8. Практика использования неявных методов.

Мы уже говорили о том, что неявные конечноразностные методы в общем случае требуют, чтобы на каждом шаге интегрирования решалось нелинейное уравнение. Более точно: если мы решаем задачу Коши для системы из m скалярных дифференциальных уравнений, то на каждом шаге нужно решать систему из m нелинейных уравнений.

Зачем же тогда вообще рассматривают неявные методы? Причин здесь – несколько. Одну из них мы запишем.

Как правило, для неявных методов значение константы аппроксимации C_A намного меньше, чем для явных методов того же порядка аппроксимации.

Разумеется, это достаточно важно, потому что для достижения предписанного уровня точности можно в случае неявных методов применять более крупный шаг интегрирования. Есть у неявных методов и другие преимущества.

Вообще, позднее мы рассмотрим важный для практики класс задач Коши, которые успешно решаются неявными методами, но практически не могут быть решены явными методами с требуемой точностью за разумное время.

А теперь мы обсудим, как именно можно решать разностное уравнение для неявного метода на очередном шаге интегрирования.

Итак, нужно решить уравнение

$$(**) \qquad \frac{1}{h} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \, y_{n+1-j} \; = \; \Phi\,(\, t_n ,\, y_{n+1-k} ,\, \ldots ,\, y_{n+1} ,\, h\,)$$

относительно y_{n+1}.

Это делают каким-либо итерационным методом, а для него нужно иметь начальное приближение.

Предположим, что для y_{n+1} имеется начальное приближение $\overset{0}{y}_{n+1}$; операция вычисления $\overset{0}{y}_{n+1}$ называется **предсказанием** (prediction).

Обычно для предсказания используют другой, *явный* метод; этот метод называют **предиктором**.

Замечание. Предиктор не обязан быть устойчивым на конечном отрезке: интегрирование им не ведётся.

Смысл этого утверждения должен быть понятен. Мы ведь *не используем* данный явный метод для численного интегрирования на всём отрезке $[\,0,T\,]$: каждый раз им делается только один шаг, и имеет значение только погрешность аппроксимации.

Вернёмся к разностному уравнению основного (т.е. неявного) метода.

Теперь перепишем уравнение (**) в виде

$$y_{n+1} \; + \; \alpha_0^{-1} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \, y_{n+1-j} \; - \; \alpha_0^{-1} h \; \Phi\,(\, t_n ,\, y_{n+1-k} ,\, \ldots ,\, y_{n+1} ,\, h\,) \; = \; 0 \; .$$

Это уравнение имеет вид $F(X) = 0$, где роль X играет y_{n+1}. При решении данного уравнения каким-либо итерационным методом операция перехода от X^k (т.е. $\overset{k}{y}_{n+1}$) к X^{k+1} (т.е. $\overset{k+1}{y}_{n+1}$) называется **коррекцией**. Сам метод (**) при этом называют **корректором**.

Какие теперь у нас есть возможности?

I. Можно применить метод Ньютона

$$X^{k+1} \; = \; X^k \; - \; F(X^k) \setminus F'(X^k) \; ,$$

для чего на каждой итерации нужно вычислять матрицу Якоби

$$F'(X^k) \; = \; I \; - \; \alpha_0^{-1} h \left[\frac{\partial \Phi}{\partial y_{n+1}} \right]_{\overset{k}{y}_{n+1}}$$

и решать соответствующую СЛАУ.

Разумеется, матрица в квадратных скобках для каждого конкретного конечноразностного метода в явном виде выражается через матрицу Якоби для правых частей исходных дифференциальных уравнений.

Иногда так и приходится поступать. Но в общем случае и вычисление матрицы Якоби, и решение СЛАУ – достаточно трудоёмкие операции.

