

**Р.Я.Кучумов, В.Р.Сыртланов,  
Н.Г.Мусакаев**

**МЕТОДЫ  
ВЫЧИСЛЕНИЙ**

**Тюмень 1998**

**Р.Я.Кучумов, В.Р.Сыртланов,  
Н.Г.Мусакаев**

**МЕТОДЫ  
ВЫЧИСЛЕНИЙ**

**Тюмень 1998  
«Вектор-Бук»**

УДК 519.6(076.5)

Методы вычислений: /Р.Я.Кучумов, В.Р.Сыртланов, Н.Г.Мусакаев /. Под ред. профессора Р.Я.Кучумова – Тюмень: Издательство «Вектор-Бук», 1998. – 138 с.

Учебное пособие представляет собой систематизированное изложение численных методов решения прикладных задач математического анализа и математической физики. Описываются наиболее распространенные алгоритмы и методы их реализации на ЭВМ.

Предназначено для студентов, обучающихся по специальности 01.02.00 – “Прикладная математика”. Может быть полезен студентам инженерных специальностей, аспирантам и научным работникам, чья работа связана с практическим применением ЭВМ.

Рецензенты: Декан физического факультета Тюменского государственного университета Федоров К.М., д.ф.-м.н., профессор; доцент кафедры прикладной математики ТюмГНГУ Подкорытова С.В., к.т.н.

ISBN 5-88131-117-5

© Коллектив авторов, 1998

## СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	
1. Численные методы решения задач алгебры и математического анализа.....	8
1.1. Интерполирование и аппроксимация функций.....	8
1.2. Численное дифференцирование.....	14
1.3. Численное интегрирование.....	16
1.4. Решение систем линейных алгебраических уравнений.....	23
1.5. Решение нелинейных уравнений.....	30
1.6. Решение систем нелинейных алгебраических уравнений.....	37
2. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.....	41
2.1. Разностная аппроксимация задачи Коши для дифференциального уравнения первого порядка.....	43
2.2. Одношаговые методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка.....	49
2.3. Многошаговые методы численного интегрирования дифференциальных уравнений.....	63
3. Численные методы решения уравнений математической физики.....	78
3.1. Физическая классификация уравнений.....	78
3.2. Математическая классификация уравнений.....	79
3.3. Основы метода конечных разностей.....	86
3.4. Устойчивость конечно-разностных схем.....	104
4. Применение методов конечных разностей для решения модельных уравнений.....	109
4.1. Волновое уравнение.....	109
4.2. Уравнение теплопроводности.....	117
4.3. Уравнение Лапласа.....	131
Литература.....	137
Приложения.....	138

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Математика как наука возникла в связи с необходимостью решения практических проблем: ведения амбарных книг, измерений на местности, и т.д. С развитием наук математика стала привлекаться к описанию природных явлений. Вследствие этого потребовалось создание специальных, обычно численных, методов решения ставившихся задач. Недаром многие численные методы носят фамилии крупных ученых прошлого - Ньютона, Эйлера, Гаусса.

При решении прикладных задач используются три различных подхода: 1) экспериментальный, 2) теоретический, 3) численный (вычислительный). Теоретический подход часто называют аналитическим; термины же численный и вычислительный взаимозаменяемы. Большим преимуществом теоретического подхода является то, что с его помощью можно получить “чистую” и довольно обширную информацию, причем во многих случаях на основе довольно простых формул. Этот подход особенно полезен на этапе предварительного проектирования, поскольку он позволяет за минимальное время получить разумные ответы на возникающие вопросы. При использовании численного подхода делается ограниченное количество предположений.

Идея экспериментального исследования состоит в получении требуемых характеристик на относительно дешевой небольшой модели реального устройства. Однако, проводя такие исследования, не всегда удается смоделировать реальные условия работы прототипа на существующих экспериментальных установках. Отсюда следует, что численные методы, не имеющие таких ограничений, позволяют получать информацию, которую другими методами найти невозможно. С другой стороны, применение численных методов также ограничено, в первую очередь быстродействием и памятью ЭВМ. Еще одно ограничение на применение этих методов связано с нашей неспособностью понять и математически смоделировать некоторые сложные явления. Ни одно из этих ограничений на возможность применения численных методов не является принципиально непреодолимым, а существующие в настоящее время тенденции позволяют строить оптимистические прогнозы о роли вычислительных методов в будущем.

Появление быстродействующих ЭВМ резко изменило характер решения инженерных задач. Задачи, которые сейчас с малыми затратами решаются на ЭВМ за несколько секунд, всего 20 лет назад известными в то время численными методами на существовавших ЭВМ могли быть решены лишь за несколько лет. Мощные ЭВМ, о возможности появления которых никто и не думал, привели к

многочисленным изменениям.

В настоящее время можно говорить, что появился новый способ исследования сложных процессов, допускающих математическое описание, - вычислительный эксперимент или исследование естественнонаучных проблем средствами вычислительной математики. Поясним существо этого способа исследования на примере решения какой-либо физической проблемы. Пусть требуется изучить некоторый физический процесс. Математическому исследованию предшествует выбор физического приближения, то есть решение вопроса о том, какие явления необходимо учесть, а какими можно пренебречь. После этого проводится исследование проблемы методом вычислительного эксперимента, в котором можно выделить несколько основных этапов.

На первом этапе формулируется задача, которую необходимо решать. Сначала выбирается физическое приближение или физическая модель процесса (например, модель точки или сплошной среды), решается вопрос о том, какие физические факторы надо учесть, а какими можно пренебречь. Физической модели ставится в соответствие математическая модель или математическое описание физического процесса с помощью, алгебраических, дифференциальных, интегральных и других уравнений. Полученную модель необходимо исследовать. Надо установить, правильно ли поставлена задача, хватает ли исходных данных, и т.д. На этом этапе используются методы классической математики. Следует отметить, что многие физические задачи приводят к таким математическим моделям, разработка теории которых находится в начальной стадии. Второй этап вычислительного эксперимента состоит в построении приближенного численного метода решения задачи, иначе говоря в выборе вычислительного алгоритма. Под вычислительным алгоритмом понимают последовательность арифметических и логических операций, при помощи которых находится приближенное численное решение математической задачи, сформулированной на первом этапе. На третьем этапе осуществляется программирование вычислительного алгоритма для ЭВМ и на четвертом этапе - проведение расчетов на ЭВМ. Отметим, что разработка конкретных численных алгоритмов и их программирование на ЭВМ должны быть тесно связаны. Наконец, в качестве пятого этапа вычислительного эксперимента можно выделить анализ полученных численных результатов и последующее уточнение математической модели. Может оказаться, что модель слишком груба - результат вычислений не согласуется с физическим экспериментом, или напротив модель слишком сложна, и решение с достаточной точностью можно получить на более простых моделях. Тогда следует начинать работу с

первого этапа; уточнить математическую модель, и снова пройти все этапы.

Общим для всех численных методов является сведение математической задачи к конечномерной. Это чаще всего достигается дискретизацией исходной задачи; переходом от функций непрерывного аргумента к функциям дискретного аргумента. После дискретизации исходной задачи надо построить вычислительный алгоритм, т.е. указать последовательность арифметических и логических действий, выполняемых на ЭВМ и дающих за конечное число действий решение дискретной задачи. Полученное решение дискретной задачи принимается за приближенное решение исходной задачи.

Математическая формулировка любой прикладной задачи уже содержит некоторую неточность в связи с двумя обстоятельствами. Во-первых, математическая модель реального объекта, как мы уже упоминали, никогда не учитывает всех без исключения явлений, влияющих на состояние этого объекта. Чтобы не получить слишком сложную задачу, всегда приходится жертвовать некоторыми факторами, которые можно считать второстепенными. Во-вторых, в уравнения задачи входят некоторые задаваемые параметры - числа или функции. Значения этих параметров получаются в результате измерений различных характеристик моделируемого объекта. Но хорошо известно, что всякое измерение производится с ошибкой. Вследствие этого, только лишь записав в математической форме научную или техническую задачу, мы уже вынуждены считать, что ее решение, даже если его получить абсолютно точно, является всего лишь приближением к интересующей нас функции. Оно содержит так называемую неустранимую погрешность. Имеется в виду - неустранимую никаким методом решения математической задачи.

Сформулировав математическую задачу, необходимо искать метод ее решения и зачастую данный метод бывает приближенным. Это значит, что в результате применения метода могут быть получены не точные, а приближенные значения искомой функции, даже если все предписанные методом вычисления проделаны абсолютно точно. Например, решить дифференциальное уравнение означает выразить его решение в виде интегралов от известных функций; точно взять интеграл, значит выразить его через элементарные функции. Но числовые значения и интегралов, и элементарных функций надо еще суметь найти. А это можно сделать, за редким исключением, лишь приближенно. Ошибка, вносимая в решение математической задачи применением приближенного метода, называется ошибкой или погрешностью метода.

Если бы можно было точно выполнить все арифметические операции над числами, предписываемые приближенным методом, то о других видах погрешности, кроме уже указанных, мы бы не говорили. Однако это невозможно сделать по той причине, что любые арифметические операции над числами производятся при наличии ограниченного количества используемых для записи чисел разрядов позиционной системы исчисления. А говоря проще, неизбежны округления как исходных числовых данных, так и результатов операции. Возникающие за счет этого ошибки в определении искомых чисел и функций называются вычислительной погрешностью.

Таким образом, мы видим, что численные расчеты производятся с приближенными значениями величин. Погрешность приближенного числа  $a$ , т.е. разность между ним и точным значением  $a^*$ , обычно неизвестна и ее необходимо оценить. Под оценкой погрешности приближенного числа  $a$  понимают установление неравенства вида  $|a^* - a| \leq \Delta_a$ . Число  $\Delta_a$  - называют абсолютной погрешностью приближенного числа  $a$ . Поскольку данная величина определяется неоднозначно (его можно увеличить), то обычно стараются указать возможно меньшее значение  $\Delta_a$ , удовлетворяющее неравенству.

Абсолютные погрешности записывают не более чем с двумя-тремя значащими цифрами (значащими цифрами числа называются все цифры в его записи, начиная с первой ненулевой слева; например, в числе 0,010560 пять значащих цифр). В приближении  $a$  не следует сохранять те разряды, которые подвергаются округлению в его абсолютной погрешности  $\Delta_a$ .

Относительной погрешностью  $\delta_a$  приближенного числа  $a$  называется отношение его абсолютной погрешности  $\Delta_a$  к абсолютной величине числа  $a$ , т.е.  $\delta_a = \Delta_a / |a|$  ( $a \neq 0$ ). Число  $\delta_a$  обычно выражается в процентах, и ее принято записывать не более чем с двумя-тремя значащими цифрами.

Относительная погрешность приближенного числа связана с количеством верных знаков. Количество верных знаков числа отсчитывается от первой значащей цифры числа до первой значащей цифры его абсолютной погрешности: например, число  $b=2,7413$  с  $\Delta_b=0,00734$  имеет три верных знака (2, 7, 4); остальные знаки - сомнительные. Ориентировочно считают, что наличие одного верного знака соответствует относительной погрешности порядка 10%, двух верных знаков - порядка 1%, трех верных знаков - порядка 0,1% и т.д.

В математических таблицах все числа округлены до верных знаков, причем абсолютная погрешность не превосходит половины единицы последнего оставленного разряда. Например, если в таблице



указано  $e=2,718$ , то абсолютная погрешность не превосходит  $0,5 \cdot 10^{-3}$ .

В окончательных результатах вычислений обычно оставляют, кроме верных, один сомнительный знак. В промежуточных результатах расчетов обычно сохраняют два-три сомнительных знака, чтобы не накапливать лишних погрешностей округления.

Резюмируя все сказанное выше, можно отметить, что реализуя практически приближенный метод решения математической задачи, моделирующей некоторое реальное явление, мы получаем значения искомой функции, содержащие сумму трех погрешностей, - неустранимой погрешности, погрешности метода и вычислительной погрешности.

Знание хотя бы порядка величины неустранимой погрешности полезно по следующим причинам. Во-первых, оно избавляет нас от необходимости применять слишком точные приближенные методы: вряд ли надо требовать погрешности метода в пределах 0,1%, если ясно, что неустраняемая погрешность имеет порядок 10%. Во-вторых, если неустраняемая погрешность уже превышает пределы допустимой точности искомой функции, то вовсе незачем заниматься приближенным решением задачи. К сожалению, в прикладных проблемах задача оценки неустранимой погрешности лежит, по существу, вне математики и получить требуемую оценку весьма сложно.

# 1. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ АЛГЕБРЫ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

## 1.1. ИНТЕРПОЛИРОВАНИЕ И АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИЙ

Вычислительная математика оперирует конечным набором чисел, имеющих конечное число знаков. Поэтому, для того чтобы производить какие-либо действия с функциями, необходимо научиться характеризовать функцию конечным набором чисел. Более того, этот конечный набор чисел не должен быть чересчур большим, чтобы не перегружать память машины. С другой стороны, часто возникает задача о восстановлении функции по ее значениям в конечном числе точек.

Пусть для конечного множества значений аргумента  $x = x_0, x_1, \dots, x_n$  известны экспериментально полученные значения функций  $f(x) = f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ . Они являются результатами наблюдений или измерений. Аналитическое выражение функции в таком случае неизвестно, что не позволяет вычислить ее значения в промежуточных точках  $x \neq x_i$  ( $i = 0, 1, \dots, n$ ). Для отыскания этих значений строят аппроксимирующую (приближающую) функцию  $\varphi(x)$ , расчеты по которой либо совпадают, либо в определенном смысле приближаются к экспериментально полученным величинам (рис.1.1). Построение функций  $\varphi(x)$  называется *интерполированием*.

Интерполирование применяют и в случае, когда аналитический

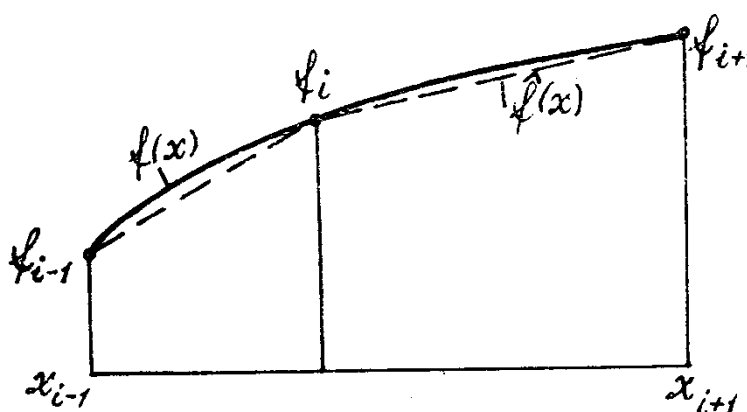


Рис. 1.1

вид функции  $f(x)$  известен, но сложен и требует большого объема вычислений для определения отдельных значений функции. Над

такой функцией, кроме того, трудно выполнять математические операции (например, дифференцирование или интегрирование). Замена  $f(x)$  приближенной функцией  $\varphi(x)$  позволяет упростить вычисления. Для этого по известному выражению  $f(x)$  вычисляют небольшую таблицу ее значений и по ним строят простую интерполирующую функцию  $\varphi(x)$ . Последнюю используют для нахождения приближенных значений  $f(x)$  в других точках.

Широкое распространение получила *алгебраическая интерполяция*, при которой в качестве интерполирующих функций  $\varphi(x)$  применяют алгебраические многочлены. Это объясняется тем, что полиномы вычислять несложно, кроме того, несложно выполнять над ними математические операции. С математической точки зрения алгебраическое интерполирование функции  $f(x)$ , заданной своими значениями  $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$  в точках  $x_0, x_1, \dots, x_n$  отрезка  $[a, b]$  состоит в приближенной замене этой функции на данном отрезке многочленом  $P_n(x)$  степени  $n$ , который в точках  $x_i$  принимает те же значения, что и функция  $f(x)$ :

$$P_n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Точки  $x_i (i = 0, 1, \dots, n)$  называют *узлами интерполяции*. Можно показать, что существует единственный интерполяционный многочлен степени  $n$ , удовлетворяющий данным условиям.

**Интерполяционный многочлен Лагранжа.** Решение задачи алгебраической интерполяции обеспечивает интерполяционный многочлен Лагранжа:

$$\begin{aligned} P_n(x) = & \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n)} f(x_0) + \\ & + \frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_n)} f(x_1) + \dots + \\ & + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\dots(x_n-x_{n-1})} f(x_n). \end{aligned} \quad (1.1)$$

В точках отрезка  $[a, b]$ , отличных от узлов интерполяции, разность  $R(x) = f(x) - P_n(x)$  в общем случае отлична от нуля. Эта разность представляет погрешность метода, которую называют

остаточным членом интерполяции. Если известно аналитическое выражение функции  $f(x)$  и данная функция имеет на отрезке  $[a, b]$  непрерывные производные до  $(n + 1)$ -го порядка, оценка погрешности интерполяции в текущей точке  $x$  определяется выражением

$$\left| R(x) \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \right|,$$

где  $M_{n+1} = \max_{[a, b]} |f^{(n+1)}(x)|$ .

В практических вычислениях величин  $P_n(x)$  удобно использовать схему Эйткена, согласно которой последовательно определяются значения многочленов:

$$P_{0,1}(x) = \frac{1}{x_1 - x_0} \begin{vmatrix} f(x_0) & x_0 - x \\ f(x_1) & x_1 - x \end{vmatrix},$$

$$P_{1,2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_1} \begin{vmatrix} f(x_1) & x_1 - x \\ f(x_2) & x_2 - x \end{vmatrix},$$

$$P_{0,1,2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_0} \begin{vmatrix} P_{0,1}(x) & x_0 - x \\ P_{1,2}(x) & x_2 - x \end{vmatrix},$$

. . . . .

$$P_{0,1,\dots,n}(x) = \frac{1}{x_n - x_0} \begin{vmatrix} P_{0,1,\dots,n-1}(x) & x_0 - x \\ P_{1,2,\dots,n}(x) & x_n - x \end{vmatrix}.$$

• здесь символами  $\begin{vmatrix} \end{vmatrix}$  обозначены определители. Данный алгоритм эффективно реализуется в виде программы для ЭВМ. Вычисления по схеме Эйткена прекращают, если абсолютная величина разности между двумя последовательными интерполяционными значениями  $P_{0,1,\dots,k}(x)$  и  $P_{0,1,\dots,k+1}(x)$  станет меньше заданной точности  $\varepsilon$ , либо если абсолютная величина этой разности перестанет уменьшаться. Последнее обстоятельство указывает на влияние ошибок округления. Достоинство рассмотренной схемы состоит в том, что очередные значения узлов

интерполяции  $x_i$  можно подключать до момента, когда точность вычислений перестает возрастать.

**Интерполяционный многочлен Ньютона.** Каждое слагаемое формулы Лагранжа (1.1) представляет собой многочлен  $n$ -й степени, т.е. зависит от всех узлов интерполяции. В силу этого при увеличении числа узлов и соответственно степени многочлен требуется строить заново. От этого недостатка свободен интерполяционный многочлен Ньютона. Введем предварительно понятия разделенных разностей. Они определяются выражениями:

$$f(x_{i+1}, x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \quad - \text{разделенные разности}$$

первого порядка;

$$f(x_{i+2}, x_{i+1}) = \frac{f(x_{i+2}, \dots, x_{i+1}) - f(x_{i+1}, x_i)}{x_{i+2} - x_i} \quad - \text{разделенные}$$

разности второго порядка;

. . . . .

$$f(x_n, x_{n-1}, \dots, x_0) = \frac{f(x_n, x_{n-1}, \dots, x_1) - f(x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0)}{x_n - x_0} \quad -$$

разделенные разности  $n$ -го порядка ( $i = 0, 1, \dots, n-1$ ).

С учетом введенных обозначений интерполяционный многочлен Ньютона имеет вид

$$\begin{aligned} P_n(x) = & f(x_0) + (x - x_0)f(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1)f(x_0, x_1, x_2) + \\ & + \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})f(x_0, x_1, \dots, x_n). \end{aligned} \quad (1.2)$$

Здесь каждое  $i$ -ое слагаемое ( $i = 0, 1, \dots, n$ ) зависит только от  $i$  первых узлов интерполяции и значений функции в них. Добавление новой точки требует вычисления одного слагаемого и добавления его к предыдущей сумме. Первоначальные слагаемые не меняются, что является важным преимуществом данного многочлена по сравнению с полиномом Лагранжа. В силу существования единственного интерполяционного многочлена формулы Лагранжа и Ньютона представляют две его различные записи. Погрешность интерполяции в обоих случаях определяется одинаковым выражением, приведенным выше.

На практике используют частные случаи многочлена Ньютона. Так, при  $n = 1$  получаем формулу линейной интерполяции. Удобство программирования для ЭВМ обеспечило широкое ее применение при

обработке результатов экспериментов.

**Метод наименьших квадратов.** Рассмотренные выше интерполяционные многочлены точно воспроизводят значения  $f(x_i)$  данной функции в узлах интерполяции. Однако экспериментальные значения  $f(x_i)$  обычно известны приближенно, с некоторыми ошибками, поэтому часто не имеет смысла искать многочлен, в точности воспроизводящий заданное значение функции. В таких случаях строят полином степени  $m < n$  вида:

$$P_m(x, a) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m,$$

который в некотором смысле наилучшим образом приближается к значениям функции. Существенное применение получил метод наименьших квадратов, согласно которому минимизируется сумма квадратов отклонений многочлена  $P_m(x_i, a_i)$  от экспериментальных значений функции  $f(x_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$ ;

$$E = \sum_{i=1}^n (P_m(x_i, a_i) - f(x_i))^2 \rightarrow \min.$$

Для отыскания коэффициентов  $a_0, a_1, \dots, a_m$  полинома используем необходимое условие минимума функции многих переменных. Оно состоит в равенстве нулю частных производных по каждому параметру  $a_i$ :

$$\frac{\partial E}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 x_i + \dots + a_m x_i^m - f(x_i)) = 0;$$

. . . . .

$$\frac{\partial E}{\partial a_m} = \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 x_i + \dots + a_m x_i^m - f(x_i)) x_i^m = 0.$$

В результате получена так называемая нормальная система  $m+1$  линейных алгебраических уравнений, решение которой дает искомые  $m+1$  значений коэффициентов многочлена  $a_0, a_1, \dots, a_m$ .

**Пример.** Физические свойства пропана в зависимости от температуры заданы в таблице:

$t, ^\circ C$	$P_V, \text{кг/см}^3$	$\rho_l, \text{кг/л}$	$\rho_g, \text{г/л}$	$\lambda_V, \text{ккал/кг}$
-34,5	1,38	0,573	3,25	94,45
-17,8	2,60	0,552	5,90	94,73
-1,1	4,50	0,531	10,00	90,00
15,5	7,28	0,506	15,85	85,00
32,2	11,15	0,482	23,85	79,17

Здесь  $P_V$  - давление насыщенного пара;  $\rho_l$  - плотность жидкой фазы;  $\rho_g$  - плотность газовой фазы;  $\lambda_V$  - теплота испарения.

