

2 Метод конечных разностей

В лабораторной работе №1 мы рассмотрели метод решения вариационных задач, основанный на замене исходной задачи задачей математического программирования. При этом не использовалось никаких дополнительных построений, помимо вариационной постановки.

Данная лабораторная работа посвящена другому классу методов, основанному на использовании необходимого условия экстремума функционала в простейшей задаче вариационного исчисления — уравнения Эйлера. Как известно, простейшая задача вида

$$V[y] = \int_a^b F(x, y(x), y'(x)) dx \rightarrow \text{extr}$$

где экстремум ищется на множестве функций $M = \{y(x) \mid y(x) \in C_{[a,b]}^2, y(a) = \alpha, y(b) = \beta\}$, при определенных условиях сводится к краевой задаче для уравнения Эйлера:

$$\begin{cases} \frac{\partial F(x, y, y')}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F(x, y, y')}{\partial y'} = 0, \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta. \end{cases}$$

Идея конечно-разностных методов состоит в дискретизации краевой задачи с заменой производных в ней соответствующими выражениями в конечных разностях. Ниже мы покажем, что такой подход сводит задачу к решению системы, вообще говоря, нелинейных алгебраических уравнений. Порядок погрешности такого приближенного решения определяется шагом дискретизации и выбором конечно-разностной аппроксимации производных. Вначале мы рассмотрим случай линейного уравнения Эйлера, для которого задача сильно упрощается, а затем обратимся к общему случаю.

2.1 Метод конечных разностей в случае линейного уравнения Эйлера

Пусть применение необходимого условия экстремума приводит к краевой задаче вида

$$\begin{cases} y''(x) = p(x)y'(x) + q(x)y(x) + r(x), & x \in [a, b], \\ y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta. \end{cases}$$

Заменим производные $y'(x)$ и $y''(x)$ их конечно-разностными аппроксимациями. Сначала разобьем весь промежуток $[a, b]$ на $N + 1$ равных подынтервалов точками $x_i = a + ih$, $i = \overline{0, N}$, где $h = \frac{b-a}{N+1}$. Величина h называется шагом метода и во многом определяет его точность.

Если $y(x)$ — точное решение вариационной задачи, то в узлах разбиения выполняется равенство

$$y''(x_i) = p(x_i)y'(x_i) + q(x_i)y(x_i) + r(x_i), i = \overline{1, N}.$$

Разложим решение $y(x)$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_i :

$$y(x) = y(x_i) + (x - x_i)y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2}y''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{6}y'''(x_i) + \frac{(x - x_i)^4}{24}y^{(4)}(\xi_i),$$

где $\xi \in (x, x_i)$. Заметим, что остаточный член мы записали в форме Лагранжа. В точках $x_{i+1} = x_i + h$ и $x_{i-1} = x_i - h$ получаем, соответственно,

$$y(x) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{6}y'''(x_i) + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(\xi_i^+),$$

$$y(x) = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) - \frac{h^3}{6}y'''(x_i) + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(\xi_i^-),$$

где $\xi_i^+ \in (x_i, x_{i+1})$ и $\xi_i^- \in (x_{i-1}, x_i)$.

Сложив два последних равенства, получим

$$y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) = 2y(x_i) + h^2y''(x_i) + \frac{h^4}{24}(y^{(4)}(\xi_i^+) + y^{(4)}(\xi_i^-)),$$

откуда находим

$$y''(x_i) = \frac{1}{h^2} \left[y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}) \right] - \frac{h^2}{24} \left(y^{(4)}(\xi_i^+) + y^{(4)}(\xi_i^-) \right).$$

Пользуясь теоремой о среднем значении, окончательно получаем аппроксимацию $y''(x)$

$$y''(x_i) = \underbrace{\frac{1}{h^2} \left[y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}) \right]}_{\text{центральная разность 2-го порядка}} - \frac{h^4}{24}y^{(4)}(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