II. Можно представить данное уравнение в виде $X = \widetilde{\Phi}(X)$, где

$$\widetilde{\Phi}(X) = \alpha_0^{-1} h\, \Phi(t_n, y_{n+1-k}, \ldots, y_{n+1}, h) - \alpha_0^{-1} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j\, y_{n+1-j},$$

и использовать метод простых итераций

$$X^{k+1} = \widetilde{\Phi}(X^k);$$

отображение $\widetilde{\Phi}$ – сжимающее при достаточно малом h (при $h \to 0$ $q \to 0$, где q – коэффициент сжатия).

Так поступают чаще всего, поскольку выкладки здесь достаточно простые. При малых h (а шаг мы и так берём малым, чтобы обеспечить малую локальную погрешность) сходимость будет быстрой, хотя и линейной.

Возникает вопрос: каким критерием останова воспользоваться?

Поскольку при малом h мал и коэффициент сжатия q, то можно (как и в методе Ньютона) пользоваться простейшим критерием останова:

$$\| y_{n+1}^{k+1} - y_{n+1}^{k} \| \leqslant \varepsilon .$$

Разумеется, ε здесь нужно брать намного меньшим, чем тот уровень локальной погрешности, который мы хотим обеспечить на текущем шаге интегрирования. Только в этом случае мы имеем право говорить, что мы действуем с помощью именно данного конкретного неявного метода, и пользоваться оценками погрешностей, полученными для него.

В этом случае говорят, что осуществляется **коррекция до сходимости**.

В данной ситуации нельзя заранее предсказать, сколько итераций будет выполнено на данном шаге интегрирования. К тому же объём вычислений для разных узлов сетки может существенно различаться.

Однако если мы готовы в случае необходимости уменьшить величину шага h (и тем самым увеличить скорость сходимости), то сходимость всегда может быть достигнута за фиксированное число итераций. Поэтому при интегрировании с автоматическим выбором шага обычно используют другой способ организации итерационного процесса.

Другой способ: на каждом шаге интегрирования делать ровно K итераций.

При этом K обычно невелико: 3, 2 или даже 1.

Если после завершения последней итерации условие останова не выполняется, шаг уменьшают.

Для данного способа существует стандартная нотация.

Обозначают: P – операция предсказания, C – операция коррекции, E – вычисление функции Φ для очередного значения аргумента y_{n+1}.

Остальные аргументы функции Φ, задающей правую часть разностного уравнения корректора, остаются в ходе итераций неизменными.

Здесь следует отметить, что для вычисления Φ нужно, вообще говоря, вычислить несколько значений функции f из правой части дифференциального уравнения при различных значениях её аргументов. Но те из значений функции f, которые вычислялись в предыдущих узлах сетки, уже известны и дальнейшему перевычислению не подлежат.

Поэтому во многих случаях для вычисления функции Φ на очередной итерации достаточно вычислить вновь лишь одно значение функции f.

Что касается обозначений, то:

P – prediction, C – correction, E – evaluation.

Последовательность операций на шаге: $PECE \ldots CE$ (последнее "E" нужно уже для следующего шага). Сокращённо: $P(EC)^K E$.

Использование указанного способа нахождения очередного значения y_{n+1} фактически означает, что применяется некоторый *комбинированный* конечно-разностный метод. Относительно этого метода уместно отметить следующее обстоятельство.

Полученный комбинированный метод есть *явный* метод.

По своим свойствам он занимает промежуточное положение между предиктором и корректором. В частности, можно показать, что:

Его порядок точности совпадает с порядком p точности корректора, если только порядок аппроксимации предиктора не меньше, чем $p - K$.

Замечание. Иногда сокращают объём вычислений, отбрасывая последнее "E": $P(EC)^K$.

Сказанное выше о порядке точности комбинированного метода остаётся справедливым и в этом случае.

Наконец – о терминологии.

Изложенная схема применения неявных методов называется **методом предсказания и коррекции** (или "предиктор – корректор").

Перейдём к примерам, в которых мы построим новые явные конечноразностные методы путём комбинирования уже известных нам явных и неявных методов.