Используя приведенные данные, покажем на рисунке построенные согласно табличным данным интерполяционные кривые и построим эмпирические формулы для некоторых свойств пропана в функции от температуры (рис.1.2).

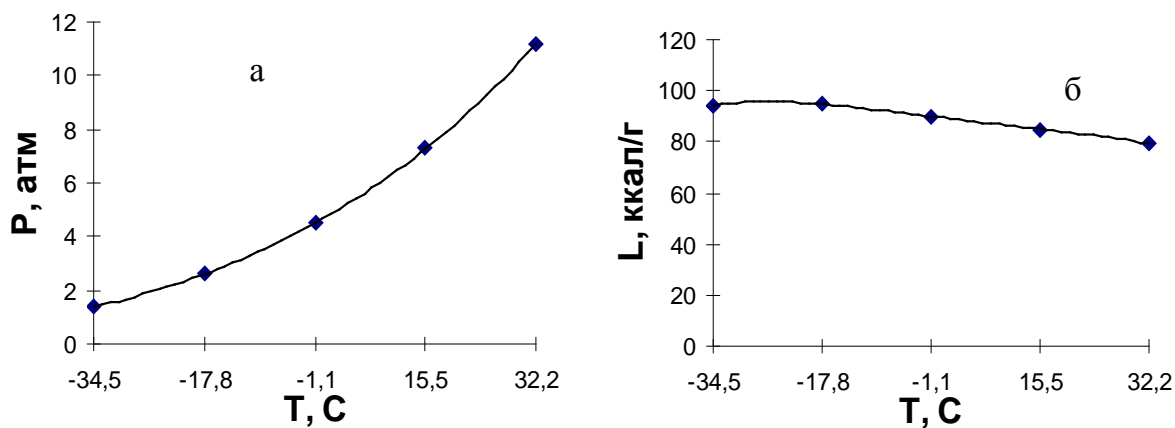


Рис. 1.2. Зависимость давления насыщения (а) и удельной теплоты испарения (б) пропана от температуры

$$P_V = 0,0004 T^4 + 0,0292 T^3 + 0,1546 T^2 + 0,5458 T + 0,65,$$

$$\lambda_V = -0,2208 T^4 + 2,9983 T^3 - 14,974 T^2 + 27,527 T + 79,12.$$

## 1.2. ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

Распространенный способ получения формул численного дифференцирования состоит в следующем. По значениям функции  $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$  в точках  $x_0, x_1, \dots, x_n$  строят интерполяционный многочлен  $P_n(x)$  и полагают, что  $f^m(x) \approx P_n^{(m)}(x)$ ,  $0 \leq m \leq n$ . Здесь  $m$  - порядок производной. На практике для этих целей находит применение интерполяционный полином Лагранжа

$$P_n(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}.$$

Существенные удобства для вычислений обеспечивают таблицы значений функции в точках, расположенных с постоянным шагом  $h = x_i - x_{i-1}$ ,  $i = 1, \dots, n$ . С учетом этого дифференцирование многочлена Лагранжа дает следующие формулы первых производных в равноотстоящих точках:

1)  $n = 2$  (три точки, многочлен второй степени)

$$f'(x_i) = \begin{cases} \frac{1}{2h}(-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})), & \text{если } i = 0; \\ \frac{1}{2h}(f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})), & \text{если } i = 1, \dots, n-1; \\ \frac{1}{2h}(f(x_{n-2}) - 4f(x_{n-1}) + 3f(x_n)), & \text{если } i = n; \end{cases}$$

Погрешность вычисления производной по этим формулам складывается из погрешностей усечения и погрешностей округления. Первые из них вызываются заменой функции  $f(x)$  интерполяционным многочленом  $P_n(x)$ , вторые - неточным заданием значений  $f(x_i)$ . С уменьшением шага  $h$  погрешность усечения уменьшается, а погрешность округления увеличивается. В силу этого возникает задача определения оптимального значения  $h$ . Если положить, что каждая из ординат  $f(x_i)$  может иметь ошибку  $\Delta$ , и ввести в рассмотрение величину  $M = \max_{\xi \in [x_0, x_n]} f^{(3)}(\xi)$ , то для

внутренних точек  $x_1, \dots, x_{n-1}$  оптимальное значение  $h_{opt} \approx 1,8 \sqrt[3]{\Delta/M}$ .

Величина общей погрешности



$$E_i = \begin{cases} 3,3 \sqrt[3]{\Delta^2 M}, & \text{если } i = 0, n; \\ 1,1 \sqrt[3]{\Delta^2 M}, & \text{если } i = 1, \dots, n-1; \end{cases}$$

2)  $n \neq 4$  (пять точек, многочлен четвертой степени)

$$f(x_i) = \begin{cases} \frac{-25f(x_0) + 48f(x_1) - 36f(x_2) + 16f(x_3) - 3f(x_4)}{12h}, & \text{если } i = 0; \\ \frac{-3f(x_0) - 10f(x_1) + 18f(x_2) - 6f(x_3) + f(x_4)}{12h}, & \text{если } i = 1; \\ \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) + f(x_{i+2}))}{12h}, & \text{если } i = 2, \dots, n-2; \\ \frac{-f(x_{n-4}) + 6f(x_{n-3}) - 18f(x_2) + 16f(x_{n-2}) + 10f(x_{n-1}) + 3f(x_n)}{12h}, & \text{если } i = n-1; \\ \frac{3f(x_{n-4}) - 168f(x_{n-3}) + 36f(x_2) - 48f(x_{n-1}) + 25f(x_n)}{12h}, & i = n. \end{cases}$$

В данном случае для внутренних точек  $x_2, \dots, x_{n-2}$  оптимальное значение  $h_{opt} \approx 2,1 \sqrt[5]{\Delta/M}$ , где  $M = \max_{\xi \in [x_0, x_n]} f^{(5)}(\xi)$ . Величина общей погрешности

$$E_i = \begin{cases} 9 \sqrt[5]{\Delta^4 M}, & \text{если } i = 0, \dots, n; \\ 2,5 \sqrt[5]{\Delta^4 M}, & \text{если } i = 1, \dots, n-1; \\ 1,4 \sqrt[5]{\Delta^4 M}, & \text{если } i = 2, \dots, n-2. \end{cases}$$

Аналогичным способом можно получить расчетные формулы производных более высокого порядка. Однако точность численного дифференцирования существенно уменьшается с ростом порядка производной. В силу этого на практике обычно так определяют производные не выше второго порядка.

### 1.3. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

В тех случаях, когда удастся выразить первообразную функцию через элементарные функции, значение определенного интеграла можно вычислить с помощью формулы Ньютона-Лейбница:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a).$$

Здесь  $F(x)$  - первообразная подынтегральной функции  $f(x)$  на отрезке  $[a, b]$ . Напомним, что функция  $F(x)$  в данном интервале называется первообразной функции  $f(x)$ , если на всем этом интервале  $f(x)$  является производной функции  $F(x)$ , т.е.  $F'(x) = f(x)$ .

Однако, для большого числа функций первообразные не выражаются через элементарные функции. Довольно часто нахождение первообразной связано с необходимостью выполнения весьма сложных преобразований. Распространенными являются также ситуации, когда подынтегральная функция задается графиком или таблицей экспериментально полученных значений. Во всех этих случаях нельзя вычислить определенный интеграл с помощью формулы Ньютона-Лейбница, и прибегают к приближенным, численным методам. Они позволяют определять значения интегралов непосредственно по значениям подынтегральной функции и не зависят от способа ее задания. Суть численных методов состоит в замене подынтегральной функции  $f(x)$  вспомогательной, интеграл от которой легко вычисляется в элементарных функциях. Наиболее часто  $f(x)$  заменяется некоторым интерполяционным многочленом, что приводит к так называемым квадратурным формулам:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_i^n A_i f(x_i) + R,$$

где  $x_i$  - узлы интерполяции;  $A_i$  - коэффициенты;  $R$  - остаточный член, погрешность метода. Отбрасывание  $R$  приводит к погрешности усечения. В процессе вычислений к ней добавляются погрешности округления.

Рассмотрим геометрическую интерпретацию численных методов интегрирования. Значение определенного интеграла

$I = \int_a^b f(x)dx$  представляет площадь, ограниченную графиком функции  $y = f(x)$ , осью абсцисс и прямыми  $x = a$ ,  $y = b$  (рис. 1.3).

Использование для вычисления величины интеграла квадратурной формулы означает следующее. Отрезок интегрирования  $[a, b]$  разбивается на  $n$  интервалов  $[x_i, x_{i+1}]$ ,  $i = 0, 1, \dots, n-1$ . Приблизительно определяются значения площадей, соответствующих каждому интервалу. Сумма этих площадей дает приближенное значение интеграла.

В зависимости от способа разбиения отрезка интегрирования

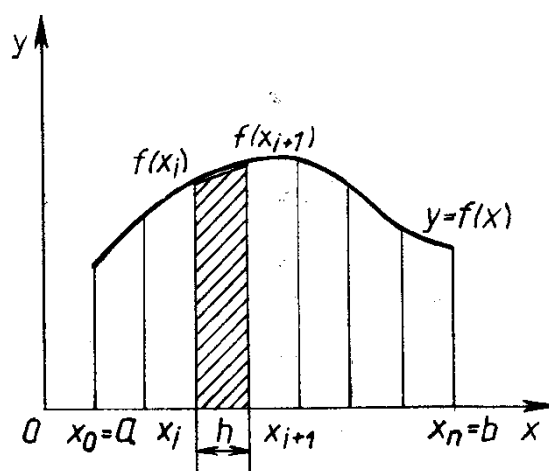


Рис. 1.3 Геометрическая интерпретация численного интегрирования.

$[a, b]$  системой точек (узлов интерполяции)  $x_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ , различают два подхода к построению квадратурных формул.

При первом подходе местоположение и длина интервалов разбиения выбираются заранее в начале расчетов. Для равноотстоящих точек квадратурные формулы называются *формулами Ньютона—Котеса*. Они различаются степенями используемых интерполяционных многочленов.

Простейшая формула для вычисления интегралов - *формула прямоугольников*. Широкое применение находят *формулы трапеций* и *Симпсона*.

При втором подходе местоположение и длина интервалов подбираются таким образом, чтобы достичь наивысшей точности при заданном числе интервалов (*формула Гаусса*).

**Формула прямоугольников.** Отрезок интегрирования  $[a, b]$

разбивается на  $n$  равных интервалов длиной  $h = \frac{b-a}{n}$  (см. рис. 1.3). В пределах каждого интервала  $[x_i, x_{i+1}]$  функция  $f(x)$  заменяется постоянной величиной  $f_i = f(x_i)$  или  $f_i = f(x_*)$ ,  $x_i \leq x_* \leq x_{i+1}$ . Значение интеграла тогда определяется выражением:

$$\int_a^b f(x)dx = h \{f(a) + f(b) + f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1})\}.$$

Если функция  $f(x)$  имеет на отрезке  $[a, b]$  непрерывную вторую производную, оценка погрешности усечения может быть осуществлена по формуле

$$R \leq \frac{(b-a)h}{6} M, \quad \text{где } M = \max_{a \leq x \leq b} |f''(x)|.$$

**Формула трапеций.** В данном случае отрезок интегрирования  $[a, b]$  разбивается на  $n$  равных интервалов длиной  $h = \frac{b-a}{n}$ . В пределах каждого интервала  $[x_i, x_{i+1}]$  функция  $f(x)$  заменяется интерполяционным многочленом Лагранжа первой степени с узлами  $x_i, x_{i+1}$ , что соответствует замене кривой на секущую. Значение интеграла в пределах  $[x_i, x_{i+1}]$ , равное площади криволинейной фигуры, заменяется площадью трапеции:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h(f(x_i) + f(x_{i+1})))}{2}.$$

Суммирование значений интеграла по всем  $n$  участкам разбиения дает общую площадь, т.е. приближенное значение интеграла

$$\int_a^b f(x)dx = h \left\{ \frac{f(a) + f(b)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1}) \right\}.$$

Если функция  $f(x)$  имеет на отрезке  $[a, b]$  непрерывную

вторую производную, оценка погрешности усечения может быть осуществлена по формуле

$$R \leq \frac{(b-a)h^2}{12} M, \quad \text{где } M = \max_{a \leq x \leq b} |f''(x)|.$$

Очевидно, что формула трапеций дает точное значение интеграла для линейной подынтегральной функции  $f(x)$ , так как тогда  $f''(x) = 0$ .

**Формула Симпсона.** При замене подынтегральной функции интерполяционным многочленом второй степени и четном числе  $n$  интервалов разбиения квадратурная формула преобразуется к виду

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \{ f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(b) \}.$$

Это выражение получило название *формулы Симпсона* или *формулы парабол*. Значения функции  $f(x)$  в нечетных точках  $x_1, x_3, \dots, x_{2n-1}$  входят в формулу с коэффициентом 4, в четных точках  $x_2, x_4, \dots, x_{2n-2}$  - с коэффициентом 2, а в граничных точках  $x_0 = a, x_{2n} = b$  - с коэффициентом 1.

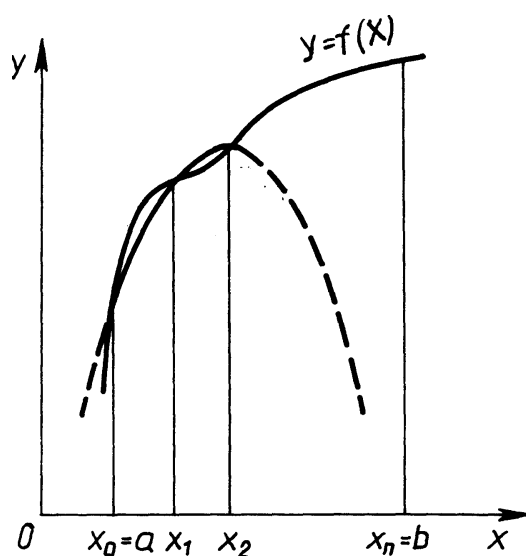


Рис.1.4. Иллюстрация метода Симпсона

Геометрический смысл формулы Симпсона состоит в следующем. Через три последовательные ординаты разбиения проводится парабола (рис. 1.4). Определяется площадь полученной фигуры. Сумма всех построенных таким образом фигур дает приближенное значение интеграла.

При наличии на отрезке  $[a, b]$  непрерывной четвертой производной подынтегральной функции оценка погрешности усечения формулы Симпсона такова:

$$R \leq \frac{(b-a)h^4}{180} M, \quad \text{где } M = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(4)}(x)|.$$

Формула парабол является точной для полиномов до третьей степени включительно, так как для них  $f^{(4)}(x) = 0$ .

**Квадратурные формулы Гаусса.** В рассмотренных выше формулах численного интегрирования используются равноотстоящие узлы и произвольное разбиение отрезка интегрирования. Суть формул Гаусса состоит в следующем: при заданном числе интервалов разбиения следует расположить их концы так, чтобы получить наивысшую точность интегрирования. В математическом плане это означает выбор коэффициентов  $A_i$  и узлов  $t_i (i = 1, \dots, n)$  квадратурных формул Гаусса

$$\int_{-1}^1 f(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i f(t_i) + R_n,$$

такими, чтобы формулы были точны для многочленов наивысшей возможной степени  $N$ . Можно показать, что при  $n$  узлах точно интегрируются все многочлены степени  $N \leq 2n - 1$ .

Узлы  $t_i$  являются корнями многочлена Лежандра:

$$P_n(t) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n (t^2 - 1)^n}{dt^n}.$$

Коэффициенты  $A_i$  вычисляются по формуле

$$A_i = \frac{2}{(1-t_i^2)(P'_n(t_i))^2}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Погрешность усечения, определяемую остаточным членом  $R_n$ , можно оценить по выражению

$$R_n = \frac{2^{2n+1}}{(2n+1)2n!} \left( \frac{(n!)^2}{2n!} \right)^2 f^{(2n)}(t), \quad t \in [-1, 1].$$

При вычислении интеграла  $\int_a^b f(x)dx$  отрезок  $[a, b]$  преобразуется в отрезок  $[-1, 1]$  путем замены переменной

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}t.$$

В результате формула Гаусса приобретает вид

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) + R_n^*,$$

$$\text{где } x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}t; \quad R_n^* = \left( \frac{b-a}{2} \right)^{2n+1} R_n.$$

Квадратурная формула Гаусса обеспечивает высокую точность интегрирования при небольшом числе узлов.

**Точностные оценки и сравнение формул интегрирования.** Оценка погрешности усечения рассмотренных формул численного интегрирования по выражениям для остаточных членов часто оказывается малоэффективной из-за трудностей оценки производных высокого порядка подынтегральных функций. В силу этого на практике для достижения требуемой точности прибегают к методу последовательного удвоения числа шагов, состоящему в следующем. Задают значение допустимой погрешности  $\varepsilon$  и начальное число  $n$  интервалов разбиения. Вычисляют величину интеграла  $I$  по выбранной квадратурной формуле при числе интервалов  $n_0$  и  $2n_0$

(соответственно  $I_n$  и  $I_{2n}$ ). По правилу Рунге оценивается погрешность приближенного значения интеграла:  $\Delta \approx \frac{|I_n - I_{2n}|}{3}$  - для формулы трапеций;

$$\Delta \approx \frac{|I_n - I_{2n}|}{15} \text{ - для формулы Симпсона.}$$

Если  $\Delta \geq \varepsilon$ , количество интервалов разбиения увеличивают вдвое, т.е. значения интеграла вычисляются для последовательных значений  $n = n_0, 2n_0, 4n_0, \dots$ . Вычисления заканчивают при выполнении условия  $\Delta < \varepsilon$ .

Этот прием позволяет осуществить автоматический выбор шага при заданной точности интегрирования. Отметим также, что в формулах трапеций и Симпсона при удвоении числа интервалов разбиения нет необходимости вычислять значения подынтегральной функции заново во всех узлах, так как все узлы при числе интервалов  $n$  являются узлами и при числе интервалов  $2n$ . Однако для формулы Гаусса при различных  $n$  все узлы оказываются различными. Это требует вычисления значений функции во всех новых узлах.

Оценка погрешности усечения при интегрировании функций, заданных таблично, может быть осуществлена по приближенным выражениям: для формулы трапеций

$$R \approx -\frac{b-a}{12} \Delta^2 y;$$

для формулы Симпсона

$$R \approx -\frac{b-a}{180} \Delta^4 y;$$

Здесь  $\Delta^2 y, \Delta^4 y$  - средние арифметические значения конечных разностей соответствующего порядка. Данные оценки применяют при незначительном изменении разностей. Это означает, что функция достаточно хорошо интерполируется многочленом соответствующей степени (например, для формулы Симпсона - второй или третьей).

Напомним, что конечными разностями функции  $y = f(x)$  называются разности следующего вида:

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i \text{ - конечные разности первого порядка;}$$

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i \text{ - конечные разности второго порядка;}$$

$$\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot$$

$$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i \text{ - конечные разности } k\text{-го порядка.}$$

Интегрирование по квадратурным формулам сопровождается также ошибками округления. Они носят случайный характер, но с



увеличением числа интервалов разбиения  $n$  возрастают в среднем пропорционально  $\sqrt{n}$ . Вследствие этого общая погрешность, равная сумме погрешностей усечения и округления, с ростом числа интервалов разбиения уменьшается за счет уменьшения ошибки усечения лишь до некоторого значения  $n$ . Затем погрешности округления преобладают, и общая погрешность увеличивается.

Теоретический и экспериментальный анализ формул численного интегрирования приводит к следующим общим выводам.

Для функций высокой гладкости, т. е. имеющих непрерывные производные достаточно высокого порядка, при одинаковом числе узлов формула Гаусса дает значительно более точные результаты, чем формула Симпсона, а последняя - более точные результаты, чем формула трапеций. При этом для получения одной и той же точности по формуле Гаусса необходимо выполнить меньше операций, чем по формуле Симпсона, а по последней - меньше, чем по формуле трапеций.

Формула Гаусса обеспечивает высокую точность при небольшом числе узлов, поэтому ее особенно выгодно применять при интегрировании сложных функций, на вычисление значений которых в узлах затрачивается много времени. Однако для функции малой гладкости, имеющих лишь первую или вторую производную, а также для функций с разрывами производных простые формулы интегрирования могут давать примерно ту же точность, что и формула Гаусса. Кроме того, формулы Гаусса с большим числом узлов довольно сложны, и применять их для таких функций невыгодно.

При интегрировании функций, заданных таблицей экспериментальных значений, правило Гаусса можно использовать только при соответствующем расположении концов интервалов разбиения, что можно обеспечить в редких случаях. Формула Симпсона в достаточной степени точна для умеренного числа узлов, удобно программируется для ЭВМ, и, поэтому, получила широкое применение в практических расчетах.

#### 1.4. РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

К решению систем линейных алгебраических уравнений сводится большое количество задач не только алгебры, но и обыкновенных дифференциальных уравнений, а также уравнений математической физики (в частных производных)

Рассмотрим систему  $n$  линейных алгебраических уравнений с  $n$  неизвестными:

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{array} \right\}$$

или в векторно-матричной форме

$$Ax = b,$$

где

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}; \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix}; \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}$$

есть соответственно матрица коэффициентов, вектор-столбец свободных членов и вектор-столбец неизвестных.

Если матрица  $A$  невырожденная, т.е. если ее определитель не равен нулю, то система уравнений имеет единственное решение. Значения неизвестных  $x_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) могут быть получены по формулам Крамера:

$$x_i = \frac{\det A_i}{\det A}.$$

Здесь  $\det A_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) и  $\det A$  - соответственно определители матриц  $A_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) и  $A$ . Матрица  $A_i$  образуется из матрицы  $A$  путем замены ее  $i$ -го столбца столбцом свободных членов. Однако этот метод с вычислительной точки зрения неэффективен и на практике не применяется, так как его реализация требует выполнения значительного количества арифметических операций и соответственно больших затрат машинного времени. Кроме того, он очень чувствителен к ошибкам округления.

Применяемые на практике численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений по принципам организации вычислений делятся на два класса: прямые (точные) и итерационные (приближенные). *Прямыми* называются методы, которые в

предположении, что вычисления ведутся без округлений, позволяют получить точное решение за конечное число арифметических операций. К числу таких методов относится метод Гаусса с выбором главного элемента. *Итерационные* методы даже в предположении, что вычисления ведутся без округлений, дают приближенное решение системы с наперед заданной точностью. Точное решение в данном случае теоретически может быть получено как результат бесконечного процесса. Характерным представителем этого класса является метод Зейделя.

