 \sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n, \tag{186$'$}$$

или с учетом численных значении коэффициентов

$$y_{n+1} = y_n + \bigtriangledown y_n + h^2(f_n + \frac{1}{12} \bigtriangledown^2 f_n + \frac{1}{12} \bigtriangledown^3 f_n + \frac{19}{240} \bigtriangledown^4 f_n + \frac{3}{40} \bigtriangledown^5 f_n + \ldots + æ_k \bigtriangledown^k f_n) =$$

$$= y_n + \bigtriangledown y_n + h^2\Big(f_n + \frac{1}{12}(\bigtriangledown^2 f_n + \bigtriangledown^3 f_n + \bigtriangledown^4 f_n + \bigtriangledown^5 f_n) - \frac{1}{240}(\bigtriangledown^4 f_n + 2 \bigtriangledown^5 f_n) + \ldots + æ_k \bigtriangledown^k f_n\Big).$$

13.2. Интерполяционные формулы. Если подынтегральную функцию $f(x, y(x), y'(x))$ в (170) заменить интерполяционным многочленом Ньютона $L_{k,n+1}$, принимающим в узлах x_i значения $f(x_i, y(x_i), y'(x_i))$ при $i = n-k+1, \ldots, n, n+1$, и выполнить интегрирование, то мы придем к следующему соотношению:

$$\begin{aligned} y'(x) - y'(x_n) &= y'(x_n + \zeta h) - y'(x_n) = \\ &= h\int_0^{\zeta} L_{k,n+1}(x_n + th)\,dt + h\int_0^{\zeta} r_{k,n+1}(x_n + th)\,dt, \end{aligned} \tag{187}$$

где $x = x_n + \zeta h$. Интегрируя (187) по отрезку $[x_n, x_{n+1}]$, получаем

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) - y(x_n) - y'(x_n)h &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} dx \int_{x_n}^{x} y''(\xi)\,d\xi = \\ &= h^2 \int_0^1 d\zeta \int_0^{\zeta} L_{k,n+1}(x_n + th)\,dt + \rho_3 = h^2 \sum_{i=0}^{k} \bar{\mu}_i \bigtriangledown^i f_{n+1} + \rho_3, \end{aligned} \tag{188}$$

где $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y(x_{n+1}), y'(x_{n+1}))$,

$$\bar{\mu}_i = \frac{1}{i!}\int_0^1 d\zeta \int_0^{\zeta} (t-1)t(t+1)\ldots(t+i-2)\,dt,$$

$$\rho_3 = h^2 \int\limits_0^1 d\zeta \int\limits_0^\zeta r_{k,n+1}(x_n + th)\, dt =$$

$$= \frac{h^{k+3}}{(k+1)!} \int\limits_0^1 d\zeta \int\limits_0^\zeta (t-1)t(t+1)\dots(t+k-1) f^{(k+1)}(x, y(x), y'(x))\Big|_{x=\xi(t)} dt =$$

$$= h^{k+3}\bar{\mu}_{k+1} f^{(k+1)}(\eta, y(\eta), y'(\eta)) = h^{k+3}\bar{\mu}_{k+1} y^{(k+3)}(\eta) =$$

$$= h^{k+3}\bar{\mu}_{k+1} y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+4}).$$

Если в (187) положить $x = x_{n+1}$, то

$$y'(x_{n+1}) = y'(x_n) + h \sum_{i=0}^{k} \bar{\gamma}_i \bigtriangledown^i f_{n+1} + \rho', \tag{189}$$

где $\bar{\gamma}_i$ — коэффициенты интерполяционной формулы Адамса, определяемые с помощью (71),

$$\rho' = h^{k+2}\bar{\gamma}_{k+1} y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+3}).$$

Отбрасывая в (188) и (189) остаточные члены, приходим к разностным уравнениям для определения решения y_n и производной y'_n:

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + h^2 \sum_{i=0}^{k} \bar{\mu}_i \bigtriangledown^i f_{n+1} \tag{190}$$

и

$$y'_{n+1} = y'_n + h \sum_{i=0}^{k} \bar{\gamma}_i \bigtriangledown^i f_{n+1}. \tag{191}$$

Равенство (191) — неявная формула Адамса для производной.

Приведем несколько значений $\bar{\mu}_i$:

$$\bar{\mu}_0 = \frac{1}{2}, \quad \bar{\mu}_1 = -\frac{1}{3}, \quad \bar{\mu}_2 = -\frac{1}{24}, \quad \bar{\mu}_3 = -\frac{7}{360}.$$

Если проинтегрировать (187) по отрезку $[x_{n-1}, x_n]$, то

$$\begin{aligned} y(x_n) - y(x_{n-1}) - y'(x_n)h &= \int\limits_{x_{n-1}}^{x_n} dx \int\limits_{x_n}^{x} y''(\xi)\, d\xi = \\ &= h^2 \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_0^\zeta L_{k,n+1}(x_n + th)\, dt + \rho_4 = h^2 \sum_{i=0}^{k} \bar{\nu}_i \bigtriangledown^i f_{n+1} + \rho_4, \end{aligned} \tag{192}$$

где

$$\bar{\nu}_i = \frac{1}{i!} \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_0^\zeta (t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)\, dt,$$

$$\rho_4 = h^2 \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} r_{k,n+1}(x_n + th)\, dt =$$

$$= \frac{h^{k+3}}{(k+1)!} \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} (t-1)t(t+1)\dots(t+k-1) f^{(k+1)}(x, y(x), y'(x))\Big|_{x=\xi(t)} dt =$$

$$= h^{k+3}\bar{\nu}_{k+1} f^{(k+1)}(\eta, y(\eta), y'(\eta)) = h^{k+3}\bar{\nu}_{k+1} y^{(k+3)}(\eta) =$$

$$= h^{k+3}\bar{\nu}_{k+1} y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+4}).$$

Вычитая (192) из (188), находим

$$y(x_{n+1}) - 2y(x_n) + y(x_{n-1}) = h^2 \sum_{i=0}^{k} \bar{æ}_i \bigtriangledown^i f_{n+1} + \rho, \tag{193}$$