Аналогичным образом можно получить формулу для первой производной:

$$y'(x_i) = \frac{1}{2h} \left[y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) \right] - \frac{h^2}{6}y'''(\eta_i), \quad \eta_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

Подставим выражения для y' и y'' в уравнение :

$$\begin{aligned} \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} = p(x_i) \left[\frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h} \right] + q(x_i)y(x_i) + r(x_i) - \\ - \frac{h^2}{12} \left[2p(x_i)y'''(\eta_i) - y^{(4)}(\xi_i) \right]. \end{aligned}$$

Если в получившемся выражении отбросить последнее слагаемое, то мы получим конечно-разностную аппроксимацию уравнения Эйлера в точках x_i . При этом погрешность аппроксимации — $O(h^2)$.

Итак, задача свелась к решению системы уравнений относительно переменных $y_i = y(x_i)$ следующего вида:

$$\begin{cases} \frac{-y_{i+1} + 2y_i - y_{i-1}}{h^2} + p(x_i) \left[\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right] + q(x_i)y_i = -r(x_i), & i = \overline{1, N} \\ y_0 = \alpha, \quad y_{N+1} = \beta. \end{cases}$$

Приведя подобные, получаем

$$-\left(1 + \frac{h}{2}p(x_i)\right)y_{i-1} + (2 + h^2q(x_i))y_i - \left(1 - \frac{h}{2}p(x_i)\right)y_{i+1} = -h^2r(x_i),$$

или, в матричной форме, $Ay = b$, где

$$A = \begin{pmatrix} 2 + h^2q(x_1) & -1 + \frac{h}{2}p(x_1) & 0 & \dots & 0 \\ -1 - \frac{h}{2}p(x_2) & 2 + h^2q(x_2) & -1 + \frac{h}{2}p(x_2) & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -1 - \frac{h}{2}p(x_N) & 2 + h^2q(x_N) \end{pmatrix},$$

$$b = \begin{pmatrix} -h^2 r(x_1) + \left(1 + \frac{h}{2} p(x_1)\right) y_0 \\ -h^2 r(x_2) \\ \vdots \\ -h^2 r(x_{N-1}) \\ -h^2 r(x_N) + \left(1 - \frac{h}{2} p(x_N)\right) y_{N+1} \end{pmatrix}$$

Заметим, что матрица системы имеет трехдиагональный вид. Это позволяет решить систему очень быстро, используя метод прогонки. Условия существования и единственности решения полученной СЛАУ определяются следующей теоремой:

Теорема. Пусть $p(x)$, $q(x)$, $r(x)$ - непрерывные на $[a, b]$ функции и, кроме того, $q(x) > 0$, $x \in [a, b]$. Тогда при $h < \frac{2}{L}$, где $L = \max_{x \in [a, b]} |p(x)|$, трехдиагональная система $Ay = b$ имеет единственное решение.

Сформулированная теорема не гарантирует, что точность приближенного решения будет $O(h^2)$. Для этого необходимо дополнительно проверить, что $y^{(4)}(x)$ непрерывна на $[a, b]$.

Для увеличения точности можно удлинить отрезок ряда Тейлора до слагаемого порядка h^5 . Тогда можно получить конечно-разностную аппроксимацию с ошибкой $O(h^4)$. Однако при этом в формулах для $y'(x_i)$ и $y''(x_i)$ появятся $y(x_{i-2})$, $y(x_{i+2})$. Возникает проблема с аппроксимацией производных на краях промежутка $[a, b]$, т.к. непонятно, какие значения должны иметь y_{-1} и y_{N+2} . Кроме того (и это значительно хуже), система уравнений перестанет быть трехдиагональной. Альтернативой такому подходу может служить метод экстраполяции Рундсона.

Формальный алгоритм метода конечных разностей для случая линейного уравнения Эйлера приведен на странице 4. Ниже приведен пример, который можно использовать при отладке.

Пример. Рассмотрим пример использования описанного алгоритма, решив численно краевую задачу для уравнения Эйлера

$$\begin{cases} y'' = -\frac{2}{x}y' + \frac{2}{x^2}y + \frac{\sin \ln x}{x^2}, & x \in [1, 2] \\ y(1) = 1, & y(2) = 2 \end{cases}$$

Решение.