**Метод Гаусса с выбором главного элемента.** Процесс решения системы линейных алгебраических уравнений данным методом делится на два этапа. На первом этапе (прямой ход) последовательным исключением неизвестных составляется преобразованная эквивалентная система уравнений с треугольной матрицей, в которой все элементы под главной диагональю равны нулю. При этом одно из уравнений содержит только одну неизвестную, а в каждом следующем добавляется еще по одной переменной. На втором этапе (обратный ход) решают преобразованную систему, последовательно определяя с помощью элементарных вычислений значения неизвестных. Рассмотрим алгоритм метода.

Прямой ход: 1. Среди элементов матрицы  $a_{ij}, (i, j = 1, \dots, n)$  матрицы  $A$  выбирается наибольший по модулю  $a_{pg}$ , названный главным элементом. Соответствующая строка матрицы  $A$  с номером  $p$  называется главной строкой. Предположим, что  $a_{pg} = a_{11}$ . Если это не так, то меняют местами первую строку со строкой  $p$  и первый столбец со столбцом  $g$  и осуществляют соответствующую перенумерацию коэффициентов и неизвестных. Информация о перенумерации запоминается. В результате этих операций первая строка становится главной.

2. Полученное на предыдущем этапе первое уравнение системы делят на  $a_{11} = a_{pg}$ :

$$x_1 + c_{12}x_2 + \dots + c_{1n} = d_1, \quad \text{где } c_{1g} = \frac{a_{1g}}{a_{11}}; \quad d_1 = \frac{b_1}{a_{11}}.$$

3. Исключают неизвестную  $x$  из каждого уравнения исходной системы, начиная со второго, путем вычитания уравнения шага 2, умноженного на коэффициент  $a_{i1}$  ( $i = 2, \dots, n$ ) при  $x_1$  в соответствующем уравнении. Отбрасывают главную строку и первый

столбец матрицы  $A$  и получают преобразованную систему уравнений:

$$\left. \begin{array}{l} c_{22}x_2 + c_{23}x_3 + \dots + c_{2n}x_n = d_2; \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ c_{n2}x_2 + c_{n3}x_3 + \dots + c_{nn}x_n = d_n, \end{array} \right\}$$

где  $c_{ig} = a_{ig} - c_{1g}a_{i1}$ ;  $d_1 = b_i - d_1a_{i1}$ ,  $i = 2, \dots, n$ ,  $j = 2, \dots, n$ .

4. Над системой шага 3 повторяют операции пп. 1-3, в результате чего получают систему уравнений, содержащую неизвестные  $x_3, \dots, x_n$ . Такие преобразования продолжают до тех пор, пока не получат одно уравнение с одним неизвестными  $c_n x_n = d_n$ . Это уравнение также считается главным.

5. Объединяют все главные уравнения, в результате чего образуется система уравнений с треугольной матрицей, эквивалентная исходной:

[illegible]

Обратный ход: из системы шага 5 неизвестные  $x_1, \dots, x_n$  определяются в обратном порядке по формулам:

[illegible]

В случае вырожденной матрицы  $A$  в процессе формирования системы уравнений шага 5 будет получено значение  $c_{nn} = 0$ .

Выбор в качестве главного наибольшего по модулю элемента матрицы  $A$  обеспечивает наименьшую величину  $a_{ig}/a_{pg}$ , на которую

умножается главная строка в процессе последовательного исключения неизвестных. Это в свою очередь существенно уменьшает погрешность вычислений. Метод Гаусса с выбором главного элемента надежен, прост и широко применяется при решении систем линейных алгебраических уравнений на ЭВМ.

**Метод Зейделя.** Суть итерационного метода Зейделя состоит в следующем. Задаются некоторым произвольным вектором  $x\{0\}$ , являющимся начальным приближением к искомому решению  $x^*$ . Затем строят последовательность приближенных значений  $\{x[k]\}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , сходящихся к точному решению системы  $x^*$ . Говорят, что последовательность векторов  $x[0], x[1], \dots, x[k], \dots$  сходится к вектору  $x^*$  ( $\lim_{k \rightarrow \infty} x[k] = x^*$ ), если для любого  $\varepsilon > 0$  существует натуральное число  $N$ , начиная с которого ( $k \geq N$ ) выполняется условие

$$\|x^* - x[k]\| < \varepsilon.$$

Здесь символом  $\| \cdot \|$  обозначена норма вектора. Алгоритм метода состоит в следующем.

1. Исходную систему линейных алгебраических уравнений разрешают относительно неизвестных  $x_1, \dots, x_n$ , т.е. приводят к виду

$$\left. \begin{array}{l} x_1 = c_{11}x_1 + c_{12}x_2 + \dots + c_{1n}x_n + d_1; \\ x_2 = c_{21}x_1 + c_{22}x_2 + \dots + c_{2n}x_n + d_2; \\ \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ x_n = c_{n1}x_1 + c_{n2}x_2 + \dots + c_{nn}x_n + d_n. \end{array} \right\}$$

Такое преобразование всегда выполнимо для системы, определитель которой не равен нулю, и может быть осуществлено различными способами.

2. Задают начальное приближение  $x[0] = \{x_1[0], \dots, x_n[0]\}$ . Начальный вектор может быть выбран произвольно, однако необходимо использовать всю имеющуюся информацию о системе уравнений, чтобы  $x[0]$  располагался как можно ближе к точному решению системы  $x^*$ .

3. В первое уравнение системы подставляют координаты точки

$x[0]$  и вычисляют новое значение первой координаты:

$$x_1[1] = c_{11}x_1[0] + c_{12}x_2[0] + \dots + c_{1n}x_n[0] + d_1.$$

Используя вычисленное значение  $x_1[1]$  и начальные значения остальных переменных  $x_2[0], \dots, x_n[0]$ , из второго уравнения системы определяют новое значение второй координаты:

$$x_2[1] = c_{21}x_1[0] + c_{22}x_2[0] + \dots + c_{2n}x_n[0] + d_2.$$

Используя аналогично уже вычисленные приближения, получают значения всех остальных координат. Так, последняя координата будет иметь значение

$$x_n[1] = c_{n1}x_1[1] + c_{n2}x_2[1] + \dots + c_{nn}x_n[0] + d_n.$$

В результате будет определено первое приближение  $x[1]$  к решению системы  $x^*$ .

4. Начальный вектор  $x[0]$  заменяют вектором  $x[1]$  и вычисляют следующее приближение. В общем случае  $k+1$  приближение определяют по формулам:

$$x_1[k+1] = c_{11}x_1[k] + c_{12}x_2[k] + \dots + c_{1n}x_n[k] + d_1;$$

$$x_2[k+1] = c_{21}x_1[k+1] + c_{22}x_2[k] + \dots + c_{2n}x_n[k] + d_2;$$

$$\dots$$

$$x_n[k+1] = c_{n1}x_1[k+1] + c_{n2}x_2[k+1] + \dots + c_{nn}x_n[k] + d_n.$$

Итерационный процесс продолжают до тех пор, пока все  $x_i[k+1]$  не станут достаточно близкими к  $x_i[k]$ . Итерации прекращают при выполнении условия

$$\max |x_i[k+1] - x_i[k]| < \varepsilon, \quad i = 1, \dots, n,$$

где  $\varepsilon$  - некоторое заданное положительное число (точность вычислений).

Можно показать, что с помощью метода Зейделя строится сходящаяся к точному решению последовательность векторов

$\{x[k]\}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , если матрица  $A$  системы линейных алгебраических уравнений удовлетворяет условиям

$$|a_{ii}| \geq |a_{i1}| + |a_{i2}| + \dots + |a_{in}|$$

для всех  $i$  – и если, по крайней мере, для одного  $i$

$$|a_{ii}| > |a_{i1}| + |a_{i2}| + \dots + |a_{in}|.$$

Метод Зейделя является одним из широко применяемых в группе итерационных методов.

**Сравнение методов.** Выбор в каждом отдельном случае конкретного метода решения системы линейных алгебраических уравнений определяется многими факторами: особенностями матрицы коэффициентов системы, порядком системы, быстродействием, объемом памяти ЭВМ и т.п.

Метод Гаусса является одним из наиболее универсальных и эффективных при решении систем линейных уравнений. Применение его особенно целесообразно для линейных систем общего вида с плотно заполненной матрицей коэффициентов. Реализация метода требует около  $n^2$  ячеек оперативной памяти ЭВМ, что ограничивает порядок решаемой с его помощью системы ( $n < 10^3$ ). Число арифметических операций, выполняемых при решении методом Гаусса системы уравнений порядка  $n$ , в общем случае составляет примерно  $2n^3/3$ . При решении систем уравнений высокого порядка ( $n \approx 10^3 - 10^6$ ) с разреженной матрицей коэффициентов наиболее эффективно применение итерационных методов. У разреженных матриц большинство элементов равно нулю. В памяти ЭВМ хранятся только ненулевые элементы таких матриц либо эти элементы вычисляются по мере необходимости по определенным выражениям. Метод Зейделя в отличие от метода Гаусса использует особенности разреженных матриц, поэтому он требует выполнения меньшего количества операций (около  $n^2$ ), а соответственно и меньших затрат машинного времени. Кроме того, ошибки округления в итерационных методах сказываются существенно меньше, чем в прямых. Метод Зейделя является самоисправляющимся, т. е. отдельная ошибка, допущенная при вычислениях, не отражается на конечном результате, так как ошибочное приближение рассматривается как новый

начальный вектор. Важным преимуществом итерационных методов является удобство их программирования для ЭВМ, так как они требуют выполнения однообразных повторяющихся операций.

### 1.5. РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

В практике научных и инженерных расчетов часто возникает необходимость в решении уравнений вида  $f(x)=0$ , где функция  $f(x)$  определена и непрерывна на некотором конечном или бесконечном интервале  $a \leq x \leq b$ .

Если функция представляет многочлен, то уравнение называется *алгебраическим*. Если  $x$  находится под знаком трансцендентной функции (показательной, логарифмической, тригонометрической и т.п.), уравнение называется *трансцендентным*. Значение  $x^*$ , при котором выполняется условие  $f(x^*)=0$  называется корнем уравнения. Всюду в дальнейшем будем иметь в виду отыскание действительных корней уравнения. Такой корень геометрически представляет абсциссу точки пересечения или касания графика функции  $y = f(x)$  и оси  $Ox(y=0)$ . Будем также полагать, что уравнение  $f(x)=0$  имеет лишь изолированные корни, т.е. для каждого из них существует окрестность, не содержащая других корней этого уравнения.

В общем случае функции  $f(x)$  не имеют аналитических формул для нахождения корней. Однако точное решение уравнения не является безусловно необходимым. Действительно, встречающиеся на практике уравнения часто содержат коэффициенты, величины которых имеют приближенные значения. В силу этого разработаны численные методы решения уравнений вида  $f(x)=0$ , которые позволяют определять приближенные значения корней с заданной точностью.

Процесс отыскания корня уравнения  $f(x)=0$  состоит из двух этапов:

- 1) отделение корней, т.е. отыскание интервалов, внутри которых содержится по одному корню уравнения, единственному на данном интервале;
- 2) уточнение значений отдельных корней до некоторой заданной степени точности.

Первый этап реализуется различными способами. Приближенное значение корня может быть известно из физического смысла задачи. При выделении области, в пределах которой находятся действительные корни уравнения, можно воспользоваться следующим



обстоятельством. Если на концах некоторого отрезка значение непрерывной функции  $f(x)$  имеет разные знаки, то на этом отрезке уравнение  $f(x) = 0$  имеет хотя бы один корень.

В инженерной практике распространен графический способ определения приближенных корней. В этом случае строится график функции  $y = f(x)$ , абсциссы точек пересечения которой с осью  $Ox$  дадут приближенные значения корней. Иногда удается подобрать более простое уравнение, корни которого расположены вблизи корней исходного уравнения. Есть также специальные аналитические методы приближенного нахождения корней многочленов.

Найденные приближенные значения корней уточняют различными итерационными методами, состоящими в построении числовой последовательности  $\{x[k]\}$ ,  $k = 0, 1, \dots$ , сходящейся к искомому корню  $x^*$  уравнения  $f(x) = 0$ .

Одной из важнейших характеристик итерационного метода является его скорость сходимости. Последовательность  $\{x[k]\}$ ,  $k = 0, 1, \dots$ , сходящаяся к пределу  $x^*$  имеет линейную скорость сходимости, если при  $k \rightarrow \infty$   $|x_{k+1} - x^*| \leq g |x_k - x^*|$ . Здесь  $g$  - некоторая константа ( $0 < g < 1$ ). Скорость сходимости сверхлинейна, если  $|x_{k+1} - x^*| \leq g |x_k - x^*|^{1+\alpha}$ ,  $0 < \alpha < 1$ , и квадратична, если  $|x_{k+1} - x^*| \leq g |x_k - x^*|^2$ .

Рассмотрим наиболее эффективные из итерационных методов решения нелинейных уравнений.

**Метод деления пополам.** Для этого метода существенно, чтобы функция  $f(x)$  была непрерывна и ограничена в заданном интервале  $[a, b]$ , внутри которого ищется корень. Предполагается также, что значения функции на концах интервала  $f(a)$  и  $f(b)$  имеют разные знаки, т.е. выполняется условие  $f(a) \cdot f(b) < 0$ .

Для нахождения корня уравнения  $f(x) = 0$  делят отрезок  $[a, b]$  пополам, т.е. выбирают начальное приближение равным  $x_0 = (a + b) / 2$  (рис.1.5). Если  $f(x_0) = 0$ , то  $x_0$  является корнем уравнения. В противном случае выбирают тот из отрезков  $[a, x_0]$  или  $[x_0, b]$ . Данный интервал вновь делят пополам и выбирают ту половину, на концах которой функция имеет противоположные знаки, и т.д. Если требуется определить корень с точностью  $\varepsilon$ , то деление пополам продолжают до тех пор, пока длина отрезка не станет меньше  $2\varepsilon$ . В этом случае середина последнего отрезка дает значение

корня с требуемой точностью.

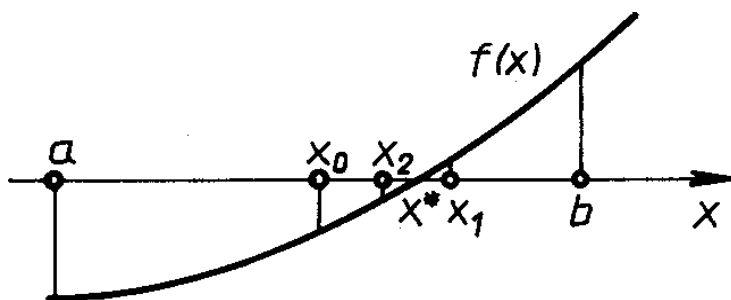


Рис. 1.5. Геометрическая интерпретация метода деления пополам.

Погрешности на  $k$ -й и  $(k + 1)$ -й итерациях связаны соотношением

$$|x_{k+1} - x^*| \leq \frac{1}{2} |x_k - x^*|, \quad k = 1, 2, \dots$$

Следовательно, метод деления пополам обладает линейной скоростью сходимости. Для достижения точности  $\varepsilon > 0$  достаточно выполнить  $N$  итераций ( $N > \log_2(b - a) / \varepsilon$ ).

За одну итерацию точность увеличивается примерно вдвое. Метод прост и надежен, устойчив к ошибкам округления. Он удобно программируется для ЭВМ, так как состоит из простых и циклических вычислений. В отличие от других методов, при его реализации требуется определение только значений функции, и нет необходимости в составлении программы для вычисления производной.

**Метод последовательных приближений.** Для применения метода уравнение  $f(x) = 0$  представляют в виде  $x_1, \dots, x_{n-1}$ . Задаются начальным приближением  $x_0$ , а последующие приближения вычисляют с помощью итерационной процедуры:

$$x_{k+1} = \varphi(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Условия, при которых данный процесс сходится, определяются следующей теоремой: если интервал  $[a, b]$  является интервалом изоляции корня уравнения  $x = \varphi(x)$ , и во всех точках этого интервала производная  $\varphi'(x)$  удовлетворяет неравенству  $|\varphi'(x)| \leq g < 1$ , то итерационный процесс сходится. Вычисления прекращаются при

выполнении условия  $|x_k - x_{k-1}| \leq \frac{1-g}{g} \varepsilon$ . Здесь  $\varepsilon$  - заданная погрешность вычислений.

При использовании метода последовательных приближений весьма важным является выбор функции  $\varphi(x)$  в уравнении  $x = \varphi(x)$  эквивалентном исходному. Ее производная должна удовлетворять условию сходимости процесса. При этом скорость сходимости тем выше, чем меньше число .

Преобразование исходного уравнения к виду  $x = \varphi(x)$  можно осуществить многими способами. Например, можно выделить  $x$  из уравнения  $f(x) = 0$ , а остальное перенести в правую часть. Можно также выполнить следующее преобразование:

$$x = x + c f(x),$$

где  $c$  - произвольная постоянная. В этом случае  $\varphi(x) = x + c f(x)$ .

Подбором величины  $c$  добиваются получения возможно меньшего значения константы  $g$ . Погрешности метода на  $k$ -м и  $(k+1)$ -м шагах удовлетворяют неравенству

$$|x_{k+1} - x^*| \leq g |x_k - x^*|.$$

Следовательно, метод последовательных приближений обладает линейной скоростью сходимости.

Для ускорения сходимости Вегстейном предложена модификация метода последовательных приближений. Она состоит в том, что в качестве очередного приближения принимается не значение  $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ , а точка пересечения прямой  $y = f(x) = x$  с хордой, проведенной между двумя соседними приближениями (рис. 1.6).

В соответствии с рис. 1.6 имеем:  $x_1 = y_0 = f(x_0)$ ;  $y_1 = f(x_1)$ .

Очередное приближение  $x_2$  получают путем определения точки пересечения прямой  $y = x$  и хорды, проведенной через точки  $(x_0, y_0)$  и  $(x_1, y_1)$ :

$$x_2 = x_1 + \frac{x_1 - x_0}{(x_0 - y_0) / (x_1 - y_1) - 1}; \quad y_2 = f(x_2).$$

Следующая итерация выполняется для начальной точки  $(x, y)$ :

$$x_3 = x_2 + \frac{x_2 - x_1}{(x_1 - y_1) / (x_2 - y_2) - 1}; \quad y_3 = f(x_3).$$

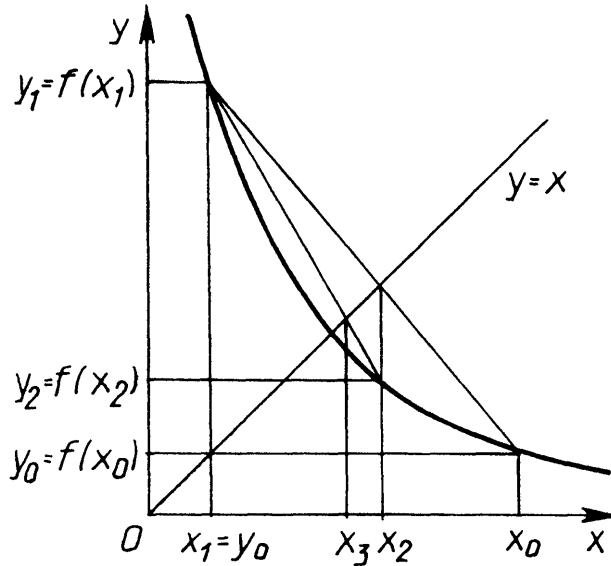


Рис. 1.6. Геометрическая интерпретация метода Вегстейна.

В общем случае:

$$x_{k+1} = x_k + \frac{x_k - x_{k-1}}{(x_{k-1} - y_{k-1}) / (x_k - y_k) - 1}; \quad k = 1, 2, \dots;$$

$$y_{k+1} = f(x_{k+1}).$$

Итерационный процесс завершается при выполнении следующих условий:  $\delta_1 \leq 10\epsilon$ ;  $\delta_2 \leq 10\epsilon$ , где

$$\delta_1 = \begin{cases} \left| \frac{x_{k+1} - x_k}{x_{k+1}} \right|, & \text{если } |x_{k+1}| > 1; \\ |x_{k+1} - x_k|, & \text{если } |x_{k+1}| \leq 1. \end{cases}$$

$$\delta_2 = \begin{cases} \left| \frac{x_{k+1} - x_k}{x_{k+1}} \right|, & \text{если } |x_{k+1}| > 1; \\ |x_{k+1} - y_k|, & \text{если } |x_{k+1}| \leq 1. \end{cases}$$

Метод последовательных приближений обладает тем важным преимуществом, что при его использовании не накапливаются

ошибки вычислений. Отдельная ошибка, допущенная в вычислениях, не отражается на конечном результате. Ошибочное приближение рассматривается как новый начальный вектор. Это может отразиться на количестве итераций, а не на точности результата.

**Метод Ньютона.** Пусть уравнение  $f(x) = 0$  имеет один корень на отрезке  $[a, b]$ , причем первая и вторая производные  $f'(x)$  и  $f''(x)$  определены, непрерывны и сохраняют постоянные знаки на отрезке  $[a, b]$ .

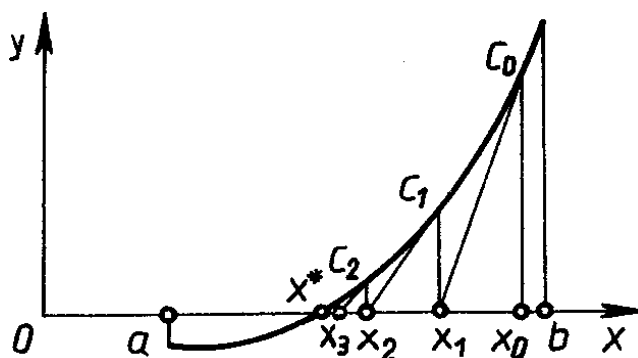


Рис. 1.7. Геометрическая интерпретация метода Ньютона.

Выбирают некоторое начальное приближение корня  $x_0$  на интервале  $[a, b]$  и проводят касательную в точке  $c_0(x_0, f(x_0))$  к кривой  $y = f(x)$  до пересечения с осью абсцисс (рис. 1.7). Абсциссу  $x_1$  принимают за очередное приближение корня. Уравнение касательной в точке  $c_0$  имеет вид

$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0).$$

Полагая  $y = 0$ , находят абсциссу:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Далее проводят касательную через новую точку  $c_1(x_1, f(x_1))$  и находят точку ее пересечения с осью абсцисс:

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}.$$

Эту точку принимают за новое приближение корня. Аналогично находят последующие приближения:

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}.$$

Итерационный процесс прекращают при выполнении условий:

$$\delta \leq \varepsilon; \quad |f(x_k)| \leq 100\varepsilon,$$

где

$$\delta = \begin{cases} \left| \frac{x_k - x_{k-1}}{x_k} \right|, & \text{если } |x_k| > 1; \\ |x_k - x_{k-1}|, & \text{если } |x_k| \leq 1; \end{cases}$$

$\varepsilon$  - заданная погрешность вычислений. Начальное приближение  $x_0$  необходимо выбирать из условия

$$f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0.$$

В противном случае сходимость метода Ньютона не гарантируется. Чаще всего выбирают  $x_0 = a$  или  $x_0 = b$  в зависимости от того, для какой из этих точек выполняется указанное условие.