где

$$\bar{æ}_i = \bar{\mu}_i - \bar{\nu}_i = \frac{1}{i!}\Big(\int\limits_{0}^{1} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} (t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)\, dt - \int\limits_{-1}^{0} d\zeta \int\limits_{0}^{\zeta} (t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)\, dt \Big) =$$

$$= \frac{1}{i!} \int\limits_{0}^{1} d\zeta \int\limits_{-\zeta}^{\zeta} (t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)\, dt. \tag{194}$$

Остаточный член в (193) равен разности остаточных членов ρ_3 и ρ_4:

$$\rho = h^{k+3}(\bar{\mu}_{k+1} - \bar{\nu}_{k+1}) y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+4}) = h^{k+3}\bar{æ}_{k+1} y^{(k+3)}(x_n) + O(h^{k+4}). \tag{195}$$

Отбрасывая в (193) остаточный член, получаем разностное уравнение

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = h^2 \sum_{i=0}^{k} \bar{æ}_i \bigtriangledown^i f_{n+1}, \tag{196}$$

аппроксимирующее дифференциальные уравнения (179) и (167) с $(k+1)$-м порядком. Формула (196) называется *интерполяционной формулой Штермера.*

Интерполяционная формула Штермера может быть представлена в виде

$$y_{n+1} = y_n + \bigtriangledown y_n + h^2 \sum_{i=0}^{k} \bar{æ}_i \bigtriangledown^i f_{n+1}, \tag{196$'$}$$

или с учетом численных значений коэффициентов

$$y_{n+1} = y_n + \bigtriangledown y_n + h^2 \Big(f_{n+1} - \bigtriangledown f_{n+1} + \frac{1}{12} \bigtriangledown^2 f_{n+1} - \frac{1}{240} \bigtriangledown^4 f_{n+1} - \frac{1}{240} \bigtriangledown^5 f_{n+1} - \ldots + \bar{æ}_k \bigtriangledown^k f_{n+1} \Big).$$

Формула (196) более удобна для интегрирования дифференциального уравнения (179), чем формула (190), так как в этом случае не требуется проводить вычисления производной y'_n.

Из выражений (184) и (194) для коэффициентов $æ_i$ и $\bar{æ}_i$, следует, что

$$æ_{i-1}+\bar{æ}_i=\frac{1}{(i-1)!}\int\limits_0^1 d\zeta\int\limits_{-\zeta}^{\zeta} t(t+1)\dots(t+i-2)\,dt+\frac{1}{i!}\int\limits_0^1 d\zeta\int\limits_{-\zeta}^{\zeta}(t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)\,dt=$$

$$=\frac{1}{i!}\int\limits_0^1 d\zeta\Big(\int\limits_{-\zeta}^{\zeta} it(t+1)\dots(t+i-2)\,dt+\int\limits_{-\zeta}^{\zeta}(t-1)t(t+1)\dots(t+i-2)\,dt\Big)=$$

$$=\frac{1}{i!}\int\limits_0^1 d\zeta\int\limits_{-\zeta}^{\zeta} t\dots(t+i-2)(t+i-1)\,dt=æ_i,$$

т.е.

$$æ_{i-1}+\bar{æ}_i=æ_i. \tag{197}$$

Суммируя (197), получаем

$$\sum_{i=0}^{k}\bar{æ}_i=æ_k. \tag{198}$$

13.3. Видоизменение формы записи разностных уравнений. Неизвестное значение функции y_{n+1} в (196′) входит в левую и правую части разностного уравнения. Поэтому для отыскания y_{n+1} применяется итерационный процесс. Прежде чем переходить к описанию итерационного процесса, приведем интерполяционную формулу Штермера к несколько иному виду. Для этого воспользуемся формулами составления конечных разностей и свойствами (197), (198) коэффициентов и преобразуем сумму

$$\sum_{i=0}^{k}\bar{æ}_i\,\nabla^i f_{n+1}$$

в (196′) аналогично тому, как это было сделано при преобразовании интерполяционной формулы Адамса (70) к виду (105). В итоге имеем

$$y_{n+1}=y_n+\nabla y_n+h^2\sum_{i=0}^{k}æ_i\,\nabla^i f_n-h^2æ_k\sum_{i=0}^{k}\nabla^i f_n+h^2æ_k f_{n+1}. \tag{199}$$

Заметим, что формулы Штермера (186) и (196) обладают большей чувствительностью к ошибкам округления по сравнению с формулами Адамса. Проиллюстрируем это с помощью ниже приводимых рациональных рассуждений для простейшей формулы Штермера

$$y_{n+1}=y_n+\nabla y_n+h^2 f(x_n,y_n), \tag{200}$$

которая следует из (186′) при $k=0$.

В реальных вычислениях ошибки округления приводят к тому, что вычисляется не точное решение y_n разностного уравнения (200), а некоторая сеточная функция $\tilde{y}_n$, удовлетворяющая разностному уравнению

$$\tilde{y}_{n+1}=\tilde{y}_n+\nabla\tilde{y}_n+h^2 f(x_n,\tilde{y}_n)+\delta_n \tag{201}$$

с отличной от нуля невязкой δ_n. Уравнение (201) можно записать также в виде

$$\tilde{y}_{n+1}=\tilde{y}_n+\nabla\tilde{y}_n+h^2\left(f(x_n,\tilde{y}_n)+\frac{\delta}{h^2}\right). \tag{202}$$

Пусть $\delta_n=\delta=\mathrm{const}$. Наряду с дифференциальным уравнением (179) рассмотрим дифференциальное уравнение с возмущенной правой частью

$$u''=f(x,u)+\frac{\delta}{h^2}. \tag{203}$$

Применим формулу (200) к решению уравнения (203). Предполагая, что округление отсутствует, имеем

$$u_{n+1} = u_n + \bigtriangledown u_n + h^2 \left(f(x_n, u_n) + \frac{\delta_n}{h^2} \right). \tag{204}$$

Разностное уравнение (204) совпадает с разностным уравнением (202). Можно сказать, что в результате интегрирования дифференциального уравнения (179) по простейшему методу Штермера при наличии округления (т.е. в результате отыскания решения уравнения (202)) вычисляется та же сеточная функция, которая получилась бы, если тем же методом, но без округлений, интегрировалось уравнение (203) с возмущенной правой частью. Разность между решениями невозмущенного (179) и возмущенного (203) дифференциальных уравнений имеет порядок $O(\delta/h^2)$. Такой же порядок, вообще говоря, имеет и разность между решениями соответствующих разностных уравнений. Отсюда мы делаем вывод, что вычислительная погрешность приближенного решения, получаемого по методу Штермера, может иметь такой же порядок, как δ/h^2. К такому же заключению мы приходим с помощью точных оценок для частного случая, когда