Положим $N = 9$, так что $h = 0.1$. Результаты расчетов приведены в таблице ниже:

x_i	y_i	$y(x_i)$	$ y_i - y(x_i) $
1.0	1.000000	1.000000	
1.1	1.092601	1.092629	2.88×10^{-5}
1.2	1.187043	1.187084	4.17×10^{-5}
1.3	1.283337	1.283382	4.55×10^{-5}
1.4	1.381402	1.381446	4.39×10^{-5}
1.5	1.481120	1.481159	3.92×10^{-5}
1.6	1.582360	1.582392	3.26×10^{-5}
1.7	1.684990	1.685014	2.49×10^{-5}
1.8	1.788882	1.788899	1.68×10^{-5}
1.9	1.893921	1.893930	8.41×10^{-6}
2.0	2.000000	2.000000	

■

Метод конечных разностей. Линейный случай.

ВХОД : Целое число $N \geq 2$; точки a, b , краевые условия α, β .

ВЫХОД : Приближенные значения y_i для $y(x)$ в точках $x_i, i = \overline{1, N}$.

ШАГ 1 $h = \frac{b-a}{N+1}$
 $x = a + h$
 $a_1 = 2 + h^2 q(x)$
 $b_1 = -1 + \frac{h}{2} p(x)$
 $d_1 = -h^2 r(x) + \left(1 + \frac{h}{2} p(x)\right) \alpha$

ШАГ 2 **for** $i = 2$ **to** $N - 1$ **do**

$x = a + ih$
 $a_i = 2 + h^2 q(x)$
 $b_i = -1 + \frac{h}{2} p(x)$
 $c_i = -1 - \frac{h}{2} p(x)$
 $d_i = -h^2 r(x)$

end

ШАГ 3 $x = b - h$
 $a_N = 2 + h^2 q(x)$
 $c_N = -1 - \frac{h}{2} p(x)$
 $d_N = -h^2 r(x) + \left(1 - \frac{h}{2} p(x)\right) \beta$

ШАГ 4 Начинаем решать трехдиагональную систему уравнений (шаги 4-8)

$l_1 = a_1$
 $u_1 = b_1/a_1$
 $z_1 = d_1/l_1$

ШАГ 5 **for** $i = 2$ **to** $N - 1$ **do**

$l_i = a_i - c_i u_{i-1}$
 $u_i = b_i/l_i$
 $z_i = (d_i - c_i z_{i-1})/l_i$

end

ШАГ 6 $l_N = a_N - c_N u_{N-1}$
 $z_N = (d_N - c_N z_{N-1})/l_N$

ШАГ 7 $y_0 = \alpha$
 $y_{N+1} = \beta$
 $y_N = z_N$

ШАГ 8 **for** $i = N - 1$ **to** 1 **do**

$y_i = z_i - u_i y_{i+1}$

end

ШАГ 9 **for** $i = 0$ **to** $N + 1$ **do**
 $x = a + ih$
 ВЫВЕСТИ: (x, y_i)
end

ШАГ 10 Процедура окончена.

2.2 Метод конечных разностей для уравнения Эйлера общего вида

Попробуем применить ту же идею к краевой задаче более общего вида:

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'), & x \in [a, b], \\ y(a) = \alpha, & y(b) = \beta. \end{cases}$$

Очевидно, что в общем случае уравнение в конечных разностях уже не будет линейным.

Вначале сформулируем условия, которые в дальнейшем предполагаются выполненными:

- 1) функции $f, f_y, f_{y'}$ непрерывны в области $D = \{(x, y, y') | x \in [a, b], y \in \mathbb{R}, y' \in \mathbb{R}\}$;
- 2) $f_{y'} \geq \delta > 0$ на D ;
- 3) $\exists k, L : k = \max_D |f_y(x, y, y')|, L = \max_D |f_{y'}(x, y, y')|$.