Метод Ньютона эффективен для решения уравнений, у которых значение модуля производной  $|f'(x)|$  близ корня достаточно велико, т.е. график функции  $y = f(x)$  в окрестности корня имеет большую крутизну. Погрешности метода на  $k$ -й и  $(k+1)$ -м шагах связаны соотношением

$$x^* - x_{k+1} = -\frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)}(x^* - x_k)^2, \quad x_n \in [x^*, x_k],$$

т.е. скорость сходимости метода Ньютона квадратичная. Это обуславливает широкое применение его в практических расчетах.

Отметим, что все сказанное справедливо, если начальное приближение  $x$  выбрано достаточно близким к истинному корню

уравнения, что не всегда просто осуществимо. В силу этого методу Ньютона часто предшествует какой-либо надежно сходящийся алгоритм (например, метод деления пополам). Метод Ньютона в таком случае работает на завершающей стадии решения уравнения.

**Сравнение методов.** Эффективность численного метода решения нелинейных уравнений в значительной степени определяется его универсальностью, простотой организации вычислительного процесса, скоростью сходимости.

Наибольшей универсальностью обладает метод деления пополам. Он гарантирует получение решения для любой непрерывной функции  $f(x)$ , если найден интервал, на котором она меняет знак. Методы последовательных приближений и Ньютона предъявляют к функции более жесткие требования. Вычисления методом деления пополам можно начинать с любого отрезка  $[a, b]$ , на концах которого функция имеет разные знаки. При этом процесс сходится к корню  $x^*$  уравнения  $f(x) = 0$ . Сходимость метода последовательных приближений и Ньютона зависит от выбора начальной точки. При решении практических задач не всегда удастся проверить выполнение необходимых ограничений на выбор начального приближения  $x_0$ . При реализации указанных методов необходимо предусматривать вычисление производных функции для организации итерационного процесса и проверки условий сходимости. Это существенно усложняет вычисления.

Важным преимуществом метода Ньютона является высокая скорость сходимости, обеспечивающая значительную экономию машинного времени при решении сложных нелинейных уравнений.

## 1.6. РЕШЕНИЕ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Более общей вычислительной задачей является нахождение решений системы  $n$  нелинейных алгебраических или трансцендентных уравнений с  $n$  неизвестными, которая в общем случае может быть представлена в следующем виде:

$$\left. \begin{array}{l} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0. \end{array} \right\}$$

Напомним, что решением такой системы называется множество значений неизвестных  $x_1, \dots, x_n$ , удовлетворяющих одновременно каждому из уравнений. Перепишем ее в более компактном виде, введя векторы-столбцы:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}; \quad f = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix}.$$

В результате система уравнений принимает вид  $f(x) = 0$ .

Такие системы решают практически только итерационными методами, широкое распространение среди которых получили методы Ньютона и Зейделя.

**Метод Ньютона.** Полагая, что функции  $f_i(x)$ ,  $i = 1, \dots, n$ , являются непрерывно дифференцируемыми, введем в рассмотрение матрицу первых частных производных функций по переменным  $x_j$ ,  $j = 1, \dots, n$ , - матрицу Якоби:

$$J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

Суть метода Ньютона состоит в следующем. Пусть задано начальное приближение  $x[0]$ . Функцию  $f(x)$  линеаризуют в точке  $x[0]$ , разлагая ее в ряд Тейлора с точностью до членов первого порядка. Это позволяет переписать систему уравнений  $f(x)$  в виде

$$f(x) = f(x[0]) + J(x[0])(x - x[0]) = 0.$$

В итоге получают линейную систему уравнений. Если матрица



$J(x[0])$  невырожденная, то эта система имеет единственное решение  $x[1]$ . Линейную систему удобно решать относительно поправки  $\Delta x[0] = x - x[0]$ , а затем вычислять очередное приближение  $x[1] = x[0] + \Delta x[0]$ . В общем случае, если найдено приближение  $x[m]$ , то  $x[m+1]$  вычисляют по формуле  $x[m+1] = x[m] + \Delta x[m]$ . Поправка  $\Delta x[m] = (\Delta x_1[m], \dots, \Delta x_n[m])$  является решением линейной системы

$$f(x[m]) + J(x[m])\Delta x[m] = 0$$

или в координатной форме

$$\left. \begin{aligned} f_1(x[m]) + \frac{\partial f_1(x[m])}{\partial x_1} \Delta x_1[m] + \dots + \frac{\partial f_1(x[m])}{\partial x_n} \Delta x_n[m] &= 0 \\ \vdots \\ f_n(x[m]) + \frac{\partial f_n(x[m])}{\partial x_1} \Delta x_1[m] + \dots + \frac{\partial f_n(x[m])}{\partial x_n} \Delta x_n[m] &= 0 \end{aligned} \right\}$$

За начальное приближение  $x[0]$  может быть принято грубое приближенное значение искомого корня. Однако метод Ньютона эффективен в достаточно малой окрестности корня. В этом случае он обладает квадратичной скоростью сходимости. В качестве критерия окончания итерационного процесса принимают условие

$$\|x[k] - x[k+1]\| \leq \varepsilon,$$

где  $\epsilon$  - заданная точность вычислений. Метод весьма трудоемок из-за необходимости вычислять матрицу Якоби.

**Метод Зейделя.** Предварительную систему нелинейных уравнений заменяют эквивалентной системой вида

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n); \\ x_2 &= \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_n); \\ &\vdots \\ x_N &= \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_n). \end{aligned} \right\}$$

или в более компактной записи:

$$x = \varphi(x),$$

где

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}; \quad \varphi = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \dots \\ \varphi_n \end{bmatrix}.$$

Такая система может быть получена следующим образом:

$$\varphi(x) = x + Qf(x).$$

Матрица  $Q$  выбирается так:

$$Q = -J^{-1}(x[0]).$$

Здесь  $J^{-1}$  - матрица, обратная матрице Якоби. Предполагается, что последняя матрица невырожденная.

Задают начальное приближение  $x[0]$  и осуществляют итерационную процедуру Зейделя, аналогичную одноименной процедуре решения системы линейных алгебраических уравнений:

$$x_i[k+1] = \varphi_i(x_1[k+1], x_2[k+1], \dots, x_{i-1}[k+1], x_i[k], \dots, x_n[k]),$$

т.е. уже вычисленные приближения неизвестных  $x_1[k+1], \dots, x_{i-1}[k+1]$  используются при вычислении  $x_i[k+1]$ . В качестве критерия прекращения итерационного процесса может быть использовано условие

$$\frac{(x_i[k+1] - x_i[k])^2}{|2x_i[k] - x_i[k+1] - x_i[k-1]|} < \varepsilon, \quad i = 1, \dots, n,$$

где  $\varepsilon$  - заданная точность вычислений. Сами вычисления в методе Зейделя довольно просты. Однако получение системы  $x = \varphi(x)$ , эквивалентной исходной  $f(x) = 0$  и одновременно обеспечивающей сходимость, является весьма сложной процедурой.

## 2. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Обыкновенные дифференциальные уравнения или системы таких уравнений на практике часто используются для построения математических моделей динамических процессов, то есть процессов перехода физических систем из одного состояния в другое, бесконечно близкое. Примерами таких процессов могут служить явления химической кинетики, изменение различных параметров по глубине скважины или длине трубопровода, движение материальных точек и многие другие. Точные методы решения дифференциальных уравнений позволяют выразить решение через элементарные или специальные функции. Однако классы уравнений, для которых разработаны точные методы решения, довольно узки и охватывают только малую часть возникающих на практике задач. В силу этого важное значение имеют приближенные численные методы решения, ориентированные на широкий класс встречающихся на практике дифференциальных уравнений. Напомним предварительно некоторые определения.

Дифференциальным называется уравнение, содержащее независимые переменные  $x$ , неизвестные функции  $u$  и их производные  $u', u'', \dots, u^{(n)}$

$$F(x, u, u', u'', \dots, u^{(n)}) = 0.$$

Если неизвестные функции зависят от одной независимой переменной  $x$ , то дифференциальное уравнение является обыкновенным. Если неизвестные функции зависят от нескольких независимых переменных, дифференциальное уравнение носит название уравнение с частными производными. Порядком дифференциального уравнения называется наивысший из порядков производных, входящих в уравнение. Дифференциальное уравнение считается линейным, если оно линейно относительно искомой функции и производных. Совокупность уравнений, содержащих несколько неизвестных функций и их производных, образует систему дифференциальных уравнений.

Решить дифференциальное уравнение - значит найти его общий интеграл. Под общим интегралом понимается соотношение между независимой переменной, зависимой переменной и произвольными постоянными, число которых равно порядку дифференциального уравнения. Это соотношение при всех допустимых значениях независимой переменной должно удовлетворять данному уравнению.

Общий интеграл геометрически выражается семейством

кривых. Для выделения одной кривой из этого семейства, т.е. для получения частного решения, необходимо задание начальных условий для определения произвольной постоянной. В уравнениях  $n$ -го порядка эти условия налагаются на переменную  $u$  и ее производные, а именно задаются значения  $u, u', u'', \dots, u^{(n-1)}$  при  $x = x_0$ :

$$u_0 = u(x_0), \quad u'_0 = u'(x_0), \dots, u_0^{(n-1)} = u^{(n-1)}(x_0).$$

Например, дифференциальное уравнение первого порядка  $\frac{du}{dx} = u$  имеет решение  $u = C e^x$ , где  $C$  - некоторая произвольная постоянная. При различных значениях постоянной  $C$  получается семейство кривых (рис. 2.1). Выбор начального значения  $u=u_0$  при  $x=x_0$  (обычно  $x_0=0$ ) позволяет выделить из этого семейства одну определенную кривую, т.е. найти частное решение. Дифференциальное уравнение считается разрешенным относительно старшей производной, если оно приведено к виду

$$u^{(n)} = f(x, u, u', u'', \dots, u^{(n-1)}).$$

Задача определения решения этого уравнения при заданных начальных значениях называется задачей Коши для обыкновенного дифференциального уравнения.

Любое уравнение  $n$ -го порядка можно свести к системе уравнений первого порядка путем замены переменных. Для этого введем новые переменные  $u' = u_1, \quad u'' = u_2, \dots, u^{(n-1)} = u_{n-1}$ . В результате такой замены получим эквивалентную систему

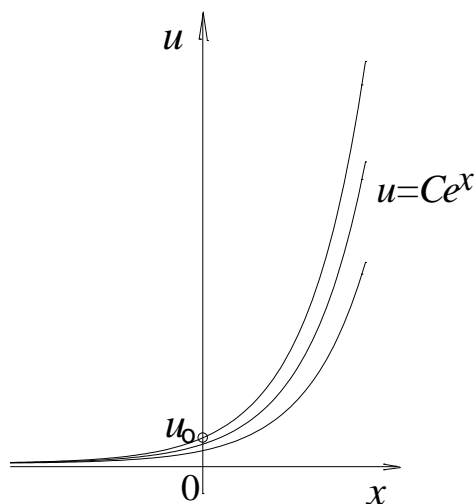


Рис. 2.1. Семейство кривых общего интеграла.

$$\begin{cases} u' = u_1, \\ u'_1 = u_2, \\ \dots\dots\dots \\ u'_{n-1} = f(x, u, u_1, u_2, \dots, u_{n-1}). \end{cases}$$

## 2.1. РАЗНОСТНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

**Постановка задачи.** Замена переменных позволяет свести решение дифференциального уравнения  $n$ -го порядка к решению системы  $n$  уравнений первого порядка. В свою очередь методы решения одного уравнения первого порядка распространяются на систему таких уравнений первого порядка. В силу этого в дальнейшем рассмотрение численных методов будем проводить на примерах решения уравнения

$$u' = \frac{du}{dx} = f[x, u(x)] \quad (2.1)$$

с начальными условиями  $u(x_0) = u_0$ . Здесь  $f[x, u(x)]$  - искомая функция двух аргументов. Данная задача (2.1) является задачей Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка.

Предположим, что искомая функция  $f(x, u)$  является достаточно гладкой, т.е. имеет столько производных, сколько нам необходимо в каждом рассматриваемом случае.

Если функция  $f(x, u)$  определена в прямоугольнике  $D = \{0 \leq x \leq X, |u - u_0| \leq U\}$  и удовлетворяет в области  $D$  по переменной  $u$  условию Липшица:

$$|f(x, u_1) - f(x, u_2)| \leq K|u_1 - u_2|, \quad \text{для всех } (x, u_1), (x, u_2) \in D,$$

где  $K = \text{const} > 0$ , то задача (2.1) имеет единственное решение при достаточно малых  $X$ .

Прежде чем переходить к изложению численных методов для задачи (2.1), необходимо исследовать вопрос устойчивости решения этой задачи. Иначе говоря, необходимо рассмотреть, как изменится решение задачи (2.1) при изменении начального условия.

Пусть  $\tilde{u}(x)$  - решение уравнения (2.1) с начальным условием  $\tilde{u}(0) = \tilde{u}_0$ . Для погрешности  $\xi(x) = \tilde{u}(x) - u(x)$  получаем уравнение

$$\frac{d\xi}{dx} = \alpha(x)\xi, \quad 0 < x \leq X, \quad \xi(0) = \xi_0 = \tilde{u}_0 - u_0, \quad (2.2)$$

где  $\alpha(x) = \frac{f(x, \tilde{u}) - f(x, u)}{\xi} = f_u(x, u + \theta\xi)$ ,  $0 \leq \theta \leq 1$ , т.е. функция

$\alpha(x) = \alpha[x, u(x)]$  зависит от  $x$  и  $\xi$ . Умножая (2.2) на  $\xi$ , получим:

$$\frac{1}{2} \frac{d\xi^2}{dx} = \alpha(x, \xi) \xi^2.$$

При  $\alpha(x, \xi) \leq 0$  и  $f_u \leq 0$  для всех  $x, u, \tilde{u}$  имеем, что  $\frac{1}{2} \frac{d\xi^2}{dx} \leq 0$ ,  $\xi^2(x) \leq \xi^2(0)$  или  $|\tilde{u}(x) - u(x)| \leq |\tilde{u}_0 - u_0|$  для всех  $x \in [0, X]$ , и решение задачи (2.1) устойчиво по начальным данным (не происходит нарастания погрешности в начальных данных).

Если же  $f_u \geq c_0 \geq 0$ , то  $\frac{1}{2} \frac{d\xi^2}{dx} \geq c_0 \xi^2$  и  $|\xi(x)| \rightarrow \infty$  при  $x \rightarrow \infty$ , в этом случае решение задачи (2.1) неустойчиво по начальным данным.

Решение задачи (2.2) ведет себя при  $x \rightarrow \infty$  аналогично решению линейного уравнения

$$\frac{d\xi}{dx} + \lambda\xi = 0 \quad (\lambda = \text{const}, \quad 0 < x \leq X, \quad \xi(0) = \xi_0), \quad (2.3)$$

которое рассматривают как модельное уравнение при изучении устойчивости.

Его решение  $\xi(x) = \xi_0 \exp(-\lambda x)$  убывает при  $\lambda > 0$  и

$$|\xi(x)| \leq |\xi_0| \quad \text{при } \lambda \geq 0 \text{ для всех } 0 \leq x \leq X, \quad (2.4)$$

поэтому модельное уравнение (2.3) устойчиво при  $\lambda \geq 0$ , что соответствует условию  $f_u \leq 0$ .

**Разностная схема.** Сущность численных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений состоит в следующем. В рассматриваемой области пространства вместо непрерывной среды, состояние которой описывается функциями непрерывного аргумента, вводится ее разностный аналог. Эта дискретная модель среды

описывается функциями дискретного аргумента, которые определены в конечном числе точек на сетке. Дифференциальные уравнения, т.е. законы, в соответствии с которыми эволюционирует непрерывная среда, заменяются соответствующими конечно-разностными соотношениями. В итоге исследуемая дифференциальная задача заменяется, или, как говорят, аппроксимируется системой разностных уравнений - разностной схемой.

Исходным пунктом при построении разностной схемы является замена области непрерывного изменения аргумента некоторым конечным множеством точек, лежащих в этой области. Это множество есть область определения функций дискретного аргумента; оно называется разностной сеткой. Соответственно функции дискретного аргумента, определенные на этой сетке, носят название сеточных функций. Сеточную функцию рассматривают как функцию целочисленного аргумента:

$$y(x_i) = y_i, \quad (i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

При таком подходе проблема численного решения дифференциального уравнения заключается в построении процедуры вычисления по известному значению решения  $y_k$  в точке  $x_k$  следующего приближенного решения  $y_{k+1}$  соответственно в точке  $x_{k+1}$ . Для одномерной задачи примером пространственной разностной сетки является разбиение отрезка  $[OM]$  на  $N$  частей (рис. 2.2). Точки деления  $x_i$  отрезка (на рис. 2.2 отмечены кружками), число которых в данном случае составляет  $N + 1$  ( $0 \leq i \leq N$ ), называют узлами сетки. Расстояние между узлами  $x_{i+1} - x_i = h$  есть шаг сетки. Совокупность узлов, где определяются сеточные функции, составляет множество точек  $\omega_h = \{x_i, i = 0, 1, \dots, N\}$ .

Наряду с узлами, которые называют целыми точками, часто рассматривают так называемые "полуцелые точки"  $x_{i+1/2} = x_i + h/2$  (на рис. 2.2 они отмечены крестиками). Множество полуцелых точек

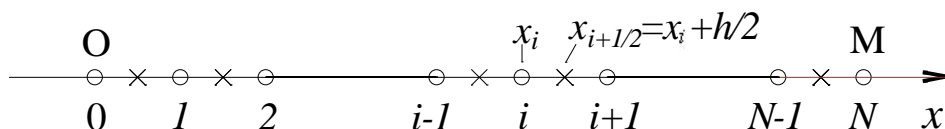


Рис. 2.2

также можно использовать в качестве области определения сеточных функций.

В большинстве случаев шаг сетки  $h$  полагают постоянным (равномерная сетка), т.е.  $h = |OM| / N$ . Тогда

$$x_k = x_0 + kh \quad (k = 0, 1, 2, \dots),$$

Метод, дающий формулу для вычисления значения  $y_{r+1}$  по  $k$  предыдущим значениям  $y_r, y_{r-1}, \dots, y_{r-k+1}$ , называется  $k$ -шаговым методом. Если  $k=1$ , метод является одношаговым. Среди методов этого типа наиболее широкое распространение получили методы Рунге-Кутты. При  $k>1$  метод называется многошаговым.

Прежде чем переходить к изложению самих методов, необходимо сказать несколько слов о рациональном выборе сетки. Несмотря на кажущуюся простоту, этот вопрос заслуживает особого внимания. С одной стороны, количество узлов сетки желательно брать большим и пользоваться мелкими, более подробными сетками. Точнее передавая при этом область изменения дискретного аргумента, непрерывное решение лучше аппроксимируется сеточными функциями.

С другой стороны, практические соображения, и в первую очередь ограниченность быстродействия и объема памяти ЭВМ, заставляют обращаться к сеткам со сравнительно небольшим количеством узлов.

Подобная конфликтная ситуация характерна для разностных методов, и разумный выбор, как правило, определяется самим исследователем. Так, например, решение может быть на каком-то отрезке сильно меняющейся функцией. В этом случае переходят к неравномерной сетке (сетке с переменным шагом  $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ ) и уменьшают шаг (сгущают сетку) в области быстрого изменения функции  $u(x)$  в целях более точного приближения  $u(x)$  сеточным решением. Однако в большинстве случаев заранее неизвестно поведение решения  $u = u(x)$ . Поэтому на практике зачастую поступают следующим образом: расчет сначала проводят на равномерной сетке; если выясняется, что решение  $u = u(x)$  сильно меняется на некотором интервале  $x_* < x < x^*$ , то сетка сгущается на  $[x_*, x^*]$  и ищется решение на такой неравномерной сетке.

Сеточная функция  $y_i$  есть функция дискретного аргумента, решение дифференциальной задачи  $u$  - функция непрерывного аргумента. Они принадлежат разным функциональным пространствам. В этой связи возникает вопрос, как судить о степени близости этих функций.



Близость этих функций характеризуется величиной нормы  $\|u(x_i) - y_i\|$  в пространстве сеточных функций. Сеточный аналог нормы в теории разностных схем имеет вид

$$\|z\| = \max_{0 \leq i \leq N} |z_i| \quad \text{или} \quad \|z\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n-1} (z_i^2 h)},$$

где  $z_i = u(x_i) - y_i$ . О близости решений разностной и дифференциальной задач можно говорить в том случае, когда величина  $\|u(x_i) - y_i\|$  неограниченно уменьшается при  $h \rightarrow 0$ .

### **Разностная аппроксимация дифференциальных операторов.**

Основной момент в постановке разностной задаче состоит в переходе от дифференциальных уравнений, описывающих эволюцию сплошной среды, к соответствующим соотношениям для сеточных функций.

В классическом анализе производная от функции непрерывного аргумента определяется следующим образом:

$$u' = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}. \quad (2.5)$$

Для функции дискретного аргумента на фиксированной сетке понятие подобного предельного перехода теряет смысл. При определении разностной производной вместо отношения бесконечно малых ограничиваются отношением конечных разностей. Пусть  $x_{i-1}, x_i, x_{i+1}$  - три последовательных узла равномерной разностной сетки по пространству с шагом  $h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$ . Для аппроксимации производной (2.5) в узле  $x_i$  используют следующие соотношения:

$$y_x = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, \quad (2.6)$$

$$y_{\hat{x}} = \frac{y(x_i) - y(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}, \quad (2.7)$$

$$y_o = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}, \quad (2.8)$$

где  $y_x$  называют правой производной или производной вперед;  $y_{\hat{x}}$  - левой производной или производной назад;  $y_o$  - центральной или

двусторонней разностной производной. Соотношения (2.6) и (2.7) носят общее название односторонних разностных производных.

Очевидно, что правая производная в узле  $i$  является левой в узле  $i+1$ , т.е.  $y_x(x_i) = y_{\hat{x}}(x_{i+1})$ . Аналогично  $y_{\hat{x}}(x_i) = y_x(x_{i-1})$ . Выражение (2.8) является полусуммой односторонних производных:  $y_o = (y_x + y_{\hat{x}}) / 2$ .