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 0, \quad \delta_n = \delta = \text{const}. \tag{205}$$

Разность между решением y_n невозмущенного уравнения (200) и решением $\tilde{y}_n$ возмущенного уравнения (201)

$$\eta_n = y_n - \tilde{y}_n$$

удовлетворяет разностному уравнению

$$\eta_{n+1} = \eta_n + \bigtriangledown \eta_n + h^2 \, \frac{\partial f}{\partial y} \, \eta_n - \delta_n.$$

Если выполнены условия (205), то

$$\eta_{n+1} = \eta_n + \bigtriangledown \eta_n - \delta. \tag{206}$$

Найдем общее решение (206). Общее решение соответствующего однородного уравнения есть сеточная функция $\eta_n^0 = C_1 + C_2 n$. Нетрудно убедиться, что частным решением (206) является функция

$$\eta_n^1 = -\frac{\delta}{2} \, n^2.$$

Следовательно, общее решение (206) дается формулой

$$\eta_n = \eta_n^0 + \eta_n^1 = C_1 + C_2 n - \frac{\delta}{2} \, n^2,$$

откуда для фиксированного значения независимой переменной $x_n = x_0 + nh = x^*$ имеем

$$\eta_n = y_n - \tilde{y}_n = C_1 + C_2 \, \frac{x^* - x_0}{h} - \frac{\delta}{2} \, \frac{(x^* - x_0)^2}{h^2} \sim O\left(\frac{\delta}{h^2} \right).$$

Таким образом, вычислительная погрешность приближенного решения, полученного методом Штермера, может оказаться недопустимо большой, если h мало. В связи с этим формулы Штермера употребляются в другой форме.

Вводится дополнительная сеточная функция z_n такая, что

$$y_{n+1} - y_n = h z_{n+1}.$$

Тогда явная формула Штермера (186) принимает вид

$$z_{n+1} = z_n + h \sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n, \tag{207}$$

а интерполяционная формула (199) —

$$z_{n+1} = z_n + h\sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n - hæ_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + hæ_k f_{n+1} \tag{208}$$

и, следовательно,

$$y_{n+1} = y_n + hz_{n+1}. \tag{209}$$

13.4. Реализация неявных разностных формул. Рассмотрим сначала случай, когда интегрируется дифференциальное уравнение (179). В формуле (208) неизвестная величина z_{n+1} входит в левую и правую части разностного уравнения. Поэтому для ее отыскания применяется итерационный процесс, который может быть представлен в виде

$$z_{n+1}^{(\nu+1)} = z_n + h\sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n - hæ_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + hæ_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}^{(\nu)}), \tag{210}$$

или

$$z_{n+1}^{(\nu+1)} = hæ_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}^{(\nu)}) + g(h, z_n, f_n, \bigtriangledown f_n, \ldots, \bigtriangledown^k f_n). \tag{210$'$}$$

Здесь $\nu = 0, 1, \ldots, g$ — известная функция своих аргументов.

Из (210') следует, что

$$z_{n+1}^{(\nu+1)} = z_{n+1}^{(\nu)} + hæ_k \left(f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}^{(\nu)}) - f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}^{(\nu-1)}) \right), \quad \nu = 1, 2, \ldots .$$

Итерации повторяются до тех пор, пока в пределах заданной точности не установятся приближения к решению. Итерационный процесс (210) сходится к решению z_{n+1} уравнения (208)

$$z_{n+1} = z_n + h\sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n - hæ_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + hæ_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}), \tag{211}$$

если

$$h^2 æ_k L < 1, \tag{212}$$

где $L = \max \left| \dfrac{\partial f}{\partial y} \right|$. Обозначая P_{n+1} приближение к z_{n+1}, полученное по явной формуле (207):

$$P_{n+1} = z_n + h\sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n, \tag{213}$$

формулу (211) можно представить так:

$$z_{n+1} = P_{n+1} - hæ_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + hæ_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}).$$

Тогда итерационный процесс (210) принимает вид

$$z_{n+1}^{(\nu+1)} = P_{n+1} - hæ_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + hæ_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}^{(\nu)}). \tag{214}$$

Естественно принять P_{n+1} в качестве начального приближения $z_{n+1}^{(0)}$ для итерационного процесса (214). Тогда получим предсказывающе-исправляющий метод. После окончания итерационного процесса решение y_{n+1} уравнения (199) находится по формуле (209):

$$y_{n+1}^{(\nu+1)} = y_n + hz_{n+1}^{(\nu+1)}. \tag{215}$$

Теперь рассмотрим общий случай интегрирования дифференциального уравнения (167) с правой частью, зависящей от производной. В этом случае формула (208) записывается так:

$$z_{n+1} = z_n + h\sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n - hæ_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + hæ_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}, y'_{n+1}), \tag{216}$$

а формула (191) для производной —

$$y'_{n+1} = y'_n + h\sum_{i=0}^{k} \gamma_i \bigtriangledown^i f_n - h\gamma_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + h\gamma_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}, y'_{n+1}). \tag{217}$$

Итерационный процесс для отыскания решения уравнений (216), (217) может быть организован следующим образом. Допустим, что мы имеем некоторые начальные приближения для производной ${y'}^{(0)}_{n+1}$ и вспомогательной переменной $z^{(0)}_{n+1}$. Эти начальные приближения подставляются в соотношения

$${y'}^{(\nu+1)}_{n+1} = y'_n + h\sum_{i=0}^{k} \gamma_i \bigtriangledown^i f_n - h\gamma_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + h\gamma_k f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu)}_{n+1}, {y'}^{(\nu)}_{n+1}) \tag{218}$$

и

$$z^{(\nu+1)}_{n+1} = z_n + h\sum_{i=0}^{k} æ_i \bigtriangledown^i f_n - hæ_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + hæ_k f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu)}_{n+1}, {y'}^{(\nu)}_{n+1}), \tag{219}$$