Эти условия обеспечивают существование и единственность решения краевой задачи.

Как и в линейном случае, разбиваем промежуток $[a, b]$ на $N + 1$ равных подынтервалов точками $x_i = a + ih, h = \frac{b-a}{N+1}, i = \overline{0, N+1}$. Полагая, что производная $y^{(4)}(x)$ ограничена на $[a, b]$, заменяем в уравнении

$$y''(x_i) = f(x_i, y(x_i), y'(x_i))$$

производные y' и y'' выражениями в конечных разностях, полученными ранее. Получаем

$$\begin{cases} -\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + f\left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right) = 0, & i = \overline{1, N} \\ y_0 = \alpha, & y_{N+1} = \beta. \end{cases}$$

Включив краевые условия в систему и домножив каждое уравнение на h^2 , получаем окончательно

$$\begin{cases} 2y_1 - y_2 + h^2 f\left(x_1, y_1, \frac{y_2 - \alpha}{2h}\right) - \alpha = 0, \\ -y_1 + 2y_2 - y_3 + h^2 f\left(x_2, y_2, \frac{y_3 - y_1}{2h}\right) = 0, \\ \vdots \\ -y_{N-2} + 2y_{N-1} - y_N + h^2 f\left(x_{N-1}, y_{N-1}, \frac{y_N - y_{N-2}}{2h}\right) = 0, \\ -y_{N-1} + 2y_N + h^2 f\left(x_N, y_N, \frac{\beta - y_{N-1}}{2h}\right) - \beta = 0. \end{cases}$$

Эту **нелинейную** систему N уравнений относительно N неизвестных y_i можно решать итерационными методами. Напомним схему метода Ньютона и детализируем его применение в нашем конкретном случае.

Итак, как известно, метод Ньютона (также называемый методом Ньютона-Рафсона) предлагает решать систему уравнений

$$f(x) = 0 \iff f_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, k = \overline{1, n}$$

задавшись некоторым начальным приближением x^0 и вычисляя последовательно

$$x^{j+1} = x^j - J^{-1}(x^j) f(x^j),$$

где $J(x) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)$ — якобиан системы уравнений. При условии, что $\|x - J^{-1}(x)f(x)\| < 1$, можно гарантировать сходимость последовательности $\{x^j\}$ к решению системы. Обычно при вычислениях стараются избегать обращения матрицы $J(x)$. Вместо этого, полагая $\Delta x^j = x^{j+1} - x^j$, записывают систему **линейных** уравнений

$$J(x^j) \Delta x^j = -f(x^j).$$

Решив ее и найдя Δx^j , вычисляют $x^{j+1} = \Delta x^j + x^j$. Критерием останова итерационной процедуры может быть малость $\|\Delta x^j\|$ или близость $f(x^j)$ к нулю.

Чтобы выписать формулу итераций для рассматриваемой задачи, вычислим якобиан $J(y)$. Замечая, что в i -ом уравнении системы отличны от нуля производные лишь по переменным y_i, y_{i-1} и y_{i+1} , можем записать, что

$$J(y_1, y_2, \dots, y_N)_{ij} = \begin{cases} -1 + \frac{h}{2} f_{y'} \left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right), & i = j - 1, j = \overline{2, N} \\ 2 + h^2 f_y \left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right), & i = j, j = \overline{1, N} \\ -1 - \frac{h}{2} f_{y'} \left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right), & i = j + 1, j = \overline{1, N-1} \end{cases}$$

Таким образом, в методе Ньютона на j -ой итерации необходимо решить СЛАУ

$$\begin{aligned} J(y_1^j, \dots, y_N^j) \Delta y^j = & - \left(2y_1^j - y_2^j + h^2 f \left(x_1, y_1^j, \frac{y_2^j - \alpha}{2h} \right) - \alpha, \right. \\ & - y_1^j + 2y_2^j - y_3^j + h^2 f \left(x_2, y_2^j, \frac{y_3^j - y_1^j}{2h} \right), \\ & \vdots \\ & - y_{N-2}^j + 2y_{N-1}^j - y_N^j + h^2 f \left(x_{N-1}, y_{N-1}^j, \frac{y_N^j - y_{N-2}^j}{2h} \right) \\ & \left. - y_{N-1}^j + 2y_N^j + h^2 f \left(x_N, y_N^j, \frac{\beta - y_{N-1}^j}{2h} \right) - \beta \right)^T \end{aligned}$$