Вторая разностная производная записывается в следующем виде:

$$y_{\hat{x}x} = \frac{1}{h} \left[ \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \right] = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}. \quad (2.9)$$

Для равномерной сетки  $y_{\hat{x}x} = y_{x\hat{x}}$ .

Заменяя дифференциальный оператор  $L$  некоторым разностным оператором  $L_h$ , мы допускаем ошибку - погрешность аппроксимации, от величины которой будет зависеть точность решения разностной задачи.

Для оценки погрешности аппроксимации разложим в ряд Тейлора решение дифференциальной задачи для случая первых производных в окрестности узла  $x_i$

$$u(x_{i\pm 1}) = u(x_i \pm h) = u(x_i) \pm h \frac{\partial u(x_i)}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u(x_i)}{\partial x^2} + O(h^3).$$

Для погрешности аппроксимации  $\psi = L_h u - L u$  получим, используя определения (2.6) - (2.8), следующие выражения:

$$\begin{aligned} \psi_+(x_i) &= u_x - \frac{\partial u(x_i)}{\partial x} = \frac{h}{2} \frac{\partial^2 u(x_i)}{\partial x^2} + O(h^2) = O(h), \\ \psi_-(x_i) &= u_{\hat{x}} - \frac{\partial u(x_i)}{\partial x} = -\frac{h}{2} \frac{\partial^2 u(x_i)}{\partial x^2} + O(h^2) = O(h), \\ \psi_o(x_i) &= u_o - \frac{\partial u(x_i)}{\partial x} = O(h^2). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Эти соотношения справедливы для достаточно гладкой функции  $u(x)$  непрерывного аргумента.

Говорят, что разностный оператор  $L_h$  аппроксимирует дифференциальный оператор  $L$  с порядком  $n > 0$  ( $n$  - порядок аппроксимации) в точке  $x_i$ , если для погрешности аппроксимации имеет место

$$\psi_i = \psi(x_i) = L_h u - Lu|_{x=x_i} = O(h^n) \quad \text{или} \quad \|\psi\| \leq M h^n,$$

где  $M = \text{const} > 0$  не зависит от  $h$ .

В соответствии с этим определением односторонние разностные производные (2.6) и (2.7) аппроксимируют производную (2.5) с первым порядком, а центральная производная (2.8) - со вторым. Также отметим, что производная  $u_x$  является правой относительно узла  $x_i$  и в то же время левой относительно  $x_{i+1}$ ; относительно полущелой точки  $x_{i+1/2}$  эта производная является центральной. Таким образом, разностная производная  $u_x$  аппроксимирует производную (2.5) с первым порядком в узлах  $x_i$  и  $x_{i+1}$  и со вторым порядком в полущелой точке  $x_{i+1/2}$ .

Вторая разностная производная аппроксимирует производную  $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$  со вторым порядком

$$u_{\hat{x}x} = \frac{\partial^2 u(x_i)}{\partial x^2} + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u(x_i)}{\partial x^4} + O(h^3) = \frac{\partial^2 u(x_i)}{\partial x^2} + O(h^2). \quad (2.11)$$

Как видно из структуры формул (2.10) и (2.11) величина погрешности равна произведению шага сетки  $h$  в некоторой положительной степени на соответствующую производную. Поэтому на грубых сетках, где  $h$  велик, а также для решений, претерпевающих резкие изменения, величина погрешности  $\psi$  может стать не малой, так что само понятие аппроксимации в этом случае теряет смысл.

## 2.2. ОДНОШАГОВЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

**Метод Эйлера.** Различные одношаговые методы отличаются друг от друга объемом проводимых вычислений и получаемой при этом точностью. Наиболее простым среди них для уравнения  $u' = f(x, u)$  является метод Эйлера или, как его еще часто называют, метод Рунге-Кутты первого порядка точности. В этом методе производная  $u'$  заменяется приближенной формулой

$$\frac{\Delta u}{\Delta x} = f(x, u).$$

В результате на первом отрезке  $[x_0, x_1]$  (рис. 2.3) искомое решение приближенно представляется линейной функцией

$$\frac{\Delta y_0}{\Delta x_0} = f(x_0, y_0),$$

$$y - y_0 = f(x_0, y_0)(x - x_0).$$

При  $x = x_1$  получаем  $y_1 = y_0 + h f(x_0, y_0)$ , т.е. на отрезке  $[x_0, x_1]$  искомая интегральная кривая (точное решение) заменяется отрезком прямой  $M_0M_1$  (см. рис. 2.3), касательным к кривой в точке  $M_0$ . Тангенс угла наклона этой прямой равен  $f(x_0, y_0)$ .

Аналогично по явной формуле находятся остальные приближенные значения:

$$y_{i+1} = y_i + h k_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots), \quad (2.12)$$

где  $k_i = f(x_i, y_i)$ .

Таким образом, искомая интегральная кривая заменяется ломаной линией  $M_0M_1M_2\dots$  с вершинами в точках  $M_i(x_i, y_i)$  ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ); каждое звено  $M_iM_{i+1}$  этой ломаной, называемой ломаной Эйлера, имеет направление совпадающее с направлением интегральной кривой, которая проходит через точку  $M_i$ .

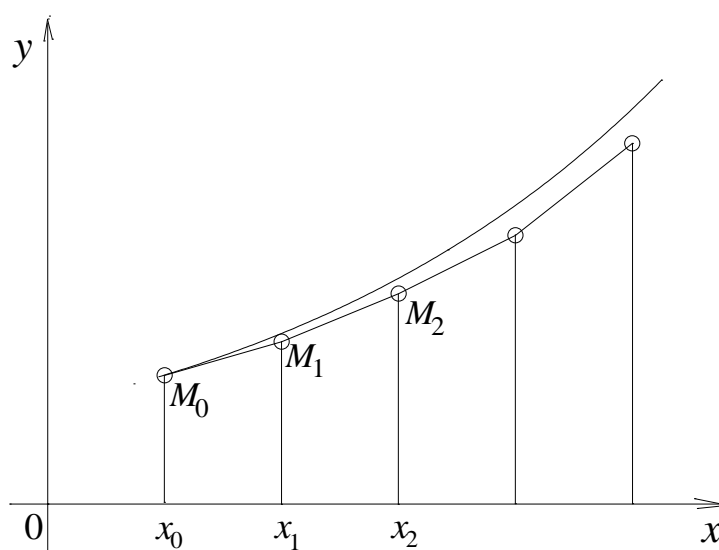


Рис. 2.3. Геометрическая интерпретация метода Эйлера

Погрешностью разностной схемы (2.12) является сеточная функция  $\xi_i = y_i - u(x_i) = y_i - u_i$ . Для того, чтобы написать уравнение для погрешности необходимо учесть, что

$$y_{i+1} - y_i = [\xi_{i+1} - \xi_i] + [u_{i+1} - u_i],$$

$$f(x_i, y_i) = f(x_i, u_i) + \{f(x_i, u_i + \xi_i) - f(x_i, u_i)\} = f(x_i, u_i) + \alpha_i \xi_i,$$

где  $\alpha_i = f_u(x_i, u_i + \theta \xi_i)$ ,  $0 \leq \theta \leq 1$ .

Тогда, подставив  $y_i = \xi_i + u_i$  в (2.12), получим для  $\xi_i$  следующее уравнение

$$\xi_{i+1} = \xi_i + h(\alpha_i \xi_i + \psi_i) \quad (\xi_0 = 0, \quad n = 0, 1, \dots), \quad (2.13)$$

где  $\psi_i$  - невязка или погрешность аппроксимации схемы (2.12) на решении  $u = u(x)$  задачи (2.1), равная

$$\psi_i = f(x_i, u_i) - \frac{u_{i+1} - u_i}{h}. \quad (2.14)$$

Из формулы (2.10) имеем, что  $\psi_i = O(h)$ , т.е. разностная схема Эйлера (2.12) имеет первый порядок аппроксимации.

Если функция  $f(x, u)$  удовлетворяет в области  $D$  условию Липшица, а также условию

$$\left| \frac{df}{dx} \right| = \left| \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial u} \right| \leq M \quad (M = \text{const}),$$

то имеет место следующая оценка погрешности:

$$|\xi_i| \leq \frac{hM}{2K} \left| (1 + hK)^i - 1 \right|.$$

Данная формула имеет лишь теоретическое применение. На практике иногда оказывается более удобным двойной просчет: расчет производят с шагом  $h$  и  $h/2$  и погрешность более точного значения  $y_i^*$  (при шаге  $h/2$ ) оценивают приближенно так:

$$|y_i^* - u_i| \approx |y_i^* - y_i|.$$

Для исследования устойчивости схемы Эйлера (2.12) воспользуемся выражениями (2.3) и (2.4). Учтем при этом, что для разностных схем, аппроксимирующих модельные уравнения, должен выполняться аналог неравенства (2.4):

$$|y_{i+1}| \leq |y_i| \leq \dots \leq |y_0| \quad (i = 1, 2, \dots). \quad (2.15)$$

Тогда модельное уравнение примет вид:

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} + \lambda y_i = 0, \quad y_{i+1} = (1 - h\lambda)y_i. \quad (2.16)$$

Отсюда видно, что условие (2.15) выполнено при  $|1 - h\lambda| \leq 1$  или  $-1 \leq 1 - h\lambda \leq 1$ , т.е. при  $h\lambda \leq 2$ . В этой связи, схема Эйлера (2.12) условно устойчива при  $h \leq 2/\lambda$ ,  $\lambda > 0$ .

**Пример:** Применяя метод Эйлера, найти решения дифференциального уравнения  $y' = y - 2x/y$  на интервале  $[0,1]$  с начальным условием  $y(0) = 1$ , выбрав шаг  $h=0,2$ .

Таблица 2.1

$i$	$x_i$	$y_i$	$f(x_i, y_i) = y_i - \frac{2x_i}{y_i}$	$\Delta y_i$	Точное решение $y = \sqrt{2x+1}$
0	0	1,0000	1,0000	0,2000	1,0000
1	0,2	1,2000	0,8667	0,1733	1,1832
2	0,4	1,3733	0,7805	0,1561	1,3416
3	0,6	1,5294	0,7458	0,1492	1,4832
4	0,8	1,6786	0,7254	0,1451	1,6124
5	1,0	1,8237			1,7320

Решение: Результаты вычислений для наглядности занесем в табл.2.1. Заполняется она следующим способом. В первой строке при  $i=0$  записываются начальные значения  $x_0=0$ ,  $y_0=1,0000$ , и по ним вычисляется  $f(x_0, y_0) = 1$ , а затем  $\Delta y_0 = hf(x_0, y_0) = 0,2$ . Тогда по формуле (2.12) при  $i=0$  получаем  $y_1 = 1 + 0,2 = 1,2$ . Значения  $x_1 = 0,2$ ,  $y_1 = 1,2000$  записываются во второй строке при  $i=1$ . Используя их, можно вычислить  $f(x_1, y_1) = 0,8667$ , затем  $\Delta y_1 = hf(x_1, y_1) = 0,2 \cdot 0,8667 = 0,1733$ . Таким образом, получаем  $y_2 = y_1 + \Delta y_1 = 1,3733$ . При  $i=2,3,4,5$  вычисления ведутся аналогично.

В последнем столбце табл.2.1 для сравнения помещены значения точного решения  $y = \sqrt{2x+1}$ . Из таблицы видно, что

абсолютная погрешность  $y_5$  составляет  $\varepsilon=0,0917$ , а относительная погрешность составляет 5%.

Метод Эйлера является наиболее простым, но и наименее точным численным методом решения дифференциальных уравнений. На практике он обычно применяется для получения оценочных решений на небольшом интервале.

**Методы Рунге-Кутта.** Порядок точности можно повысить путем усложнения разностной схемы. Весьма распространены на практике методы Рунге-Кутта второго и четвертого порядков точности.

Вычисления по схеме Рунге-Кутта второго порядка проводятся в два этапа. На первом этапе находится промежуточное значение  $\bar{y}_i$  по схеме Эйлера с шагом  $\alpha h$ :

$$\bar{y}_i = y_i + \alpha h f(x_i, y_i),$$

на втором этапе находится значение  $y_{i+1}$  по формуле

$$y_{i+1} = y_i + (1 - \sigma)h f(x_i, y_i) + \sigma h f(x_i + \alpha h, \bar{y}_i),$$

где  $\alpha > 0, \sigma > 0$  - параметры. Исключая  $\bar{y}_i$ , получим для  $y_{i+1}$  схему

$$\begin{aligned} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} &= (1 - \sigma) f(x_i, y_i) + \\ &+ \sigma h f\{x_i + \alpha h, y_i + \alpha h f(x_i, y_i)\}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Порядок точности схемы зависит от параметров  $\alpha, \sigma$ .

Определим погрешность разностной схемы (2.17). Действуя аналогично действиям при выводе выражения (2.14), получим для невязки следующее соотношение:

$$\psi_i = (1 - \sigma)f(x_i, u_i) + \sigma f\{x_i + \alpha h, u_i + \alpha h f(x_i, u_i)\} - \frac{u_{i+1} - u_i}{h}$$

Воспользовавшись разложением в ряд Тейлора, получим

$$\psi_i = h(\sigma\alpha - 1/2) u''(x_i) + O(h^2)$$

Отсюда видно, что схема (2.17) имеет второй порядок аппроксимации  $\psi_i = O(h^2)$  при выполнении условия  $\sigma\alpha = 1/2$ .

Для исследования устойчивости схемы Рунге-Кутты второго порядка подставим в формулу (2.17)  $f = -\lambda y$ . В результате получим

$$y_{i+1} = qy_i, \quad q = 1 - h\lambda + \frac{h^2\lambda^2}{2}.$$

Схема устойчива ( $|y_{i+1}| \leq |y_i| \leq \dots \leq |y_0|$ ), если  $|q| \leq 1$ . Данное неравенство выполняется при  $h\lambda \leq 2$ , т.е. схема Рунге-Кутты второго порядка устойчива при том же условии, что и явная схема Эйлера.

Рассмотрим частные случаи схемы Рунге-Кутты второго порядка:

$$1) \sigma = 1, \quad \alpha = 1/2,$$

$$\frac{\bar{y}_i - y_i}{h/2} = f(x_i, y_i), \quad \frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i + \frac{h}{2}, \bar{y}_i).$$

Это известная схема предиктор-корректор, или счет-пересчет. Ее можно представить в несколько ином виде:

$$\bar{y}_i = y_i + \frac{h}{2} f(x_i, y_i), \tag{2.18}$$

$$y_{i+1} = y_i + h f(x_i + h/2, \bar{y}_i).$$

Исключим из обоих соотношений  $\bar{y}_i$ , тогда

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

$$2) \sigma = 1/2, \quad \alpha = 1,$$

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \frac{1}{2} [f(x_i, y_i) + f\{x_{i+1}, y_i + h f(x_i, y_i)\}].$$

Эту схему также можно трактовать как схему предиктор-корректор: сначала - схема Эйлера с шагом  $h$  (предиктор):

$$\bar{y}_i = y_i + h f(x_i, y_i),$$

а затем - схема с полусуммой (корректор):

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \frac{1}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \bar{y}_i)].$$



Идея метода предиктор-корректор часто используется при написании разностных схем для уравнений математической физики с частными производными.

**Пример:** Применяя метод Рунге-Кутты второго порядка, определить эволюцию во времени отложений нефтяного парафина на внутренних стенках подъемной колонны скважины.

Решение: Толщину отложений нефтяного парафина  $\delta_s$  на внутренних стенках подъемной колонны скважины в каждый момент времени можем определить из решения следующего обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{d\delta_s}{dt} = \frac{-\beta_w(T - T_e) + \beta_s(T_0 - T_e)}{\rho_s^0 \{l^{ls} + (\beta_w - \beta_s)/K_m\}}, \quad (2.19)$$

$$\beta_s = \frac{\lambda_s}{R \ln(R/R_0)}, \quad K_m = \frac{2\rho_l^0 D Sh}{R(1 - \alpha)}, \quad R = R_0 - \delta_s,$$

где  $t$  - время;  $T$  - температура газонефтяного потока;  $T_0$  - температура внутренней стенки подъемной колонны;  $T_e$  - температура начала кристаллизации парафина;  $\rho_l^0$  и  $\rho_s^0$  - истинная плотность нефти и парафина;  $\lambda_s$  - коэффициент теплопроводности парафина;  $R_0$  - радиус подъемной колонны;  $D$  - коэффициент диффузии;  $l^{ls}$  - удельная теплота парафинообразования;  $\alpha$  - объемное газосодержание;  $Sh$  - безразмерный коэффициент массообмена;  $\beta_w$  - коэффициент теплопередачи от потока к стенке подъемной колонны скважины.

Начальное условие следует записать в виде  $\delta_s(0)=0$ , но тогда знаменатель в выражении для  $\beta_s$  обращается в нуль. Чтобы это исключить, положим  $\delta_s(0)$  малой величиной, близкой к нулю, а конкретно  $\delta_s(0)=0,0001$  м.

Расчет будем производить следующим образом. Обозначим  $DEL=\delta_s$ ;  $f(t, DEL) = d\delta_s / dt$ , тогда при  $i=0$  принимаем, что  $t_0=0$ ,  $DEL_0=0,0001$ . Вычисляем по формуле (2.19)  $f_0=f(t_0, DEL_0)$ , затем из соотношения (2.18) определяем

$$\overline{DEL}_0 = DEL_0 + \frac{\Delta t}{2} f(t_0, DEL_0),$$

$$DEL_1 = DEL_0 + f\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}, \overline{DEL}_0\right),$$

где  $\Delta t$  - шаг по времени.

Вычисления при  $i=1,2,\dots$  проводятся аналогично. В данном примере расчет производится до тех пор, пока  $\delta_s \geq R_0 / 2$ .

Изменение во времени толщины отложений нефтяного парафина на внутренних стенках подъемной колонны газонефтяной скважины приведено на рис. 2.4.

Наибольшее распространение среди методов Рунге-Кутты получил метод четвертого порядка точности. Он описывается следующей системой уравнений

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

где  $k_1, k_2, k_3, k_4$  - поправки, вычисляемые по формулам:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i), \\ k_2 &= f(x_i + h/2, y_i + hk_1/2), \\ k_3 &= f(x_i + h/2, y_i + hk_2/2), \\ k_4 &= f(x_i + h, y_i + hk_3). \end{aligned} \tag{2.20}$$

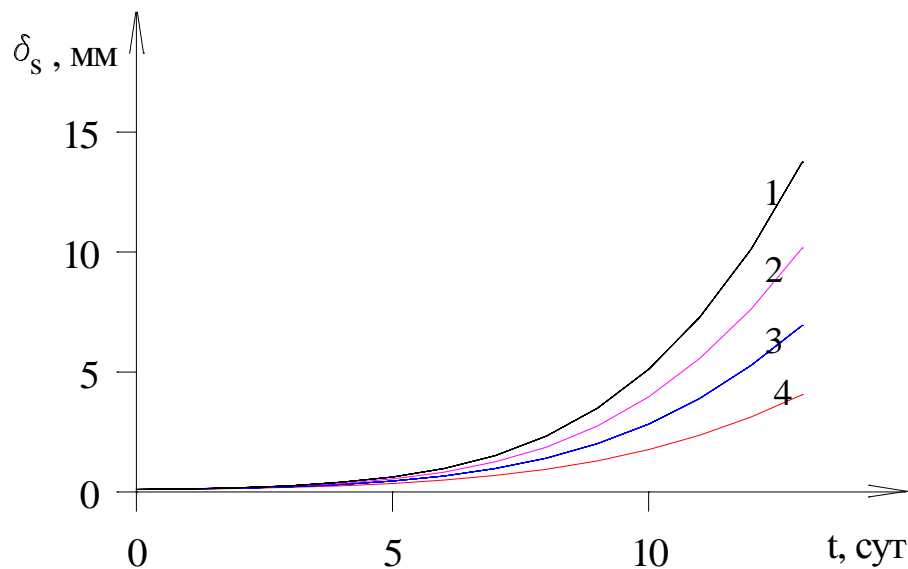


Рис. 2.4. Рост отложений нефтяного парафина на внутренних стенках подъемной колонны на различных глубинах. Кривые 1,2,3 и 4 соответствуют глубине  $H=100, 200, 300$  и  $400$  метров.

Процедура вычислений состоит в следующем. При  $i=0$  известно  $y_0 = u_0$ . Вычисляем последовательно  $k_1, k_2, k_3, k_4$  и находим

Аналогично определяем  $y_2, y_3$  и т.д. Для невязки получаем выражение

где  $k_j(u_i)$  ( $j = 1, 2, 3, 4$ ) вычисляются по формулам (2.20).

Разложим  $u_{i+1}, k_2(u_i), k_3(u_i), k_4(u_i)$  в ряд Тейлора в окрестности  $x_i$  и подставим в (2.21). Опуская выкладки из-за их большого объема, получим, что  $\psi_i = O(h^4)$ , т.е. приведенная схема имеет четвертый порядок аппроксимации.

Метод Рунге-Кутты применим к системе дифференциальных уравнений первого порядка:

с начальными условиями  $u_1(x_0) = u_{1,0}; u_2(x_0) = u_{2,0}; \dots; u_n(x_0) = u_{n,0}$ .

Введем следующие обозначения:

$$U(x) = \begin{vmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \\ \dots \\ u_n(x) \end{vmatrix}; \quad F(x, U) = \begin{vmatrix} f_1(x, U) \\ f_2(x, U) \\ \dots \\ f_n(x, U) \end{vmatrix}; \quad U_o = \begin{vmatrix} u_{1,0} \\ u_{2,0} \\ \dots \\ u_{n,0} \end{vmatrix}.$$

Тогда систему дифференциальных уравнений первого порядка можно представить в виде  $U' = dU/dx = F(x, U)$  с начальными условиями  $U(x_0) = U_0$ .