по которым вычисляются исправленные значения производной ${y'}^{(\nu+1)}_{n+1}$ и вспомогательной переменной $z^{(\nu+1)}_{n+1}$. Вместо (218), (219) могут быть использованы соотношения

$${y'}^{(\nu+1)}_{n+1} = h\gamma_k f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu)}_{n+1}, {y'}^{(\nu)}_{n+1}) + g'(h, y'_n, f_n, \bigtriangledown f_n, \ldots, \bigtriangledown^k f_n), \tag{218$'$}$$

$$z^{(\nu+1)}_{n+1} = hæ_k f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu)}_{n+1}, {y'}^{(\nu)}_{n+1}) + g(h, z_n, f_n, \bigtriangledown f_n, \ldots, \bigtriangledown^k f_n), \tag{219$'$}$$

где g' и g — известные функции своих аргументов. Из (218'), (219') следует, что уточнение значений может производиться также по формулам

$${y'}^{(\nu+1)}_{n+1} = {y'}^{(\nu)}_{n+1} + h\gamma_k \left(f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu)}_{n+1}, {y'}^{(\nu)}_{n+1}) - f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu-1)}_{n+1}, {y'}^{(\nu-1)}_{n+1}) \right),$$

$$z^{(\nu+1)}_{n+1} = z^{(\nu)}_{n+1} + hæ_k \left(f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu)}_{n+1}, {y'}^{(\nu)}_{n+1}) - f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu-1)}_{n+1}, {y'}^{(\nu-1)}_{n+1}) \right).$$

Итерации повторяются до тех пор, пока в пределах заданной точности не установятся приближения к y'_{n+1} и z_{n+1}. Итерационный процесс (218), (219) сходится к решению системы уравнений (217), (216), если правая часть этой системы удовлетворяет по переменным z_{n+1} и y'_{n+1} условию Липшица с константой меньше единицы, а именно, если выполняется следующее соотношение:

$$\max\left\{ h\gamma_k\left(h \max\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right| + \max\left|\frac{\partial f}{\partial y'}\right|\right), \quad hæ_k\left(h \max\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right| + \max\left|\frac{\partial f}{\partial y'}\right|\right)\right\} < 1. \tag{220}$$

Обозначим

$$L_y = \max\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right|, \quad L_{y'} = \max\left|\frac{\partial f}{\partial y'}\right|, \quad L = \max(L_y, L_{y'}).$$

Из выражений (51) для γ_i и (184) для $æ_i$ следует, что $\gamma_i > æ_i$ для $i > 0$ и $\gamma_0 = æ_0$. Поэтому условие сходимости (220) может быть записано в виде

$$\gamma_k L h(1+h) < 1. \tag{220$'$}$$

Обозначая P_{n+1} приближение к z_{n+1}, полученное по явной формуле (207), а через P'_{n+1} — приближение к y'_{n+1}, полученное по явной формуле Адамса (178)

$$P'_{n+1} = y'_n + h\sum_{i=0}^{k}\gamma_i \bigtriangledown^i f_n, \tag{221}$$

формулы (217) и (216) можно представить так:

$$y'_{n+1} = P'_{n+1} - h\gamma_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + h\gamma_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}, y'_{n+1}),$$

$$z_{n+1} = P_{n+1} - h\text{æ}_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + h\text{æ}_k f(x_{n+1}, y_n + hz_{n+1}, y'_{n+1}).$$

Тогда итерационный процесс (218), (219) примет вид

$$y'^{(\nu+1)}_{n+1} = P'_{n+1} - h\gamma_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + h\gamma_k f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu)}_{n+1}, y'^{(\nu)}_{n+1}), \tag{222}$$

$$z^{(\nu+1)}_{n+1} = P_{n+1} - h\text{æ}_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + h\text{æ}_k f(x_{n+1}, y_n + hz^{(\nu)}_{n+1}, y'^{(\nu)}_{n+1}). \tag{223}$$

Естественно принять P'_{n+1} и P_{n+1} в качестве начальных приближений $y'^{(0)}_{n+1}$ и $z^{(0)}_{n+1}$ для итерационного процесса (222), (223). Тогда получим предсказывающе-исправляющий метод. После окончания итерационного процесса решение y_{n+1} уравнения (199)

$$y_{n+1} = y_n + \bigtriangledown y_n + h^2\sum_{i=0}^{k}\text{æ}_i \bigtriangledown^i f_n - h^2\text{æ}_k \sum_{i=0}^{k} \bigtriangledown^i f_n + h^2\text{æ}_k f(x_{n+1}, y_{n+1}, y'_{n+1}),$$

находится по формуле (215).

13.5. Построение начальных значений. Для того чтобы можно было находить решение y_{n+1} дифференциального уравнения (179) с помощью разностных формул (207), (211), (209), необходимо иметь значения решения y_n, вспомогательной переменной z_n и конечных разностей $\bigtriangledown^i f_n$, вычисленные в точке $x = x_n$. Для того чтобы найти решение y_{n+1} дифференциального уравнения (167) с помощью разностных формул (178), (217), (207), (216), (209), необходимо иметь еще и значение y'_n. В начале интегрирования величина z_n и конечные разности $\bigtriangledown^i f_n$ неизвестны. Поэтому использованию данных формул численного интегрирования должно предшествовать вычисление указанных неизвестных величин. Эти величины могут быть вычислены одношаговыми методами. Расмотренные в данной главе конечно-разностные схемы также могут быть использованы для этого. Как и для уравнений первого порядка, определение необходимых для счета начальных значений называется разгоном.

Перейдем к описанию процедуры разгона для методов Штермера, основанной на применении конечно-разностных формул с последовательно увеличивающимся порядком аппроксимации. В частности, нам понадобится явная формула (175)

$$y_1 = y_0 + hy'_0 + h^2\sum_{i=0}^{k}\mu_i \bigtriangledown^i f_n,$$

которую представим в виде

$$z_1 = y'_0 + h\sum_{i=0}^{k}\mu_i \bigtriangledown^i f_n, \tag{224}$$

$y_1 = y_0 + hz_1$.