и новое приближение к решению исходной краевой (а значит, и вариационной) задачи вычислять по формуле

$$y_i^{j+1} = y_i^j + \Delta y_i^j, \quad i = \overline{1, N}.$$

Заметим, что $J(y)$ является трехдиагональной матрицей, так что каждая итерация требует не слишком много времени. Можно показать, что для нелинейных задач описанный метод имеет порядок точности $O(h^2)$.

У метода Ньютона есть большой недостаток: он требует очень хорошего начального приближения. Априори проверить это условие нельзя, поэтому нужно аккуратно пробовать разные приближения, регулируя при этом шаг. Если никаких иных предположений нет, в качестве (y_1^0, \dots, y_N^0) можно взять ординаты прямой, соединяющей точки (a, α) и (b, β) , вычисленные в точках x_i .

Запишем теперь формальный алгоритм метода конечных разностей для общего случая.

Метод конечных разностей. Нелинейный случай.

ВХОД : Целое число $N \geq 2$; точки a, b , краевые условия α, β , точность ε , максимальное число итераций M .

ВЫХОД : Приближенные значения y_i для $y(x)$ в точках $x_i, i = \overline{1, N}$, или сообщение о превышении максимального числа итераций.

ШАГ 1 $h = \frac{b-a}{N+1}, \quad y_0 = \alpha, \quad y_{N+1} = \beta$

ШАГ 2 **for** $i = 1$ **to** N **do**
 $y_i = \alpha + \frac{\beta - \alpha}{b - a} i h$

end

ШАГ 3 $j = 1$

Повторяем шаги 4-9

while $j \leq M$ **do**

ШАГ 4 $x = a + h, \quad t = \frac{y_2 - \alpha}{2h}$
 $a_1 = 2 + h^2 f_y(x, y_1, t)$
 $b_1 = -1 + \frac{h}{2} f_{y'}(x, y_1, t)$
 $d_1 = -1 - (2y_1 - y_2 - \alpha + h^2 f(x, y_1, t))$

ШАГ 5 **for** $i = 2$ **to** $N - 1$ **do**
 $x = a + i h, \quad t = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$
 $a_i = 2 + h^2 f_y(x, y_i, t)$
 $b_i = -1 + \frac{h}{2} f_{y'}(x, y_i, t)$
 $c_i = -1 - \frac{h}{2} f_{y'}(x, y_i, t)$
 $d_i = -(2y_i - y_{i+1} - y_{i-1} + h^2 f(x, y_i, t))$

end

ШАГ 6 $x = b - h, \quad t = \frac{\beta - y_{N-1}}{2h}$
 $a_N = 2 + h^2 f_y(x, y_N, t)$
 $c_N = -1 - \frac{h}{2} f_{y'}(x, y_N, t)$
 $d_N = -(2y_N - y_{N-1} - \beta + h^2 f(x, y_N, t))$

ШАГ 7 Решаем трехдиагональную систему уравнений. Вычисления полностью идентичны шагам 4-8 из предыдущего алгоритма. На выходе имеем вектор приращений v и новое приближение решения $y_i, i = \overline{0, N+1}$.

ШАГ 8 **if** $\|v\| \leq \varepsilon$ **then**
 for $i = 0$ **to** $N + 1$ **do**
 $x = a + i h$
 ВЫВЕСТИ: (x, y_i)
 end
 Процедура окончена.

end

ШАГ 9 $j = j + 1$

end

ШАГ 10 **ВЫВЕСТИ:** Достигнут предел числа итераций. Процедура завершилась неудачно.