Запишем формулы метода Рунге-Кутты четвертого порядка для данного случая:

$$y_{1,i+1} = y_{1,i} + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

$$y_{2,i+1} = y_{2,i} + \frac{h}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4),$$

.....

$$y_{n,i+1} = y_{n,i} + \frac{h}{6}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4),$$

где

$$k_1 = f_1(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, \dots, y_{n,i}),$$

$$l_1 = f_2(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, \dots, y_{n,i}),$$

.....

$$m_1 = f_n(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, \dots, y_{n,i}),$$

$$k_2 = f_1\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{hk_1}{2}, y_{2,i} + \frac{hl_1}{2}, \dots, y_{n,i} + \frac{hm_1}{2}\right),$$

.....

$$m_2 = f_n\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{hk_1}{2}, y_{2,i} + \frac{hl_1}{2}, \dots, y_{n,i} + \frac{hm_1}{2}\right),$$

$$k_3 = f_1\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{hk_2}{2}, y_{2,i} + \frac{hl_2}{2}, \dots, y_{n,i} + \frac{hm_2}{2}\right),$$

.....

$$m_3 = f_n\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{hk_2}{2}, y_{2,i} + \frac{hl_2}{2}, \dots, y_{n,i} + \frac{hm_2}{2}\right),$$

$$k_4 = f_1(x_i + h, y_{1,i} + hk_3, y_{2,i} + hl_3, \dots, y_{n,i} + hm_3),$$

.....

$$m_4 = f_n(x_i + h, y_{1,i} + hk_3, y_{2,i} + hl_3, \dots, y_{n,i} + hm_3).$$

**Пример:** Применяя метод Рунге-Кутты четвертого порядка, найти распределение давления и температуры газонефтяного потока в добывающей скважине, работающей с постоянным давлением на устье.

Решение: Распределение давления, температуры газонефтяного потока может быть найдено из следующей системы дифференциальных уравнений:

$$\frac{dp}{dz} = -F_w - (\rho_l^0(1 - \alpha) + \rho_g^0 \alpha) g,$$

$$mc \frac{dT}{dz} = \frac{m_g}{\rho_g^0} \frac{dp}{dz} + A_l \frac{dk_{l(g)}}{dz} + A_g \frac{dk_{g(g)}}{dz} - Q_w,$$

$$\frac{dk_{l(g)}}{dz} = \left( \frac{dp}{dz} - p'_{(l)}(T) \frac{dT}{dz} \right) / G_{(g)},$$

$$\frac{dk_{g(g)}}{dz} = \left( p'_{(l)}(T) \frac{dT}{dz} - B \frac{dp}{dz} \right) / B' p,$$

где

$$F_w = \frac{\lambda_w}{4R} \left( \rho_l^0 \frac{(1 - \Phi)^2}{1 - \alpha} + \rho_g^0 \frac{\Phi^2}{\alpha} \right) w^2,$$

$$A_l = m_l \left( l_{(g)}^{lg} - l_{(l)}^{lg} \right) + \frac{L m_l}{k_{g(g)} - k_{l(g)}}, \quad A_g = \frac{L m_l}{k_{g(g)} - k_{l(g)}},$$

$$L = l_{(g)}^{lg} k_{g(g)} + l_{(l)}^{lg} (1 - k_{l(g)}),$$

$$mc = m_l c_l + m_g c_g, \quad Q_w = 2\pi R q_w.$$

Здесь индексами  $l$  и  $g$  помечены параметры, относящиеся к жидкой и газовой фазам;  $m_i$ ,  $\rho_i^0$  и  $c_i$  ( $i=l,g$ ) - массовый расход, истинная плотность и удельная теплоемкость  $i$ -й фазы;  $k_{i(g)}$  - массовая концентрация газовой компонента в  $i$ -й фазе;  $p$  - давление двухфазного потока;  $\varphi$  - объемное расходное газосодержание;  $\lambda_w$  - коэффициент трения между потоком и стенками канала;  $w$  - среднерасходная скорость;  $l_{(l)}^{lg}$  и  $l_{(g)}^{lg}$  - соответственно удельная теплота испарения жидкости и выделения растворенного газа;  $G_{(g)}$  - постоянная Генри;  $q_w$  - интенсивность отвода тепла в окружающую скважину породы, отнесенная на единицу площади скважины.

Введем следующие обозначения:

$$KLG = k_{l(g)}, \quad KGG = k_{g(g)},$$

$$\frac{dp}{dz} = f_1(z, p, T, KLG, KGG),$$

$$\frac{dT}{dz} = f_2(z, p, T, KLG, KGG),$$

$$\frac{dk_{l(g)}}{dz} = f_3(z, p, T, KLG, KGG),$$

$$\frac{dk_{g(g)}}{dz} = f_4(z, p, T, KLG, KGG).$$

Тогда формулы Рунге-Кутты для нашего примера запишутся в виде:

$$\begin{aligned} p_{i+1} &= p_i + \frac{h}{6}(k_{11} + 2k_{12} + 2k_{13} + k_{14}), \\ T_{i+1} &= T_i + \frac{h}{6}(k_{21} + 2k_{22} + 2k_{23} + k_{24}), \\ KLG_{i+1} &= KLG_i + \frac{h}{6}(k_{31} + 2k_{32} + 2k_{33} + k_{34}), \\ KGG_{i+1} &= KGG_i + \frac{h}{6}(k_{41} + 2k_{42} + 2k_{43} + k_{44}). \end{aligned} \tag{2.22}$$

Здесь

$$k_{11} = f_1(z_i, p_i, T_i, KLG_i, KGG_i),$$

.....

$$k_{41} = f_4(z_i, p_i, T_i, KLG_i, KGG_i),$$

$$k_{12} = f_1\left(z_i + \frac{h}{2}, p_i + \frac{hk_{11}}{2}, T_i + \frac{hk_{21}}{2}, KLG_i + \frac{hk_{31}}{2}, KGG_i + \frac{hk_{41}}{2}\right),$$

.....

$$k_{42} = f_4\left(z_i + \frac{h}{2}, p_i + \frac{hk_{11}}{2}, T_i + \frac{hk_{21}}{2}, KLG_i + \frac{hk_{31}}{2}, KGG_i + \frac{hk_{41}}{2}\right),$$

$$k_{13} = f_1\left(z_i + \frac{h}{2}, p_i + \frac{hk_{12}}{2}, T_i + \frac{hk_{22}}{2}, KLG_i + \frac{hk_{32}}{2}, KGG_i + \frac{hk_{42}}{2}\right),$$

.....

$$k_{43} = f_4\left(z_i + \frac{h}{2}, p_i + \frac{hk_{12}}{2}, T_i + \frac{hk_{22}}{2}, KLG_i + \frac{hk_{32}}{2}, KGG_i + \frac{hk_{42}}{2}\right),$$

$$k_{14} = f_1(z_i + h, p_i + hk_{13}, T_i + hk_{23}, KLG_i + hk_{33}, KGG_i + hk_{43}),$$

.....

$$k_{44} = f_4(z_i + h, p_i + hk_{13}, T_i + hk_{23}, KLG_i + hk_{33}, KGG_i + hk_{43}).$$

где  $h$  - шаг сетки.

Расчет производится следующим образом. При  $i=0$  вычисляем последовательно  $k_{1j}, k_{2j}, k_{3j}, k_{4j}$  ( $j = 1, 2, 3, 4$ ), затем по формулам (2.22) рассчитываем  $p_1, T_1, KLG_1, KGG_1$ . Используя эти значения, вычисляем новые  $k_{1j}, \dots, k_{4j}$ , затем  $p_2, T_2, KLG_2, KGG_2$  и т.д. вплоть до  $i=n$ . Значения  $i=n$  соответствуют значениям параметров на устье скважины.

Постоянства давления на устье добываемся с помощью метода пристрелки. Сущность его заключается в следующем: задаем на забое какое-либо значение давления  $p_0$ , затем рассчитываем  $p_i$  вплоть до  $p_n$ . Если  $p_n$  не совпадает в пределах ошибки со значением устьевого

давления, то изменяем  $p_0$  и рассчитываем новое значение  $p_n$ , сравниваем с давлением на устье и т.д.

На рис.2.5 приведены расчетные и промысловые данные по распределению давления и температуры газонефтяного потока по высоте скважины.

Метод Рунге-Кутты четвертого порядка точности обладает достаточной точностью для многих практических приложений. Он легко программируется. Поскольку для вычисления  $y_{i+1}$  нужно знать лишь одно значение  $y_i$ , то с помощью этого метода можно начинать решение уравнения (говорят, что метод является самостартующим). Величину шага можно легко изменить на любом этапе вычислений. Это достоинства метода.

Одним из недостатков метода является необходимость четыре раза вычислять значение функции на каждом шаге, что приводит к затрате большего количества машинного времени. Другим существенным недостатком является отсутствие легко определяемой оценки ошибки метода, помогающей в выборе величины шага.

На практике контроль точности и выбор величины шага производится путем сравнения в одной и той же точке результатов счета, полученных при значениях шага  $2h$  и  $h$ . Величина шага контролируется таким образом, чтобы погрешность не превышала

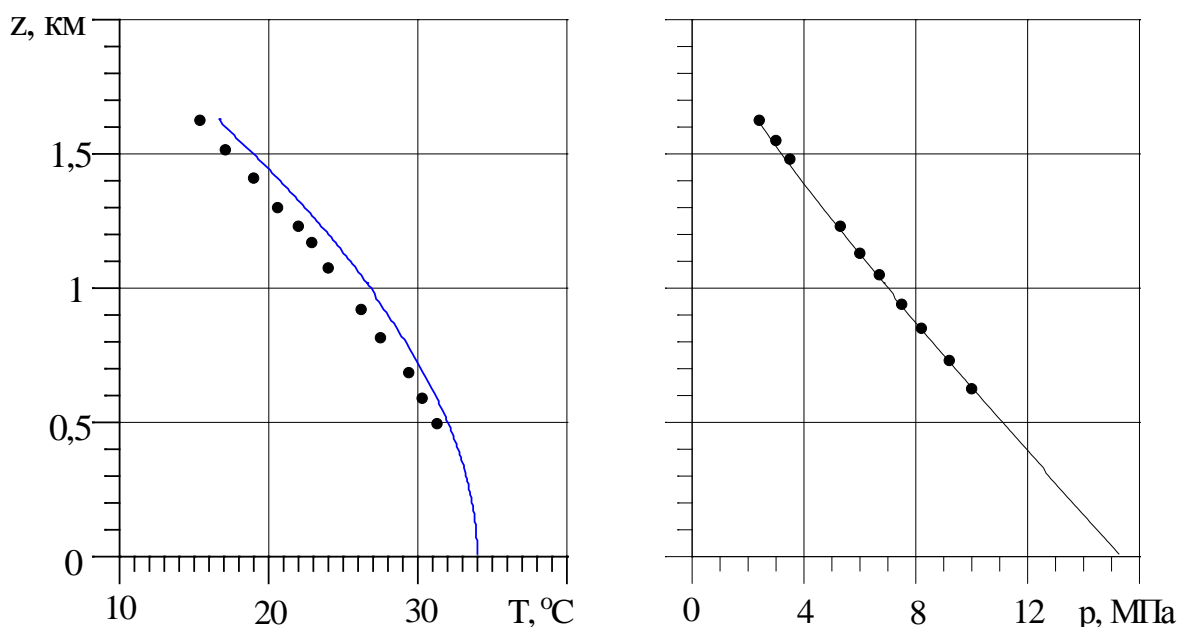


Рис. 2.5. Распределение температуры (слева) и давления (справа) газонефтяного потока по высоте скважины. Сплошная линия - расчетные кривые, точки - промысловые данные.



заданную величину  $\varepsilon$ . Для контроля точности приближенное значение для  $Y(x[k] + 2h)$  вычисляются дважды, используя шаг  $2h$  и два раза шаг  $h$ . Обозначим эти приближения соответственно  $Y^{(2)}(x[k] + 2h)$  и  $Y^{(1)}(x[k] + 2h)$ . По этим приближениям вычисляются величина

$$\delta = \frac{1}{15} \sum_{i=1}^n a_i |y_i^{(1)} - y_i^{(2)}|,$$

где  $a_i$  - заданные весовые коэффициенты ошибки. Значение  $\delta$  является приближенной мерой для локальной ошибки метода в точке  $x[k] + 2h$ . Если  $\delta$  больше заданной верхней границы погрешности  $\varepsilon$ , то шаг интегрирования  $h$  уменьшается вдвое, и процесс начинается снова с точки  $x[k]$ . Если  $\delta$  меньше  $\varepsilon$ , результаты  $Y^{(2)}(x[k] + 2h)$  и  $Y^{(1)}(x[k] + 2h)$  полагаются достаточно точными. Если  $\delta$  меньше  $\varepsilon/50$ , интегрирование осуществляется с двойным шагом.

### 2.3. МНОГОШАГОВЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

В одношаговых методах для получения значения  $y_{i+1}$  применяется информация только о точке  $(x_i, y_i)$ . Сведения о предыдущих точках не используются, но тем не менее осуществляется вычисление значений функции в некоторых промежуточных точках. Можно построить более эффективный вычислительный процесс, если использовать информацию о предыдущих точках  $(x_i, y_i), (x_{i-1}, y_{i-1}), \dots, (x_{i-k}, y_{i-k})$ .

Методы, основанные на этой идее, являются многошаговыми. Их отличительная особенность состоит в том, что количество вычислений значений функции на каждом шаге значительно меньше необходимого количества вычислений значений функции в методах Рунге-Кутты. Кроме того, в многошаговых методах на каждом шаге интегрирования достаточно просто получается оценка локальной ошибки, что позволяет эффективно изменять и выбирать величину шага. Однако с помощью данных методов нельзя начинать решение уравнения  $u' = f[x, u(x)]$ , так как требуется наличие информации о предыдущих точках. Эту информацию на первых шагах получают, например, с помощью методов типа Рунге-Кутты.

В общем случае для определения приближенного решения  $y_i$  можно рассмотреть  $k$ -шаговые разностные схемы ( $k \geq 1$ ), т.е. уравнения вида

$$\sum_{m=0}^k \frac{\alpha_m}{h} y_{i-m} = \sum_{m=0}^k \beta_m f_{i-m} \quad (i = k, k+1, \dots), \quad (2.23)$$

$$f_{i-m} = f(x_{i-m}, y_{i-m}),$$

где  $\alpha_m, \beta_m$  ( $\alpha_0 \neq 0, \beta_k \neq 0$ ) - числовые коэффициенты.

При  $k = 1, \beta_0 = 0, \beta_1 = \alpha_0 = -\alpha_1 = 1$  получаем известную схему Эйлера.

Схема (23) называется явной (экстраполяционной), если  $\beta_0 = 0$  и значения  $y_i$  определяются через предыдущие значения  $y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_{i-k}$  по явной формуле

$$y_i = \frac{1}{\alpha_0} \sum_{m=1}^k (\beta_m h f_{i-m} - \alpha_m y_{i-m}) = \frac{1}{\alpha_0} F(y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_{i-k}).$$

Вычисления начинаются с  $i=k$ . Чтобы найти  $y_k$ , надо задать  $k$  начальных значений  $y_0, y_1, \dots, y_{k-1}$ . Их можно найти, как уже упоминалось ранее, методом Рунге-Кутты, который использует лишь одно начальное значение  $y_0 = u_0$ .

При  $\beta_0 \neq 0$  схему (2.23) будем называть неявной (интерполяционной); в этом случае нахождения  $y_i$  при каждом  $i$  необходимо решать нелинейное уравнение

$$\alpha_0 y_i - \beta_0 h f(x_i, y_i) = F(y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_{i-k}).$$

Погрешность аппроксимации схемы (2.23) на решении  $u = u(x)$  уравнения (2.1) определяется по формуле

$$\psi_i = \sum_{m=0}^k \beta_m f_{i-m} - \frac{1}{h} \sum_{m=0}^k \alpha_m u_{i-m}.$$

Коэффициенты  $\alpha_m$  и  $\beta_m$  подбирают, исходя из требований аппроксимации и устойчивости. Без нарушения общности можно считать, что

$$\sum_{m=0}^k \beta_m = 1,$$

т.к. коэффициенты уравнения (2.23) определены с точностью до множителя. Разлагая  $\psi_i$  по степеням  $h$  и требуя, чтобы невязка имела заданный порядок, получаем условия для определения коэффициентов  $\alpha_m, \beta_m$ . Поскольку  $u=1$  есть решение уравнения  $u' = f(x, u)$  при  $f=0$ , из (2.23) следует, что

$$\sum_{m=0}^k \alpha_m = 0.$$

Обычно для построения схем (2.23) применяют другие приемы, использующие интерполяционные и квадратурные формулы. Так, интегрируя дифференциальное уравнение (2.1) по  $x$  в пределах от  $x_{i-i_0}$  до  $x_i$ , получаем

$$u_i - u_{i-i_0} = \int_{x_{i-i_0}}^{x_i} f[x, u(x)] dx \quad (2.24)$$

Чтобы получить отсюда разностную схему, можно использовать для интеграла какую-либо квадратурную формулу.

**Метод Адамса.** Заменим в соотношении

$$u_i - u_{i-1} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f[x, u(x)] dx, \quad (2.25)$$

которое соответствует тождеству (2.24) при  $i_0 = 1$ , интеграл квадратурной формулой:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f[x, u(x)] dx \approx h \sum_{m=0}^k \beta_m f_{i-m}. \quad (2.26)$$

Если положить в (2.23)  $\alpha_m = 0$  при  $m = 2, 3, \dots, k$  и  $\alpha_0 = 1, \alpha_1 = -1$ , то с учетом (2.25) и (2.26) получим разностную схему Адамса:

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h} = \sum_{m=0}^k \beta_m f(x_{i-m}, y_{i-m}). \quad (2.27)$$

Квадратурная формула (2.26), на основе которой построена схема Адамса, содержит узлы сеток, не принадлежащие отрезку интегрирования  $x_{i-1} < x < x_i$ . Обычно используется требование, чтобы квадратурная формула была точной для многочлена степени  $k$ . При этом выбирается интерполяционный многочлен с узлами  $x_i, x_{i-1}, \dots, x_{i-k}$ .

Погрешность аппроксимации при данном построении схемы совпадает с погрешностью квадратурной формулы. В самом деле, невязка для схемы (2.27) равна

$$\psi_i = \sum_{m=0}^k \beta_m f(x_{i-m}, u_{i-m}) - \frac{u_i - u_{i-1}}{h}.$$

Подставляя из (2.25) выражение

$$\frac{u_i - u_{i-1}}{h} = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f[x, u(x)] dx,$$

получаем формулу для невязки:

$$\psi_i = \sum_{m=0}^k \beta_m f(x_{i-m}, u_{i-m}) - \frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f[x, u(x)] dx.$$

Если положить в (2.27)  $k = 1$ ,  $\beta_0 = 1$ ,  $\beta_1 = 0$ , то получим неявную одношаговую схему Адамса

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h} = f(x_i, y_i).$$

Неявная симметричная одношаговая схема

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h} = \frac{1}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i-1}, y_{i-1})]$$

соответствует значениям  $k = 1$ ,  $\beta_0 = \beta_1 = 1/2$  и имеет второй порядок аппроксимации:  $\psi_i = O(h^2)$ . Для определения  $y_i$  необходимо решать

(при каждом  $i$ ) нелинейное уравнение  $y_i - hf(x_i, y_i)/2 = F_{i-1}$ , где  $F_{i-1} = y_{i-1} + hf(x_{i-1}, y_{i-1})/2$ .

Двухшаговая схема Адамса соответствует значению  $k = 2$ . Если положить в (2.27)  $k = 2$ ,  $\beta_0 = 0$ ,  $\beta_1 = 3/2$ ,  $\beta_2 = -1/2$ , то получим явную двухшаговую схему Адамса

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h} = \frac{3}{2}f(x_{i-1}, y_{i-1}) - \frac{1}{2}f(x_{i-2}, y_{i-2}).$$

Данная схема имеет второй порядок аппроксимации:

$$\psi_i = \frac{3}{2}f(x_{i-1}, u_{i-1}) - \frac{1}{2}f(x_{i-2}, u_{i-2}) - \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = O(h^2).$$

Проведем исследование устойчивости соответствующей модельной схемы

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h} + \lambda \left\{ \frac{3}{2}y_{i-1} - \frac{1}{2}y_{i-2} \right\} = 0, \quad \lambda > 0. \quad (2.28)$$

Общее решение данного уравнения можно найти явно. Будем искать линейно независимые решения уравнения (2.28) в виде  $y_i = q^i$ , где  $q \neq 0$  - неизвестное пока число. После подстановки получим

$$q^2 - \left(1 - \frac{3\mu}{2}\right)q - \frac{\mu}{2} = 0, \quad \mu = \lambda h. \quad (2.29)$$

Поскольку  $D = 1 - \mu + \frac{9}{4}\mu^2 > 0$  при любых  $\mu$ , то корни  $q_1$  и  $q_2$  действительны и различны. Устойчивость означает, что  $|q_1| \leq 1$  и  $|q_2| \leq 1$ . Воспользуемся следующим свойством, которое проверяется непосредственно. Корни квадратного уравнения  $q^2 + bq + c = 0$  не превосходят по модулю единицу ( $|q_1| \leq 1$  и  $|q_2| \leq 1$ ), если

$$|b| \leq 1 + c, \quad c \leq 1.$$

Для уравнения (2.29) имеем  $b = 3\mu/2 - 1$ ,  $c = -\mu/2$ , и условие  $|3\mu/2 - 1| \leq 1 - \mu/2$  будет выполнено при  $\mu \leq 1$ , или  $h\lambda \leq 1$ , т.е. схема

(2.28) условно устойчива (шаг  $h$  должен быть в два раза меньше допустимого шага в схеме Эйлера).

Напишем двухшаговую неявную схему Адамса. Требуя, чтобы квадратурная формула (2.26) была точной для полиномов степени 0, 1, 2, т.е.  $F(x) = \{1, x, x^2\} = f[x, u(x)]$ , находим коэффициенты  $\beta_0 = 5/12$ ,  $\beta_1 = 8/12$ ,  $\beta_2 = -1/12$ . Схема (2.27) имеет вид

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h} = \frac{1}{12}(5f_i + 8f_{i-1} - f_{i-2}).$$

Исследуем устойчивость модельной задачи

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h} + \frac{\lambda}{12}\{5y_i + 8y_{i-1} - y_{i-2}\} = 0. \quad (2.30)$$

Полагая  $y_i = q^i$ , получим характеристическое уравнение

$$aq^2 + bq + c = 0,$$

$$a = 1 + \frac{5}{12}h\lambda, \quad b = \frac{8}{12}h\lambda - 1, \quad c = -\frac{1}{12}h\lambda.$$

Условия, при которых  $|q_1| \leq 1$  и  $|q_2| \leq 1$ , принимают вид

$$|b| \leq a + c, \quad c \leq a.$$

Отсюда следует, схема (2.30) устойчива при  $h\lambda \leq 6$ .