Рассмотрим сначала процедуру вычисления начальных значений для уравнения (179). Используя начальные условия (168) и явную формулу (224) при $k = 0$ (что соответствует первому порядку аппроксимации), вычисляем

$$\begin{cases} z_1^{(1)} = y_0' + \dfrac{1}{2}\, hf_0, \\ y_1^{(1)} = y_0 + hz_1^{(1)}. \end{cases} \tag{225}$$

При помощи формулы (207) при $k = 0$ (что также соответствует первому порядку аппроксимации) вычисляем

$$\begin{cases} z_2^{(1)} = z_1^{(1)} + hf_1^{(1)}, \\ y_2^{(1)} = y_1^{(1)} + hz_2^{(1)}. \end{cases} \tag{226}$$

Погрешность $z_1^{(1)}$, $z_2^{(1)}$ составляет $O(h^2)$, погрешность $y_1^{(1)}, y_2^{(1)}$ — $O(h^3)$. Находим $f_2^{(1)}$, $\bigtriangledown f_2^{(1)}$, $\bigtriangledown^2 f_2^{(1)}$ и полагаем

$$\bigtriangledown^2 f_0 = \bigtriangledown^2 f_1 = \bigtriangledown^2 f_2^{(1)}, \quad \bigtriangledown f_1 = \bigtriangledown f_2^{(1)} - \bigtriangledown^2 f_2^{(1)}, \quad \bigtriangledown f_0 = \bigtriangledown f_1 - \bigtriangledown^2 f_1.$$

Используя формулы (224) и (207) и учитывая в них разности до второго порядка включительно (что соответствует третьему порядку аппроксимации), вычисляем

$$\begin{cases} z_1^{(2)} = y_0' + h\Big(\dfrac{1}{2}\, f_0 + \dfrac{1}{6}\, \bigtriangledown f_0 + \dfrac{1}{8}\, \bigtriangledown^2 f_0\Big), \\ y_1^{(2)} = y_0 + hz_1^{(2)}, \end{cases} \tag{227}$$

$$\begin{cases} z_2^{(2)} = z_1^{(2)} + h\Big(f_1^{(2)} + \dfrac{1}{12}\, \bigtriangledown^2 f_1\Big), \\ y_2^{(2)} = y_1^{(2)} + hz_2^{(2)}, \end{cases} \tag{228}$$

$$\begin{cases} z_3^{(2)} = z_2^{(2)} + h\Big(f_2^{(2)} + \dfrac{1}{12}\, \bigtriangledown^2 f_2^{(2)}\Big), \\ y_3^{(2)} = y_2^{(2)} + hz_3^{(2)}, \end{cases} \tag{229}$$

$$\begin{cases} z_4^{(2)} = z_3^{(2)} + h\Big(f_3^{(2)} + \dfrac{1}{12}\, \bigtriangledown^2 f_3^{(2)}\Big), \\ y_4^{(2)} = y_3^{(2)} + hz_4^{(2)}. \end{cases} \tag{230}$$

Погрешность $z_1^{(2)}$, $z_2^{(2)}$, $z_3^{(2)}$, $z_4^{(2)}$ составляет $O(h^4)$, погрешность $y_1^{(2)}$, $y_2^{(2)}$, $y_3^{(2)}$, $y_4^{(2)}$ — $O(h^5)$. Находим $f_4^{(2)}$, $\bigtriangledown f_4^{(2)}$, $\bigtriangledown^2 f_4^{(2)}$, $\bigtriangledown^3 f_4^{(2)}$, $\bigtriangledown^4 f_4^{(2)}$. Положив

$$\bigtriangledown^4 f_0 = \bigtriangledown^4 f_1 = \bigtriangledown^4 f_2 = \bigtriangledown^4 f_3 = \bigtriangledown^4 f_4^{(2)},$$

можем вычислить с помощью соотношений (116) конечные разности $\bigtriangledown^3 f_0, \bigtriangledown^2 f_0, \bigtriangledown f_0$. Далее, используя формулу (224) при $k = 4$ (что соответствует пятому порядку аппроксимации), вычисляем

$$\begin{cases} z_1^{(3)} = y_0' + h\Big(\dfrac{1}{2}\, f_0 + \dfrac{1}{6}\, \bigtriangledown f_0 + \dfrac{1}{8}\, \bigtriangledown^2 f_0 + \dfrac{19}{180}\, \bigtriangledown^3 f_0 + \dfrac{3}{32}\, \bigtriangledown^4 f_0\Big), \\ y_1^{(3)} = y_0 + hz_1^{(3)}. \end{cases} \tag{231}$$

Таким образом, в описываемой процедуре разгона итерационным способом мы получаем на третьем этапе в точке x_1 значение решения y_1 с погрешностью $O(h^7)$, промежуточную переменную z_1 с погрешностью $O(h^6)$, а конечные разности

$$\begin{aligned}
&\nabla^4 f_1 = \nabla^4 f_0, \\
&\nabla^3 f_1 = \nabla^3 f_0 + \nabla^4 f_1 = \nabla^3 f_0 + \nabla^4 f_0, \\
&\nabla^2 f_1 = \nabla^2 f_0 + \nabla^3 f_1 = \nabla^2 f_0 + \nabla^3 f_0 + \nabla^4 f_0, \\
&\nabla f_1 = \nabla f_0 + \nabla^2 f_1 = \nabla f_0 + \nabla^2 f_0 + \nabla^3 f_0 + \nabla^4 f_0
\end{aligned} \tag{232}$$

с погрешностью $O(h^5)$. Если ограничиться этими разностями, то численное интегрирование уравнения (179) можно далее продолжить по формулам (207), (211), (209) с $k = 4$ (что соответствует пятому порядку аппроксимации), начиная с $n = 1$. Выполнив по этим формулам три шага и вычислив решение в точках x_2, x_3, x_4, получим в точке $x = x_4$ фронт $\nabla^i f_4$, $i = 0, 1, 2, 3, 4$ с погрешностью $O(h^7)$.

Если же после вычисления решения y_1 продолжить разгон по формуле (207) с $k = 4$ (что соответствует пятому порядку аппроксимации), вычислить решение $y_i^{(3)}$ в узлах x_i, $i = 2, 3, 4, 5, 6$, по ним составить конечные разности $\nabla^i f_6^{(3)}$, а потом разности $\nabla^i f_0$, $i = 1, 2, \ldots, 6$, и снова применить формулу (224) при $k = 6$, то можно вычислить $y_1^{(4)}$ с погрешностью $O(h^9)$, промежуточную переменную $z_1^{(4)}$ с погрешностью $O(h^8)$, а конечные разности $\nabla^i f_1$ с погрешностью $O(h^7)$.

