О порядке точности σ–схемы и случай $\sigma = \frac{1}{2}$

Рассмотрим обычную σ–схему для обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{dy}{dt} = F(y,t), \qquad y(t^n) = y^n,$$

в форме

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = (1-\sigma)F(y^n, t^n) + \sigma F(y^{n+1}, t^{n+1}), \qquad 0 \le \sigma \le 1.$$

1. Спектр схемы по значению σ.

- $\sigma = 0$ (явная схема, Эйлер вперёд):

$$y^{n+1} = y^n + \tau F(y^n, t^n),$$

  порядок по времени: $\mathcal{O}(\tau)$ (первый порядок).

- $\sigma = 1$ (неявная схема, Эйлер назад):

$$y^{n+1} = y^n + \tau F(y^{n+1}, t^{n+1}),$$

  порядок по времени: $\mathcal{O}(\tau)$ (первый порядок).

- $\sigma = \frac{1}{2}$ (Кранк–Николсон, метод трапеций):

$$y^{n+1} = y^n + \frac{\tau}{2}\big(F(y^n, t^n) + F(y^{n+1}, t^{n+1})\big),$$

  обладает вторым порядком по времени: глобальная погрешность $\mathcal{O}(\tau^2)$.

2. Почему $\sigma = \frac{1}{2}$ даёт второй порядок (краткое доказательство через разложение Тейлора). Запишем точное решение в точке $t^{n+1} = t^n + \tau$ через разложение Тейлора:

$$y(t^{n+1}) = y(t^n) + \tau \dot{y}(t^n) + \frac{\tau^2}{2}\ddot{y}(t^n) + \frac{\tau^3}{6} y^{(3)}(\xi),$$

где $\dot{y} = F(y,t)$ и $\xi \in (t^n, t^{n+1})$. Значит

$$\frac{y(t^{n+1}) - y(t^n)}{\tau} = F(y(t^n), t^n) + \frac{\tau}{2}\ddot{y}(t^n) + \mathcal{O}(\tau^2).$$

С другой стороны, невязка метода трапеций (Кранк–Николсон) представляется через интеграл

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} - \frac{1}{\tau} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(y(t), t)\, dt.$$

Аппроксимация интеграла правилом трапеций

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} F(y(t), t)\, dt \approx \frac{\tau}{2}\big(F(y^n, t^n) + F(y^{n+1}, t^{n+1})\big)$$

имеет локальную погрешность $\mathcal{O}(\tau^3)$ (трёхпорядковая по шагу), следовательно локальная невязка по уравнению порядка $\mathcal{O}(\tau^3)$. Глобальная ошибка (при многократном применении метода на отрезке времени) масштабируется как $\mathcal{O}(\tau^2)$. Это и даёт второй порядок точности по времени.

Альтернативный компактный аргумент через разложение Тейлора для $F(y^{n+1}, t^{n+1})$:

$$F(y^{n+1}, t^{n+1}) = F(y^n, t^n) + \tau \frac{d}{dt} F(y^n, t^n) + \mathcal{O}(\tau^2),$$

подставляя в выражение Кранк–Николсона, получаем:

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = F(y^n, t^n) + \frac{\tau}{2} \frac{d}{dt} F(y^n, t^n) + \mathcal{O}(\tau^2),$$

что совпадает с непрерывным разложением до $\mathcal{O}(\tau^2)$.

3. Локальная и глобальная погрешности.

- *Локальная погрешность (truncation error)* — погрешность, возникающая за один шаг метода при использовании точного решения в правых частях; для трапеций она равна $\mathcal{O}(\tau^3)$.
- *Глобальная погрешность* после $M \sim T/\tau$ шагов складывается как $\mathcal{O}(\tau^2)$ (поскольку $\tau^3 \cdot M \sim \tau^2$).

4. Геометрический смысл (интуиция).

- $\sigma = 0$ использует значение в начале интервала (t^n) — аппроксимирует интеграл прямоугольником слева.

- $\sigma = 1$ использует значение в конце интервала (t^{n+1}) — аппроксимирует интеграл прямоугольником справа.
- $\sigma = \frac{1}{2}$ использует среднее значений в концах интервала — аппроксимация интеграла правилом трапеций, оно лучше приближает кривую $F(t)$ на интервале, поэтому точность выше.

5. Связь с пространственной аппроксимацией. Если пространственная аппроксимация для производных выполнена центральными разностями второго порядка, то при $\sigma = \frac{1}{2}$ и корректной реализации по граничным условиям метод имеет второй порядок как по времени, так и по пространству (если ошибки по времени и по пространству не доминируют одна над другой).

6. Замечания по устойчивости и практическому применению.

- Кранк–Николсон — *условно унимодально-устойчива*: для линейных задач он неусадочно устойчив; для нелинейных систем требуется контроль сходимости (возможно, демпфирование итераций или небольшая искусственная вязкость).
- На практике при жёстких задачах (и для нелинейных систем) иногда применяют $\sigma > 1/2$ (чуть более неявное взвешивание) для увеличения демпфирования высокочастотных ошибок.
- Для задач с сильными нестационарными разрывами/ударными волнами может понадобиться добавление стабилизирующих членов (искусственная вязкость), иначе центральные схемы дают осцилляции.

Итого. При $\sigma = \frac{1}{2}$ σ–схема эквивалентна методу трапеций (Кранк–Николсон) и обеспечивает второй порядок точности по времени; это делает её хорошим компромиссом между точностью и устойчивостью для множества задач, включая описываемую квази-одномерную гемодинамику.