Каждая квадратурная формула порождает соответствующий метод численного решения дифференциального уравнения (2.1). Наиболее простой способ представления  $f[x, u(x)]$  дает интерполяция алгебраическими многочленами  $P_n(x)$ . Запишем  $P_n(x)$  как интерполяционный многочлен Ньютона, тогда экстраполяционная формула Адамса приобретет вид

$$y_{i+1} - y_i = h \sum_{m=0}^i \beta_m \Delta^m f_{i-m}, \quad (2.31)$$

где  $\Delta^m f_{i-m}$  - конечные разности;  $\beta_m$  определяются из соотношения

$$\beta_m = \int_0^1 \frac{x(x+1)\dots(x+m-1)}{m!} dx.$$

Первые несколько констант  $\beta_m$  были подсчитаны Дж. Адамсом:

$$\beta_1 = \frac{1}{2}, \beta_2 = \frac{5}{12}, \beta_3 = \frac{3}{8}, \beta_4 = \frac{251}{720}, \beta_5 = \frac{95}{288}, \beta_6 = \frac{19087}{60480}, \beta_7 = \frac{5257}{17280}$$

Разберем построение вычислительной схемы по методу Адамса (табл. 2.2). Пусть для уравнения  $u' = f(x, u)$  с начальным условием  $u(x_0) = u_0$  найдены каким-либо способом три последовательных значения сеточной функции (“начальный отрезок”)

$$\begin{aligned} y_0 &= u_0, & y_1 &= y(x_1) = y(x_0 + h), \\ y_2 &= y(x_2) = y(x_0 + 2h), \\ y_3 &= y(x_3) = y(x_0 + 3h). \end{aligned}$$

С помощью этих значений вычисляем величины

$$\begin{aligned} z_0 &= hy'_0 = hf(x_0, y_0), & z_1 &= hy'_1 = hf(x_1, y_1), \\ z_2 &= hy'_2 = hf(x_2, y_2), & z_3 &= hy'_3 = hf(x_3, y_3). \end{aligned}$$

Записываем числа  $x_i, y_i, y'_i, z_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ ) в табл. 2.2 и вычисляем конечные разности величины  $z$  (числа над ломаной линией в табл. 2.2).

Метод Адамса продолжает данную таблицу с помощью формулы

$$\Delta y_i = z_i + \frac{1}{2} \Delta z_{i-1} + \frac{5}{12} \Delta^2 z_{i-2} + \frac{3}{8} \Delta^3 z_{i-3} \quad (i = 3, 4, \dots).$$

Данная формула применяется для “предсказания” значения  $y_{i+1} = y_i + \Delta y_i$ . Рассчитанное по этой формуле “предсказанное” значение обозначим через  $\hat{y}_{i+1}$ . Полученное по формуле (2.31) значение  $\Delta y_i$  необходимо еще уточнить. Для этого запишем в табл. 2.2 значения  $x_{i+1}, y_{i+1}, y'_{i+1}, z_{i+1}$  и сделаем пересчет по формуле “коррекции”

$$\Delta y_i = z_i + \frac{1}{2} \Delta z_i - \frac{1}{12} \Delta^2 z_{i-2} - \frac{1}{24} \Delta^3 z_{i-3}, \quad (2.32)$$

которая называется интерполяционной формулой Адамса. Уточненное с помощью формулы (2.32) значение обозначим через  $\tilde{y}_{i+1}$ . Сравнивая значения  $\hat{y}_{i+1}$  и  $\tilde{y}_{i+1}$ , можем судить о точности счета и принять решение о величине шага.

Формулы (2.31) и (2.32) имеют достаточно большую точность. Они дают погрешность порядка  $O(h^4)$ , но сами выражения для оценки погрешности довольно сложны.

На практике пользуются обычно следующими соображениями. Ошибка более точной формулы коррекции (2.32) составляет примерно 1/14 часть разности между значениями  $\Delta y_i$ , подсчитанными по формулам (2.31) и (2.32). Поэтому, если указанная разность не

Таблица 2.2

$i$	$x_i$	$y_i$	$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$	$y'_i = f(x_i, y_i)$	$z_i = h y'_i$	$\Delta z_i = z_{i+1} - z_i$	$\Delta^2 z_i$	$\Delta^3 z_i$
0	$x_0$	$y_0$	$\Delta y_0$	$f(x_0, y_0)$	$z_0$	$\Delta z_0$	$\Delta^2 z_0$	$\Delta^3 z_0$
1	$x_1$	$y_1$	$\Delta y_1$	$f(x_1, y_1)$	$z_1$	$\Delta z_1$	$\Delta^2 z_1$	$\Delta^3 z_1$
2	$x_2$	$y_2$	$\Delta y_2$	$f(x_2, y_2)$	$z_2$	$\Delta z_2$	$\Delta^2 z_2$	$\Delta^3 z_3$
3	$x_3$	$y_3$	$\Delta y_3$	$f(x_3, y_3)$	$z_3$	$\Delta z_3$	$\Delta^2 z_3$	
4	$x_4$	$y_4$	$\Delta y_4$	$f(x_4, y_4)$	$z_4$	$\Delta z_4$		
5	$x_5$	$y_5$	$\Delta y_5$	$f(x_5, y_5)$	$z_5$			
6	$x_6$	$y_6$						



превышает допустимую ошибку расчета, то шаг  $h$  считается выбранным верно и вычисления продолжают с данным шагом. Если же на некотором этапе расчета указанная разность становится большой (и при этом нет ошибки в самих вычислениях!), то шаг  $h$  следует уменьшить.

Порядок заполнения табл. 2.2:

1. Записываем в таблицу числа  $x_i, y_i, y'_i, z_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ ) и вычисляем разности  $\Delta z_i$  ( $i = 0, 1, 2$ ),  $\Delta^2 z_i$  ( $i = 0, 1$ ),  $\Delta^3 z_0$ ;

2. Используя числа  $z_3, \Delta z_2, \Delta^2 z_1, \Delta^3 z_0$ , помещенные в таблицу по диагонали, определяем по формуле (2.31) при  $i=3$ ,

$$\Delta y_3 = z_3 + \frac{1}{2} \Delta z_2 + \frac{5}{12} \Delta^2 z_1 + \frac{3}{8} \Delta^3 z_0;$$

3. Вычисляем  $x_4 = x_3 + h$ ,  $y_4 = y_3 + \Delta y_3$ ;

4. Записываем значения  $x_4, y_4$ , находим  $y'_4 = f(x_4, y_4)$ ,  $z_4 = hy'_4$  и пополняем таблицу значениями  $\Delta z_3, \Delta^2 z_2, \Delta^3 z_1$ ;

5. Используя полученные значения разностей, уточняем величину  $\Delta y_3$  по формуле (2.32) при  $i=3$ ,

$$\Delta y_3 = z_3 + \frac{1}{2} \Delta z_3 - \frac{1}{12} \Delta^2 z_2 - \frac{1}{24} \Delta^3 z_1;$$

6. Если скорректированное значение  $\Delta y_3$  отличается от предсказанного значения  $\Delta y_3$  на несколько единиц младшего сохраняемого разряда, то вносим соответствующие поправки в значения  $\Delta y_3$  и  $y_4$ , проверяем, что эти поправки не скажутся существенно на значении  $z_4$ , и продолжаем расчет с выбранным шагом. В противном случае уменьшаем шаг.

Вычисления для  $i=4, 5, \dots$  проводятся аналогично.

Для работы на ЭВМ формулы Адамса зачастую удобнее применять в несколько другой форме, а именно, выражая  $y_{i+1}$  не через разности  $\Delta z$ , а непосредственно через величины  $z$ . Тогда экстраполяционная формула Адамса запишется в виде

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (55y'_i - 59y'_{i-1} + 37y'_{i-2} - 9y'_{i-3}), \quad (2.33)$$

а интерполяционная формула Адамса в виде

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(9y'_{i+1} + 19y'_i - 5y'_{i-1} + y'_{i-2}). \quad (2.34)$$

Метод Адамса легко распространяется на системы дифференциальных уравнений, а также на дифференциальные уравнения  $n$ -го порядка.

Пусть нам дана система двух уравнений

$$\begin{cases} u' = f_1(x, u, v) \\ v' = f_2(x, u, v) \end{cases}$$

Экстраполяционные формулы Адамса для данной системы можно записывать следующим образом

$$\begin{cases} \Delta y_i = z_i + \frac{1}{2}\Delta z_{i-1} + \frac{5}{12}\Delta^2 z_{i-2} + \frac{3}{8}\Delta^3 z_{i-3}, \\ \Delta v_i = p_i + \frac{1}{2}\Delta p_{i-1} + \frac{5}{12}\Delta^2 p_{i-2} + \frac{3}{8}\Delta^3 p_{i-3}, \end{cases}$$

где

$$z_i = hy'_i = hf_1(x_i, y_i, v_i),$$

$$p_i = hv'_i = hf_2(x_i, y_i, v_i).$$

Аналогичным образом для системы записываются интерполяционные формулы Адамса.

**Пример:** Методом Адамса найти на интервале  $[0; 0,5]$  с точностью до  $10^{-5}$  решение уравнения

$$y' = -0,25y^2 + x^2, \quad (2.35)$$

с начальным условием  $y(0) = -1$ .

Решение: Уравнение (2.35) - это специальное уравнение Риккати  $y' + ay^2 = bx^m$  при  $b = 1, a = 0,25$  и  $m=2$ . Аналитическими методами при  $m=2$  уравнения Риккати не решаются, поэтому для решения данного уравнения применяют численные методы.

Решение: Методом Рунге-Кутты с шагом  $h=0,1$  получим значения искомой функции при  $x_1 = 0,1, x_2 = 0,2, x_3 = 0,3$ . Дальнейшие вычисления будем вести по формуле (2.33) с уточнением по формуле (2.34). Результаты вычислений поместим для наглядности в двух таблицах: табл. 2.3 - вычисления по формуле (2.33) с

уточнением по формуле (2.34); табл. 2.4 - вычисление правой части уравнения (2.35). Через  $\alpha_i$  и  $\beta_i$  в табл. 2.3 обозначены следующие суммы

$$\alpha_i = 55y'_i - 59y'_{i-1} + 37y'_{i-2} - 9y'_{i-3},$$

$$\beta_i = 9y'_{i+1} + 19y'_i - 5y'_{i-1} + y'_{i-2}.$$

Порядок заполнения таблиц:

1. Записываем в табл. 2.3 значения  $x_1 = 0,1$ ,  $x_2 = 0,2$ ,  $x_3 = 0,3$  и соответствующие значения  $y_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ ). Вычисляем по ним  $y'_i = f(x_i, y_i)$ ;

2. Определяем величину  $\alpha_3/24 = (55y'_3 - 59y'_2 + 37y'_1 - 9y'_0)/24 = 0,32834$ , записываем ее в табл. 2.3 и по формуле (2.33) при  $i=4$  находим

$$\hat{y}_4 = y_3 + h \frac{\alpha_3}{24} = -0,92154 + 0,1 \cdot 0,32834 = -0,88871;$$

3. Записываем значения  $x_4$ ,  $y_4$  в табл. 2.4 и определяем по ним  $y'_4 = f(x_4, y_4) = 0,35745$ ;

4. Находим величину

Таблица 2.3

$i$	$x_i$	$y_i$	$y'_i$	$\frac{\alpha_i}{24}$	$\frac{\beta_i}{24}$	$h \frac{\alpha_i}{24}$	$h \frac{\beta_i}{24}$
0	0,0	-1	0,25				
1	0,1	-0,97528	0,24779				
2	0,2	-0,94978	0,26552				
3	0,3	-0,92154	0,30232	0,32834	0,32830	0,03283	0,03284
4	0,4	-0,88871	0,35745	0,39237	0,39246	0,03924	0,03925
		-0,88870					
5	0,5	-0,84946	0,43040				
		-0,84946					

Таблица 2.4

$i$	$x$	$x^2$	$y$	$0,25y^2$	$f(x,y)=0,25y^2 + x^2$
0	0,0	0,0	-1	0,25	0,25
1	0,1	0,01	-0,97528	0,23779	0,24779
2	0,2	0,04	-0,94978	0,22552	0,26552
3	0,3	0,09	-0,92154	0,21232	0,30232
4	0,4	0,16	-0,88871	0,19745	0,35745
			-0,88870		
5	0,5	0,25	-0,84946	0,18040	0,43040
			-0,84946		

$$\frac{\beta_i}{24} = \frac{1}{24} (9y'_4 + 19y'_3 - 5y'_2 + y'_1) = 0,32840,$$

записываем ее в табл. 2.3 при  $i=3$  и уточняем значение  $y_4$  по формуле (2.34)

$$\tilde{y}_4 = y_3 + h \frac{\beta_3}{24} = -0,92154 + 0,1 \cdot 0,32830 = -0,88870;$$

5. Поскольку полученные значения  $\hat{y}_4$  и  $\tilde{y}_4$  отличаются только на  $10^{-5}$ , то вносим исправление в значение  $y_4$  табл. 2.3 и 2.4:  $y_4 = -0,88870$ ;

6. Записываем найденное значение  $y_4 = \tilde{y}_4$  в табл. 2.4, убеждаемся в том, что внесенное исправление не изменяет значения  $y'_4 = f(x_4, y_4)$ .

Вычисления для  $y_5$  проводим аналогичным образом.

**Метод Милна.** Пусть для уравнения  $u' = f(x, u)$  кроме начального условия  $u(x_0) = u_0$  известен “начальный отрезок”, т.е. значения сеточной функции  $y_i = u(x_i)$  в точках  $x_i = x_0 + ih$ , ( $i = 1, 2, 3$ ). Последующие значения  $y_i$  при для  $i=4, 5, \dots$  определяются следующим образом. Для предсказания используется первая формула Милна:

$$\hat{y}_i = y_{i-4} + \frac{4h}{3}(2y'_{i-1} - y'_{i-2} + 2y'_{i-3}). \quad (2.36)$$

Зная  $\hat{y}_i$ , находим  $y'_i = f(x_i, \hat{y}_i)$  и производим уточнение (коррекцию) по второй формуле Милна

$$\tilde{y}_i = y_{i-2} + \frac{h}{3}(y'_{i-2} + 4y'_{i-1} + y'_i). \quad (2.37)$$

Абсолютная погрешность  $\varepsilon_i$  более точного значения  $\tilde{y}_i$  приближенно определяется из выражения

$$\varepsilon_i \approx \frac{1}{29}|\tilde{y}_i - \hat{y}_i|.$$

Эта формула позволяет на каждом шаге контролировать точность полученного результата. Если искомое решение требуется найти с точность до  $\varepsilon$  и окажется, что  $\varepsilon_i \leq \varepsilon$ , то можем положить

$$y_i \approx \tilde{y}_i$$

и перейти к вычислению  $y_{i+1}$ . В противном случае следует уменьшить шаг  $h$ .

Остаточные члены выражений (2.36) и (2.37) имеют порядок  $O(h^5)$  на каждом шаге и порядок  $O(h^4)$  на всем интервале  $[x_0, x_n]$ .

Метод Милна можно использовать для приближенного решения систем дифференциальных уравнений первого порядка, а также уравнений более высших порядков, которые предварительно следует преобразовать в такие системы.

**Пример:** Методом Милна найти на интервале  $[0;1]$  с точностью до  $3 \cdot 10^{-4}$  решение уравнения

$$xy'' + y' + xy = 0 \quad (2.38)$$

с начальными условиями  $y(0) = -1, y'(0) = 0$ .

Решение: Преобразуем уравнение (2.38) в систему. В данном случае выгодно применить подстановку  $xy' = z$ . В результате получим систему

$$\begin{cases} y' = \frac{z}{x}, \\ z' = -xy \end{cases} \quad (2.39)$$

с начальными условиями  $y(0) = -1, z(0) = 0$ .

Примем шаг расчета  $h=0,2$ . Для получения начального отрезка воспользуемся методом неопределенных коэффициентов, где решение получается в виде ряда

$$y(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{(n!)^2} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n}.$$

Возьмем  $y(x)$  в виде отрезка этого ряда, сохраняя те члены, которые в точке  $x_3 = 0,6$  дают значение, большее, чем  $3 \cdot 10^{-4}$ :

$$y(x) \approx 1 - \frac{x^2}{4} + \frac{x^4}{64}$$

Тогда  $z'(x) \approx -x + \frac{x^3}{4} - \frac{x^5}{64}$ . Сохраняя только члены, превосходящие  $3 \cdot 10^{-4}$  в точке  $x_3 = 0,6$ , получаем

$$z(x) \approx -\frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{16} - \frac{x^6}{384}.$$

Результаты расчетов запишем в табл. 2.5. Порядок ее заполнения:

1. Составляем таблицу значений  $y(x)$  и  $z(x)$  при  $x_1 = 0,2$ ,  $x_2 = 0,4$ ,  $x_3 = 0,6$  и записываем их в табл. 2.5;

2. Вычисляем  $y'_i = z_i/x_i$ ,  $z'_i = -x_i y_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ );

3. Определяем по формуле (2.36) предсказанные “разности  $y$ ” и “разности  $z$ ”:

$$\hat{y}_4 - y_0 = \frac{4h}{3}(2y'_3 - y'_2 + 2y'_1) = -0,1537,$$

$$\hat{z}_4 - z_0 = \frac{4h}{3}(2z'_3 - z'_2 + 2z'_1) = -0,2950,$$

эти результаты вписываем в строку  $i=4$ ;

4. Вычисляем предсказанные значения функций в точке  $x_4 = 0,8$ :  $\hat{y}_4 = 1 - 0,1537 = 0,8463$ ,  $\hat{z}_4 = 0 - 0,2950 = -0,2950$ . Записываем их в строку  $i=4$  и находим

$$y'_4 = \frac{\hat{z}_4}{x_4}, \quad z'_4 = -x_4 \hat{y}_4;$$

5. Определяем скорректированные “разности  $y$ ” и “разности  $z$ ” по формуле (2.37):

$$\tilde{y}_4 - y_2 = \frac{h}{3}(y'_4 - 4y'_3 + y'_2) = -0,1141,$$

$$\tilde{z}_4 - z_2 = \frac{h}{3}(z'_4 - 4z'_3 + z'_2) = -0,2167,$$

Таблица 2.5

$i$	$x_i$	$y_i$	$z_i$	$y'_i$	$z'_i$	Разности $y$	Разности $z$	
0	0	1	0	0	0			
1	0,2	0,9900	-0,0199	-0,0995	-0,1980			
2	0,4	0,9604	-0,0784	-0,1960	-0,3842			
3	0,6	0,9120	-0,1720	-0,2867	-0,5472			
4	0,8	0,8463	-0,2950	-0,3688	-0,6770	-0,1537	-0,2950	предсказание
		0,8463	-0,2951	-0,3689	-0,6770	-0,1141	-0,2167	коррекция
5	1,0	0,7652	-0,4400	-0,4400	-0,7652			предсказание
		0,7652	-0,4400					коррекция

эти результаты вписываем в строку  $i=4$ ;

6. Вычисляем скорректированные значения функций в точке  $x_4 = 0,8$ :

$$\tilde{y}_4 = 0,9604 - 0,1141 = 0,8463,$$

$$\tilde{z}_4 = -0,0784 - 0,2167 = -0,2951;$$

7. Поскольку расхождения между предсказанными и скорректированными значениями не превосходят  $3 \cdot 10^{-4}$ , то полагаем

$$y_4 = 0,8463, \quad \tilde{z}_4 = -0,2951$$

и продолжаем расчет при  $i=5$ .

**Замечание:** Метод Милна не обладает устойчивостью, поэтому его рекомендуется применять только тогда, когда предполагаемое число шагов невелико.



### 3. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Многие физические проблемы сводятся к решению уравнений в частных производных, поэтому необходимо знать физические особенности решений этих уравнений. Для решения конкретных задач необходимо уметь определять тип дифференциального уравнения в частных производных и знать его основные математические особенности.

#### 3.1. ФИЗИЧЕСКАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ УРАВНЕНИЙ

**Стационарные задачи.** Задача называется *стационарной*, если решение уравнения в частных производных внутри некоторой области определяется лишь условиями на границе этой области. Физически стационарная задача описывает установившийся процесс, а математически сводится к решению задачи с граничными условиями (краевой задачи) для уравнения в частных производных. К стационарным задачам относится определение стационарного поля температур, расчет течения несжимаемой невязкой жидкости, нахождение упругих напряжений в твердом теле.

Иногда стационарные задачи называют *детерминированными*, так как решение в любой внутренней точке области определяется условиями, заданными на ее границе. Установившиеся процессы обычно описываются уравнениями в частных производных эллиптического типа.

**Маршевые задачи.** Маршевой или эволюционной или нестационарной (или задачей распространения) называется задача, в которой требуется найти решение уравнения в частных производных в незамкнутой области при заданных граничных и начальных условиях. Математически задачи такого типа являются задачами с начальными условиями или задачами с начальными и граничными условиями. Решение таких задач должно быть найдено последовательным движением в маршевом направлении наружу от поверхности, на которой заданы начальные условия, при этом необходимо удовлетворить также граничным условиям. Такие задачи описываются уравнениями в частных производных гиперболического или параболического типов.

Характер физических процессов, описываемых, например, уравнением теплопроводности и волновым уравнением, различен, хотя оба этих уравнения являются маршевыми. Различаются также методы их решения и математические свойства этих решений. Типичными примерами маршевых задач являются также

нестационарные фильтрационные течения жидкости и газа, стационарные сверхзвуковые течения невязкого газа, нестационарное распространение тепла и др.

### 3.2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ УРАВНЕНИЙ

Уравнение в частных производных второго порядка, записанное в общем виде, обычно используют для пояснения математической классификации уравнений в частных производных. Рассмотрим уравнение в частных производных

$$a \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + d \frac{\partial F}{\partial x} + e \frac{\partial F}{\partial y} + fF = G(x, y) \quad (3.1)$$

или в другой форме записи

$$aF_{xx} + bF_{xy} + cF_{yy} + dF_x + eF_y + fF = G(x, y)$$

Здесь  $a, b, c, d, e, f$  - функции от  $x, y$ , т.е. рассматривается лишь линейное уравнение. Хотя для последующего анализа это ограничение несущественно, однако оно позволяет упростить изложение. Часто рассматривают квазилинейные уравнения, т.е. уравнения, линейные относительно старших производных. В этом случае коэффициенты  $a, b$  и  $c$  в уравнении (3.1) могут зависеть от  $x, y, F, F_x$  и  $F_y$ . Мы, однако, ограничимся линейным уравнением (3.1) с коэффициентами, зависящими лишь от  $x, y$ .

Определим теперь канонические формы записи уравнений в частных производных различных типов. Известно, что в виде (3.1) могут быть записаны уравнения трех различных типов: *гиперболические* ( $b^2 - 4ac > 0$ ), *параболические* ( $b^2 - 4ac = 0$ ) и *эллиптические* ( $b^2 - 4ac < 0$ ). Такая классификация уравнений в частных производных второго порядка проводится по аналогии с классификацией кривых второго порядка в аналитической геометрии.

Волновое уравнение, уравнение теплопроводности и уравнение Лапласа являются соответственно уравнениями трех указанных типов.