Рассмотрим теперь вычисление начальных значений для уравнения (167). Предложенная схема разгона сохраняется и в этом случае. При этом для вычисления значений производной y' используется аналогичный итерационный процесс, основанный на рекуррентном применении экстраполяционной формулы Адамса (178).

Вся схема может быть представлена следующим образом. Вычисляются $z_1^{(1)}$, $y_1^{(1)}$ по формулам (225) и определяется ${y'}_1^{(1)}$ двукратным применением формулы (178): первый раз — с использованием только двух первых членов:

$$ {y'}_1^{(1)} = y'_0 + h f_0, $$

и вычислением $f_1^{(1)}$, $\nabla f_1^{(1)}$, $\nabla f_0 = \nabla f_1^{(1)}$, второй раз — с использованием первых трех членов (что соответствует второму порядку аппроксимации):

$$ {y'}_1^{(1)} = y'_0 + h\Big(f_0 + \frac{1}{2}\ \nabla f_0\Big). $$

Вычисляются $z_2^{(1)}$, $y_2^{(1)}$ по формулам (226) и определяется

$$ {y'}_2^{(1)} = {y'}_1^{(1)} + h\Big(f_1^{(1)} + \frac{1}{2}\ \nabla f_1^{(1)}\Big). $$

Погрешность ${y'}_1^{(1)}$ и ${y'}_2^{(1)}$ составляет $O(h^3)$. Вычисляются $z_1^{(2)}$, $y_1^{(2)}$ с помощью (227) и определяется

$$ {y'}_1^{(2)} = y'_0 + h\Big(f_0 + \frac{1}{2}\ \nabla f_0 + \frac{5}{12}\ \nabla^2 f_0\Big). $$

Вычисляются $z_2^{(2)}$, $y_2^{(2)}$ с помощью (228) и определяется

$$ {y'}_2^{(2)} = {y'}_1^{(2)} + h\Big(f_1^{(2)} + \frac{1}{2}\ \nabla f_1^{(2)} + \frac{5}{12}\ \nabla^2 f_1\Big). $$

Вычисляются $z_3^{(2)}$, $y_3^{(2)}$ с помощью (229) и определяется

$$y'^{(2)}_3 = y'^{(2)}_2 + h\Big(f_2^{(2)} + \frac{1}{2}\ \nabla f_2^{(2)} + \frac{5}{12}\ \nabla^2 f_2^{(2)}\Big).$$

Погрешность $y'^{(2)}_1$, $y'^{(2)}_2$ и $y'^{(2)}_3$ составляет $O(h^4)$. Находим $f_3^{(2)}$, $\nabla f_3^{(2)}$, $\nabla^2 f_3^{(2)}$, $\nabla^3 f_3^{(2)}$ и, положив

$$\nabla^3 f_0 = \nabla^3 f_1 = \nabla^3 f_2 = \nabla^3 f_3^{(2)},$$

пересчитываем конечные разности, необходимые для определения значений производной по экстраполяционной формуле (178) с учетом разностей до третьего порядка включительно.

Вычисляем $z_4^{(2)}$, $y_4^{(2)}$ с помощью (230) и определяем новые значения производной

$$y'^{(3)}_1 = y'_0 + h\Big(f_0 + \frac{1}{2}\ \nabla f_0 + \frac{5}{12}\ \nabla^2 f_0 + \frac{3}{8}\ \nabla^3 f_0\Big), \qquad f_1^{(3)} = f(x_1, y_1^{(2)}, y'^{(3)}_1),$$

$$y'^{(3)}_2 = y'^{(3)}_1 + h\Big(f_1^{(3)} + \frac{1}{2}\ \nabla f_1^{(3)} + \frac{5}{12}\ \nabla^2 f_1 + \frac{3}{8}\ \nabla^3 f_1\Big), \qquad f_2^{(3)} = f(x_2, y_2^{(2)}, y'^{(3)}_2),$$

$$y'^{(3)}_3 = y'^{(3)}_2 + h\Big(f_2^{(3)} + \frac{1}{2}\ \nabla f_2^{(3)} + \frac{5}{12}\ \nabla^2 f_2^{(3)} + \frac{3}{8}\ \nabla^3 f_2\Big), \qquad f_3^{(3)} = f(x_3, y_3^{(2)}, y'^{(3)}_3),$$

$$y'^{(3)}_4 = y'^{(3)}_3 + h\Big(f_3^{(3)} + \frac{1}{2}\ \nabla f_3^{(3)} + \frac{5}{12}\ \nabla^2 f_3^{(3)} + \frac{3}{8}\ \nabla^3 f_3^{(3)}\Big), \qquad f_4^{(3)} = f(x_4, y_4^{(2)}, y'^{(3)}_4).$$

Погрешность $y'^{(3)}_1$, $y'^{(3)}_2$, $y'^{(3)}_3$, $y'^{(3)}_4$ составляет $O(h^5)$.

Далее разгон продолжается так же, как для уравнения (179), т.е. по формулам (231) вычисляются $z_1^{(3)}$, $y_1^{(3)}$ и определяется производная

$$y'^{(4)}_1 = y'_0 + h\Big(f_0 + \frac{1}{2}\ \nabla f_0 + \frac{5}{12}\ \nabla^2 f_0 + \frac{3}{8}\ \nabla^3 f_0 + \frac{251}{720}\ \nabla^4 f_0\Big),$$

погрешность которой имеет порядок $O(h^6)$.

Таким образом, в описываемой процедуре разгона итерационным способом мы получаем на данном этапе в точке x_1 значение решения y_1 с погрешностью $O(h^7)$, производную y'_1 и промежуточную переменную z_1 с погрешностью $O(h^6)$, а конечные разности (232) с погрешностью $O(h^5)$. Если ограничиться разностями до четвертого порядка включительно, то численное интегрирование уравнения (167) можно далее продолжить по формулам (178), (217), (207), (216) и (209) с $k = 4$ (что соответствует пятому порядку аппроксимации), начиная с $n = 1$. Выполнив по этим формулам три шага и вычислив решение и производную в точках x_2, x_3, x_4, получим в точке $x = x_4$ фронт $\nabla^i f_4$, $i = 0, 1, 2, 3, 4$, с погрешностью $O(h^6)$.

Данный способ позволяет в несколько раз уменьшить на разгоне число вычислений правых частей дифференциального уравнения по сравнению с вычислением начальных значений одношаговыми методами Рунге-Кутта.

13.6. Вычисление решения между узлами сетки. Рассмотрим случай, когда точка x^*, в которой требуется определить решение дифференциального уравнения (167), не совпадает ни с одним узлом x_n сетки, на которой вычисляется решение разностного уравнения. В этом случае можно поступить следующим образом. Предположим, что точка x^* расположена между двумя соседними узлами: $x_{n-1} < x^* < x_n$, в которых вычислено решение разностного уравнения. Обозначим

$$\xi = \frac{x^* - x_n}{h}.$$

Тогда $-1 < \xi < 0$. Проинтегрируем соотношение (170) по отрезку $[x_n, x^*]$. Учитывая (169), имеем

$$
\begin{aligned}
y(x^*) - y(x_n) - \xi h y'(x_n) &= \int\limits_{x_n}^{x^*} dx \int\limits_{x_n}^{x} y''(\zeta)\, d\zeta = \\
&= h^2 \int\limits_0^{\xi} d\zeta \int\limits_0^{\zeta} L_{k,n}(x_n + th)\, dt + h^2 \int\limits_0^{\xi} d\zeta \int\limits_0^{\zeta} r_{k,n}(x_n + th)\, dt = \\
&= h^2 \sum_{i=0}^{k} \mu_i(\xi) \bigtriangledown^i f_n + \rho,
\end{aligned}
\tag{233}
$$

где

$$
\mu_i(\xi) = \frac{1}{i!} \int\limits_0^{\xi} d\zeta \int\limits_0^{\zeta} t(t+1)\dots(t+i-1)\, dt, \tag{234}
$$

$$
\rho = O(h^{k+3}).
$$

Отбрасывая в (233) остаточный член, получаем конечно-разностную формулу для вычисления искомого решения

$$
y(x^*) \cong y_n + \xi h y'_n + h^2 \sum_{i=0}^{k} \mu_i(\xi) \bigtriangledown^i f_n. \tag{235}
$$

Приведем несколько значений $\mu_i(\xi)$:

$$
\begin{aligned}
\mu_0(\xi) &= \frac{1}{2}\, \xi^2, \\
\mu_1(\xi) &= \frac{1}{6}\, \xi^3, \\
\mu_2(\xi) &= \frac{1}{24}\, (\xi^4 + 2\xi^3), \\
\mu_3(\xi) &= \frac{1}{360}\, (3\xi^5 + 15\xi^4 + 20\xi^3), \\
\mu_4(\xi) &= \frac{1}{1440}\, (2\xi^6 + 18\xi^5 + 55\xi^4 + 60\xi^3).
\end{aligned}
$$

Теперь рассмотрим вычисление решения $y(x^*)$ для дифференциального уравнения (179). Если при интегрировании (179) значение производной не вычисляется, то в формуле (235) величина y'_n неизвестна. Однако она может быть найдена, например, из соотношения (180)

$$
y'(x_n)h = y(x_n) - y(x_{n-1}) - h^2 \sum_{i=0}^{k} \nu_i \bigtriangledown^i f_n - \rho_2. \tag{236}
$$

Подставляя (236) в (233), находим

$$
\begin{aligned}
y(x^*) &= (1+\xi) y(x_n) - \xi y(x_{n-1}) - \xi h^2 \sum_{i=0}^{k} \nu_i \bigtriangledown^i f_n - \xi \rho_2 + h^2 \sum_{i=0}^{k} \mu_i(\xi) \bigtriangledown^i f_n + \rho = \\
&= (1+\xi) y(x_n) - \xi y(x_{n-1}) + h^2 \sum_{i=0}^{k} (\mu_i(\xi) - \xi \nu_i) \bigtriangledown^i f_n + \rho - \xi \rho_2.
\end{aligned}
\tag{237}
$$

Отбрасывая в (237) остаточный член, получаем конечно-разностную формулу для определения искомого решения

$$y(x^*) \cong (1+\xi)y_n - \xi y_{n-1} + h^2 \sum_{i=0}^{k} \mu_i^*(\xi) \nabla^i f_n, \tag{238}$$

где

$$\mu_i^*(\xi) = \mu_i(\xi) - \xi\nu_i.$$

Приведем несколько коэффициентов $\mu_i^*(\xi)$:

$$\mu_0^*(\xi) = \frac{1}{2}(\xi^2+\xi),$$

$$\mu_1^*(\xi) = \frac{1}{6}(\xi^3-\xi),$$

$$\mu_2^*(\xi) = \frac{1}{24}(\xi^4+2\xi^3-\xi),$$

$$\mu_3^*(\xi) = \frac{1}{360}(3\xi^5+15\xi^4+20\xi^3-8\xi),$$

$$\mu_4^*(\xi) = \frac{1}{1440}(2\xi^6+18\xi^5+55\xi^4+60\xi^3-21\xi).$$

Формула (238) может быть использована также для нахождения решения дифференциального уравнения (167).

13.7. Практические способы оценки погрешности. Рассмотрим способ оценки локальной погрешности для метода прогноза и коррекции, основанного на формулах Штермера (186′), (196′). Из выражений (185) и (195) для погрешностей предсказывающей (186′) и исправляющей (196′) формул следуют асимптотические оценки локальных погрешностей явного и неявного методов Штермера:

$$\rho_m^{(P)} = u(x_m) - u_m^{(P)} = æ_{k+1} h^{k+3} u^{(k+3)}(x_m) + O(h^{k+4}), \tag{239}$$

$$\rho_m^{(C)} = u(x_m) - u_m^{(C)} = \bar{æ}_{k+1} h^{k+3} u^{(k+3)}(x_m) + O(h^{k+4}). \tag{240}$$

Погрешность приближенного решения $u_m^{(\nu)}$ разностного уравнения (196′), полученного в результате уточнения предсказанного значения $u_m^{(0)} = u_m^{(P)}$, имеет тот же главный член, что и в (240). Поэтому

$$u(x_m) - u_m^{(\nu)} = \rho_m^{(\nu)} = \bar{æ}_{k+1} h^{k+3} u^{(k+3)}(x_m) + O(h^{k+4}). \tag{240′}$$

Решая совместно (239), (240′) относительно $h^{k+3}u^{(k+3)}(x_m)$, имеем

$$h^{k+3}u^{(k+3)}(x_m) = \frac{u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}}{æ_{k+1} - \bar{æ}_{k+1}} + O(h^{k+4}).$$

Отсюда получаем апостериорные асимптотические оценки локальной погрешности предсказанного значения решения $u_m^{(0)}$

$$\rho_m^{(P)} = \frac{æ_{k+1}}{æ_{k+1} - \bar{æ}_{k+1}}(u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}) + O(h^{k+4}) \tag{241}$$

и исправленного значения $u_m^{(\nu)}$

$$\rho_m^{(\nu)} = \frac{\bar{æ}_{k+1}}{æ_{k+1} - \bar{æ}_{k+1}}(u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}) + O(h^{k+4}). \tag{242}$$

С учетом (197)

$$\rho_m^{(P)} = \frac{æ_{k+1}}{æ_k}\,(u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}) + O(h^{k+4}), \tag{241'}$$

$$\rho_m^{(\nu)} = \frac{\bar{æ}_{k+1}}{æ_k}\,(u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}) + O(h^{k+4}). \tag{242'}$$

Оценка (242′) может быть использована для уточнения приближенного решения $u_m^{(\nu)}$:

$$u_m = u_m^{(\nu)} + \frac{\bar{æ}_{k+1}}{æ_k}\,(u_m^{(\nu)} - u_m^{(0)}), \tag{243}$$

при этом локальная погрешность u_m составляет $O(h^{k+4})$.

Оценки (241′) и (242′) остаются в силе, если для вычисления значений $u_m^{(0)}$ и $u_m^{(\nu)}$ использовать не точные значения решения $u(x_m)$ и $\bigtriangledown u(x_m) = u(x_m) - u(x_{m-1})$, а приближенные значения u_m, $\bigtriangledown u_m = u_m - u_{m-1}$, имеющие погрешности

$$u(x_m) - u_m = O(h^{k+4}), \quad \bigtriangledown u(x_m) - \bigtriangledown u_m = O(h^{k+4}),$$

а вместо точных значений конечных разностей $\bigtriangledown^i f(x_m, u(x_m))$ использовать их приближенные значения $\bigtriangledown^i f(x_m, u_m)$, вычисленные с погрешностью $O(h^{k+2})$.

Практическое значение этого замечания состоит в том, что при интегрировании дифференциального уравнения с помощью рассматриваемого метода прогноза и коррекции использование оценок (241′), (242′) обосновано только тогда, когда производится уточнение найденного решения по формуле (243).

Как следует из (183), локальная погрешность u_{m+1} равна

$$u(x_{m+1}) - u_{m+1} = h^2 æ_{k+1} \bigtriangledown^{k+1} f_m + O(h^{k+4}),$$

откуда получается асимптотическая оценка

$$u(x_{m+1}) - u_{m+1} \cong h^2 æ_{k+1} \bigtriangledown^{k+1} f_m. \tag{244}$$

Таким образом, асимптотическая оценка равна первому отброшенному члену разностной формулы (183). В частности, оценка

$$u(x_1) - u_1 \cong h^2 æ_{k+1} \bigtriangledown^{k+1} f_0,$$

вытекающая из (244), может быть использована для оценки точности при разгоне.

13.8. Изменение шага интегрирования. Все, что было сказано об изменении шага интегрирования для конечно-разностных методов решения дифференциальных уравнений первого порядка, переносится на методы Штермера. Как следует из (207) и (208), переход от шага h к новому шагу h^* (154) означает: во-первых, переход от конечных разностей $\bigtriangledown^i f_n$, составленных по узлам сетки (3), к конечным разностям $\bigtriangledown^i f_n^*$, составленным по другим узлам

$$x_n - ih^*, \quad i = 0, 1, \ldots, k; \tag{245}$$

во-вторых, переход от значений переменной z_n на сетке (3) к значениям этой переменной z_n^* на другой сетке (245). Переход к конечным разностям $\bigtriangledown^i f_n^*$ выполняется по формулам (159), (161)–(163).

Теперь получим формулы для пересчета значений переменной z_n. Найдем коэффициенты в представлении

$$z_n^* = C_1 z_n + h(C_2 f_n + C_3 \bigtriangledown f_n + C_4 \bigtriangledown^2 f_n + \ldots + C_{k+2} \bigtriangledown^k f_n) + O(h^{k+2}).$$

Для этого достаточно разложить, как и при пересчете фронта, левую и правую части этого равенства по степеням h и приравнять коэффициенты при одинаковых степенях h. Приведем первые шесть коэффициентов этого представления:

$$C_1 = 1,$$

$$C_2 = \frac{1}{2}(1-\xi),$$

$$C_3 = \frac{1}{6}(\xi-1)(\xi+1),$$

$$C_4 = \frac{1}{24}(\xi-1)(-\xi^2+\xi+1),$$

$$C_5 = \frac{1}{360}(\xi-1)(3\xi^3-12\xi^2+8\xi+8),$$

$$C_6 = \frac{1}{1440}(\xi-1)(-2\xi^4+16\xi^3-39\xi^2+21\xi+21).$$

Аналогично можно получить коэффициенты в разложении z_n^* через новый фронт:

$$z_n^* = C_1^* z_n + h(C_2^* f_n + C_3^* \nabla f_n^* + C_4^* \nabla^2 f_n^* + \ldots + C_{k+2}^* \nabla^k f_n^*) + O(h^{k+2}).$$

Приведем первые шесть коэффициентов этого разложения:

$$C_1^* = 1,$$

$$C_2^* = \frac{1}{2}(1-\xi),$$

$$C_3^* = \frac{1}{6\xi}(\xi^2-1),$$

$$C_4^* = \frac{1}{24\xi^2}(\xi^3-2\xi+1),$$

$$C_5^* = \frac{1}{360\xi^3}(8\xi^4-20\xi^2+15\xi-3),$$

$$C_6^* = \frac{1}{1440\xi^4}(21\xi^5-60\xi^3+55\xi^2-18\xi+2).$$

Полученные формулы пересчета конечных разностей и промежуточной переменной z_n позволяют произвольно менять шаг интегрирования в методах Штермера.

В заключение приведем список литературы, рекомендуемой к гл. 2: [3–9, 12–15, 17, 19, 22, 24–26, 28, 29, 31, 33–35, 38, 39, 41–43, 45].