**Некоторые свойства волнового уравнения.** Наиболее известным из уравнений гиперболического типа является волновое уравнение

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (3.2)$$

Рассмотрим решение уравнения (3.2) в области  $-\infty < x < +\infty$

начальными условиями

$$\begin{aligned} u(x,0) &= f(x), \\ u_t(x,0) &= g(x). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Перейдя к переменным  $\xi = x + ct$ ,  $\eta = x - ct$ , (так называемым характеристическим переменным или характеристикам), получим волновое уравнение в канонической форме  $u_{\xi\eta} = 0$ .

Решение этого уравнения определяется последовательным интегрированием и имеет вид

$$u(x,t) = F_1(x + ct) + F_2(x - ct). \quad (3.4)$$

Это решение называют решением Даламбера волнового уравнения. Конкретный вид функций  $F_1$  и  $F_2$  определяется начальными условиями

$$\begin{aligned} u(x,0) &= f(x) = F_1(x) + F_2(x), \\ u_t(x,0) &= g(x) = cF_1'(x) - cF_2'(x). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Решение поставленной задачи имеет вид:

$$u(x,t) = \frac{f(x + ct) + f(x - ct)}{2} + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} g(\tau) d\tau. \quad (3.6)$$

Используем это решение для иллюстрации основных свойств

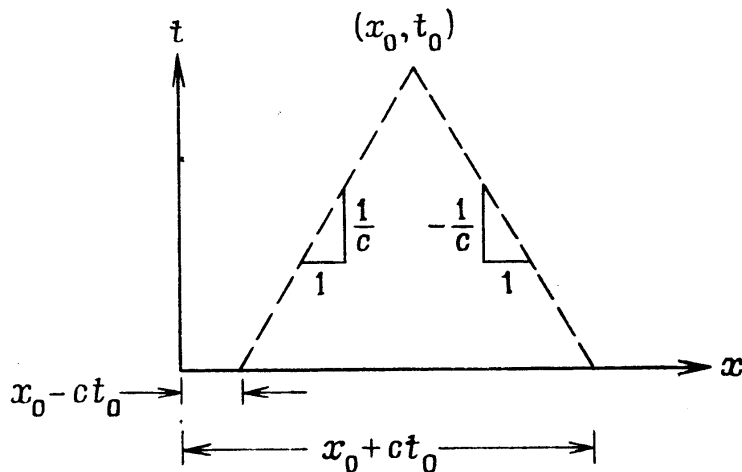


Рис. 3.1. Характеристики волнового уравнения.

гиперболических уравнений в частных производных. На рис 3.1.

показаны характеристики, проходящие через точку  $(x_0, t_0)$ . Тангенс угла наклона правой характеристики равен  $+(1/c)$ , а тангенс левой равен  $-(1/c)$ . Решение  $u(x, t)$  в точке  $(x_0, t_0)$  зависит лишь от начальных значений в интервале  $x_0 - ct_0 \leq x \leq x_0 + ct_0$ . Первое слагаемое в решении (3.6) описывает перенос начальных данных вдоль характеристик, а второе - вклад начального распределения на конечном замкнутом интервале.

Продемонстрированная выше ограниченность области зависимости решения является характерной особенностью гиперболических уравнений в частных производных. В этом примере область зависимости ограничена характеристиками, проходящими через точку  $(x_0, t_0)$ , так как решение в этой точке определяется лишь условиями на ограниченном этими характеристиками интервале. Это означает, что никакое возмущение, возникающее вне указанного интервала, не может влиять на решение в точке  $(x_0, t_0)$ . Это свойство решений характерно для всех гиперболических уравнений в частных производных и объясняет, почему задача с начальными данными для гиперболических уравнений называется маршевой или эволюционной: начальные данные задаются, а решение определяется последовательным продвижением по времени или играющей его роль координате.

**Некоторые свойства параболических уравнений.** Параболические уравнения обычно описывают диффузионные, фильтрационные процессы или процессы теплопроводности. Хотя эти уравнения являются маршевыми (эволюционными), т. е. допускают решение последовательным продвижением по времени (или аналогичной времени маршевой координате), зона зависимости их решений в отличие от гиперболических уравнений не ограничена. Решение параболического уравнения в любой момент времени  $t_1$  зависит от параметров во всей рассматриваемой области в предыдущие моменты времени ( $t \leq t_1$ ), в том числе и от условий на боковых границах.

Пусть требуется определить нестационарное поле температуры в полубесконечном твердом теле с коэффициентом теплопроводности  $\alpha$ , при внезапном изменении температуры на его границе от нуля до  $T_0$ .

Процесс распространения тепла описывается уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (3.7)$$

Граничные и начальные условия будут иметь вид

$$T(0, x) = 0, \quad T(t, 0) = T_0 \quad (t > 0), \quad T(t, \infty) = 0, \quad (3.8)$$

При решении параболических задач часто достаточно найти их автомодельное решение. Для этого нужно провести замену переменных, позволяющее понизить число независимых переменных в исходном уравнении. В рассматриваемой задаче можно заменой

$$\theta = T/T_0, \quad \xi = x/2\sqrt{\alpha t} \quad (3.9)$$

свести уравнение в частных производных к обыкновенному дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2\theta}{d\xi^2} + 2\xi \frac{d\theta}{d\xi} = 0 \quad (3.10)$$

с граничными условиями  $\theta(0) = 1$ ,  $\theta(\infty) = 0$ , решая которое, получим

$$T = T_0 \left( 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\xi} e^{-\xi^2} d\xi \right). \quad (3.11)$$

**Некоторые свойства эллиптических уравнений.** Третий тип уравнений в частных производных - эллиптический. Рассмотрим основные свойства эллиптических уравнений, которые, как отмечалось выше, описывают стационарные процессы.

Стационарное поле температуры в проводящей среде с постоянным коэффициентом теплопроводности удовлетворяет уравнению Лапласа. Рассмотрим типичную задачу расчета двумерного поля температур в твердом теле, температура на границах которого поддерживается постоянной. Эта задача сводится к решению уравнения

$$\nabla^2 T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1, \quad (3.12)$$

с граничными условиями

$$T(0, y) = 0, \quad T(1, y) = 0, \quad T(x, 0) = T_0, \quad T(x, 1) = 0.$$

В области  $D$  решение должно удовлетворять уравнениям в частных производных; на границе  $B$  области  $D$  решение должно удовлетворять граничным условиям.

Для решения линейных уравнений в частных производных часто применяют метод разделения переменных. Для того чтобы воспользоваться им, предположим, что искомая температура является произведением двух функций, одна из которых зависит только от  $x$ , а другая - только от  $y$ :  $T(x, y) = X(x)Y(y)$ .

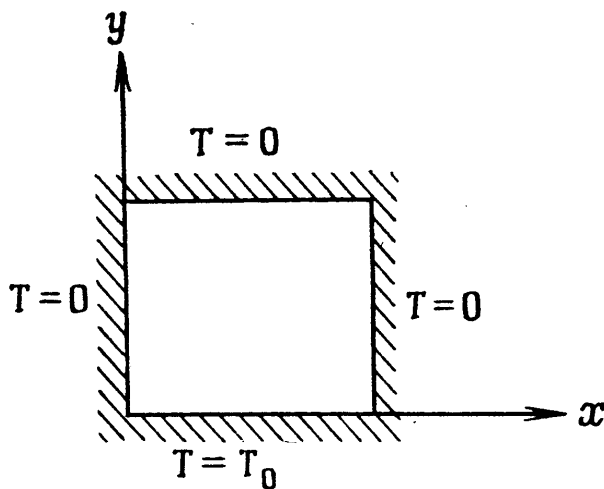


Рис.3.2. Иллюстрация к задаче о стационарном распределении температуры в квадратной ячейке.

Подставив это выражение для температуры в уравнение Лапласа, получим два обыкновенных дифференциальных уравнения. Выпишем их вместе с однородными граничными условиями

$$\begin{aligned} X'' + \alpha^2 X &= 0, Y'' + \alpha^2 Y = 0, \\ X(0) &= 0, \\ X(1) &= 0, Y(0) = 0. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Штрихом здесь обозначено дифференцирование. Появление в уравнениях коэффициента  $\alpha$  связано с проведенным разделением переменных. Значение этого коэффициента необходимо определить в процессе решения задачи. Решая уравнения (3.13), с учетом граничных условий, получим

$$T(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin(n\pi x) \operatorname{sh}[n\pi(y-1)], \quad (3.14)$$

где коэффициенты  $A_n$  определяются из соотношения

$$A_n = \frac{2T_0}{n\pi} \frac{[(-1)^n - 1]}{\operatorname{sh}(n\pi)}.$$

Найденное решение  $T(x, y)$  уравнения описывает распределение температуры в твердом теле. Очевидно, что значение температуры в любой внутренней точке области зависит от условий, заданных на всей границе этой области. Такая зависимость решения от граничных условий характерна для всех стационарных задач математической физики.

Характер решения уравнений в частных производных определяется заданными граничными и начальными условиями. Так для гиперболических уравнений в частных производных, в случае, когда начальные условия заданы на характеристике, нельзя найти единственное решение. Для эллиптических и параболических уравнений также можно привести примеры неудачных граничных и начальных условий.

Задача для уравнений в частных производных называется *корректно поставленной*, если она имеет единственное решение, непрерывно зависящее от начальных и граничных условий.

Если требуется найти решение уравнения в частных производных, когда на ее границе задано значение искомой функции, то в этом случае граничные условия называют *условиями первого рода (задача Дирихле)*. Если на границе задана производная искомой функции, то это - *условия второго рода (задача Неймана)*. Обобщением задач Дирихле и Неймана, когда на границе области задана линейная комбинация искомой функции и ее производной по нормали к границе является так называемая *смешанная краевая задача*, с граничными условиями *третьего рода (задачей Робина)*.

**Другие представляющие интерес уравнения в частных производных.** Приведем несколько важных уравнений в частных производных, которые либо описывают часто встречающиеся физические процессы, либо используются для анализа свойств разностных схем применяемых при решении более сложных уравнений.

1. Линейное волновое уравнение первого порядка

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

Это уравнение описывает волну, бегущую вправо с постоянной скоростью  $c$ . Оно часто встречается в метеорологии.

## 2. Невязкое уравнение Бюргерса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

Это уравнение описывает процесс распространения нелинейных волн в одномерном случае.

## 3. Уравнение Бюргерса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

## 4. Уравнение Трикоми

$$y \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

является уравнением смешанного типа. Оно описывает, например, трансзвуковые течения невязкого газа. Важным свойством уравнения Трикоми является то, что оно изменяет тип с эллиптического на гиперболический в зависимости от знака  $y$ .

## 5. Уравнение Пуассона

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y).$$

Это уравнение эллиптического типа описывает распределение температуры в твердом теле, когда внутри тела есть источники тепла интенсивности  $f(x, y)$ . Уравнение Пуассона описывает также напряженность электрического поля, если плотность распределения зарядов равна  $f(x, y)$ .

## 6. Уравнение конвекции и диффузии

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + u \frac{\partial \xi}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}.$$

Это уравнение описывает перенос скалярной величины  $\xi$  при скорости конвекции  $u$ ,  $\alpha$  - коэффициент либо вязкости, либо диффузии.

## 7. Уравнение Кортевега де Вриза

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

описывает процесс распространения нелинейных волн при наличии дисперсии.

## 8. Уравнение Гельмгольца

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + k^2 u = 0.$$



Это уравнение описывает движение нестационарной гармонической волны с волновым числом  $k$ . В приложениях его используют для описания распространения звуковых волн.

### 3.3. ОСНОВЫ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

Некоторые понятия, используемые при конечно-разностном решении уравнений в частных производных, описаны в предыдущей главе для решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Основой метода конечных разностей является дискретизация - замена непрерывной области совокупностью изолированных точек (сеткой), причем решение уравнений ищется лишь в этих точках (узлах сетки). Производные аппроксимируются конечными разностями и решение уравнения в частных производных сводится к решению системы алгебраических уравнений, основные методы решения которых рассмотрены в главе 1.

Основные особенности получающейся системы алгебраических уравнений определяются типом исходного уравнения в частных производных (или системы уравнений в частных производных). Стационарные задачи обычно сводятся к системам алгебраических уравнений, которые приходится решать одновременно во всей расчетной области, учитывая заданные граничные условия. Маршевые задачи часто сводятся к алгебраическим уравнениям, которые можно решать последовательно (хотя часто удобнее одновременно решать несколько уравнений).

Одним из первых шагов при применении метода конечных разностей к решению уравнения в частных производных является переход от непрерывной области к конечно-разностной сетке. Пусть, например, надо найти решение  $u(x, y)$  уравнения в частных производных в квадратной области  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 \leq y \leq 1$ . Введем сетку, т. е. будем рассматривать не  $u(x, y)$ , а  $u(i\Delta x, j\Delta y)$ . Положение точек (узлов сетки) внутри области определяется значениями величин  $i, j$ ,

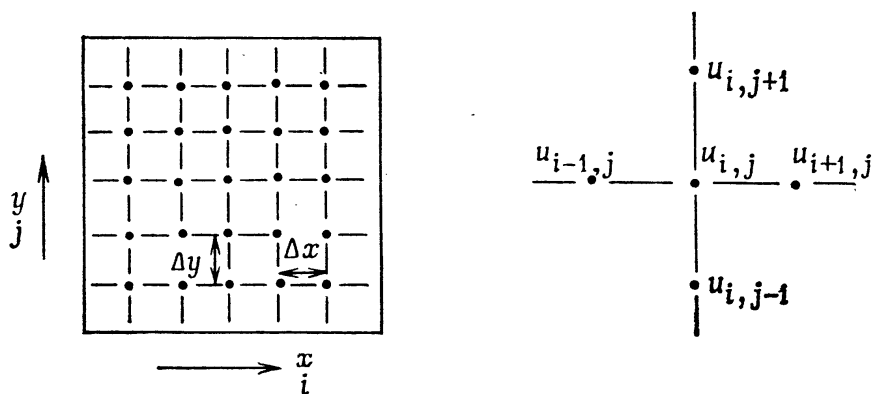


Рис.3.3. Пример конечно-разностной схемы.

поэтому разностные уравнения обычно записываются для произвольного узла  $i, j$ , причем используются значения функции  $u$  в этом и соседних узлах сетки. Конечно-разностная сетка и используемые обозначения показаны на рис. 3.3.

Пусть  $u_{i,j} = u(x_0, y_0)$ , тогда

$$u_{i+1,j} = u(x_0 + \Delta x, y_0), \quad u_{i-1,j} = u(x_0 - \Delta x, y_0),$$

$$u_{i,j+1} = u(x_0, y_0 + \Delta y), \quad u_{i,j-1} = u(x_0, y_0 - \Delta y).$$

(3.15)

При решении маршевых задач номер узла сетки по маршевой координате обычно обозначается верхним индексом (например,  $u_j^{n+1}$ ).

Для каждого уравнения в частных производных существует множество его конечно-разностных аналогов, из которых обычно нельзя выбрать наилучший со всех точек зрения. В первую очередь при использовании метода конечных разностей надо стремиться к правильной аппроксимаций уравнений поставленной задачи, а во вторую очередь выбрать «наилучшую» схему, т. е. оптимизировать ее, учитывая ее точность, экономичность, удобство программной реализации на ЭВМ и т. д.

Если функция  $u(x, y)$  непрерывна, а  $\Delta x$  — достаточно мало, но конечно, то значение разности  $[u(x_0 + \Delta x, y_0) - u(x_0, y_0)]/\Delta x$  будет близко к значению производной  $\partial u/\partial x$ .

Обозначив для краткости значение функции в узле  $(i, j)$  разностной сетки индексом  $i, j$ , получим

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x),$$

(3.16)

где разность  $\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}$ , очевидно, является конечно-разностным представлением производной  $\partial u/\partial x$ . Погрешность аппроксимации — разность значений частной производной и ее конечно-разностного аналога, здесь охарактеризована стандартным математическим обозначением порядка малой величины  $O$ , где  $O(\Delta x)$  имеет точный математический смысл. Представление погрешности аппроксимации в виде  $O(\Delta x)$  обозначает, что погрешность аппроксимации по абсолютной величине не превосходит  $K|\Delta x|$  при  $\Delta x \rightarrow 0$  (для достаточно малых  $\Delta x$ ), причем  $K > 0$  — вещественная константа.

Можно построить бесконечно много конечно-разностных

аппроксимаций производной  $\partial u / \partial x$ .

Например, аппроксимация разностями вперед (или их называют правыми разностями):

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x).$$

(3.17)

Или аппроксимация этой производной с использованием разностей назад (их называют также «левыми» разностями)

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

(3.18)

или аппроксимация производной центральными разностями

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2.$$

(3.19)

Легко найти конечно-разностную аппроксимацию производной второго порядка

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2.$$

(3.20)

Отметим, что приведенные примеры отнюдь не исчерпывают всех возможных конечно-разностных аппроксимаций производных первого и второго порядков.

Для сокращения записи удобно ввести разностные операторы. Будем называть разностным оператором первого порядка вперед по переменной  $x$  выражение

$$\Delta_x u = u_{i+1,j} - u_{i,j}.$$

(3.21)

Введем также разностный оператор первого порядка назад

$$\nabla_x u = u_{i,j} - u_{i-1,j}.$$

(3.22)

Тогда конечно-разностную аппроксимацию вперед частной производной первого порядка можно записать в виде

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{\Delta_x u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x).$$

(3.23)

Аналогично записывается и конечно-разностная аппроксимация производной  $\partial u / \partial y$ :

Часто используют центральные разностные операторы

$$\bar{\delta}_x u_{i,j} = u_{i+1,j} - u_{i-1,j},$$

$$\delta_x u_{i,j} = u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j},$$

$$\delta_x^2 u_{i,j} = \delta_x(\delta_x u_{i,j}) = u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}$$

(3.24)

и оператор осреднения

$$\mu_x u_{i,j} = \frac{u_{i+1/2,j} + u_{i-1/2,j}}{2}.$$

Используя центральные разностные операторы, конечно-разностный аналог первой производной можно записать в виде

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2 = \frac{\bar{\delta}_x u_{i,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2.$$

(3.25)

Аналогично аппроксимируется центральными разностями и вторая производная:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 = \frac{\delta_x^2 u_{i,j}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2.$$

(3.26)

**Погрешность аппроксимации.** Анализ погрешности аппроксимации начнем с уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

(3.27)

Используя разности вперед для аппроксимации производной по времени и центральные разности для аппроксимации второй производной, получим аппроксимацию для уравнения теплопроводности

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}.$$

(3.28)

Погрешность конечно-разностной аппроксимации дифференциального уравнения определяется разложением в ряд Тейлора в окрестности одной и той же точки (в рассмотренном примере точки  $(n, j)$ ).

$$\underbrace{\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_I = \underbrace{\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \alpha \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}}_{II} + \underbrace{\left[ -\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_{n,j} \frac{\Delta t}{2} + \alpha \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_{n,j} \frac{(\Delta x)^2}{12} + \dots \right]}_{III}.$$

(3.29)

Здесь цифрами I, II, III обозначены исходное уравнение в частных производных, его конечно-разностный аналог и погрешность аппроксимации.

Конечно-разностный аналог уравнения (3.28) будем называть *простой явной схемой* решения уравнения теплопроводности. Разностная схема называется *явной*, если в каждое алгебраическое уравнение входит лишь одно неизвестное, которое с помощью этого уравнения может быть выражено через уже известные величины. Так как параболическое уравнение теплопроводности решает маршевую задачу, то начальное распределение  $u$  должно быть задано, поэтому значения функции  $u$  на  $n$ -м временном шаге можно считать известными. Если для аппроксимации второй производной в уравнении теплопроводности использовать значения функции  $u$  на  $(n+1)$ -м временном шаге, то в каждое разностное уравнение войдут три неизвестных. Такая схема называется *неявной*, так как одновременно приходится решать несколько алгебраических уравнений.

Заключенное в квадратные скобки и обозначенное цифрой III слагаемое в правой части соотношения (3.29) называется *погрешностью аппроксимации* уравнения теплопроводности и определяется как разность между исходным уравнением в частных производных и его конечно-разностным аналогом. Отметим, что при вычислении погрешности использованы лишь первые члены ряда Тейлора. *Порядок* погрешности аппроксимации в этом случае равен  $O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ , который часто для краткости записывают в виде  $O[\Delta t, (\Delta x)^2]$ . Применяя численные методы, мы решаем лишь разностные уравнения и надеемся, что погрешность аппроксимации мала. Может быть, на первый взгляд такой подход не вызывает сомнений, но если задуматься, то сразу возникает ряд вопросов. Например, где гарантия, что, решая разностные уравнения маршевым методом, мы получим значения, достаточно близкие к решению исходного уравнения в частных производных? На этот вопрос можно

ответить утвердительно, лишь если разностная схема удовлетворяет условиям *согласованности* и *устойчивости*.

### **Согласованность и устойчивость разностных схем.**

Согласованной называется разностная схема, аппроксимирующая уравнение в частных производных, если она удовлетворяет следующим условиям. Стремление к нулю погрешности аппроксимации при измельчении сетки. Это условие безусловно выполняется, если погрешность аппроксимации имеет порядок  $O(\Delta t)$ ,  $O(\Delta x)$  и т.д. Если порядок погрешности аппроксимации равен, например,  $O(\Delta t / \Delta x)$ , то схема будет согласованной лишь в том случае, когда измельчение сетки проводится в соответствии с условием  $\Delta t / \Delta x \rightarrow 0$ .

В качестве примера рассмотрим схему Дюфорта-Франкела для уравнения теплопроводности

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^n - u_j^{n+1} - u_j^{n-1} + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}.$$

(3.30)

Главный член погрешности аппроксимации этой схемы, вычисленный с использованием ряда Тейлора, равен

$$\frac{\alpha}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_{n,j} (\Delta x)^2 - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_{n,j} \left( \frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 - \frac{1}{6} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_{n,j} (\Delta t)^2.$$

(3.31)

Схема удовлетворяет условию согласованности, если

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} (\Delta t / \Delta x) = 0.$$

(3.32)

Понятие счетной устойчивости строго применимо лишь при решении маршевых задач. Разностная схема называется *устойчивой*, если на каждом шаге по маршевой координате любая ошибка (погрешность округления, погрешность аппроксимации, просто ошибка) не возрастает при переходе от одного шага к другому. Обычно для достижения устойчивости разностной схемы требуется намного больше времени и энергии, чем для достижения ее согласованности. Проверить условие согласованности разностной схемы нетрудно, кроме того, обычно оно выполняется автоматически, т. е. вытекает из использованного метода построения разностной схемы. Устойчивость - свойство более тонкое, и обычно приходится

хорошо потрудиться для аналитического доказательства устойчивости разностной схемы. Методы анализа устойчивости разностных схем мы подробно опишем далее. Большинство этих методов применимо лишь к линейным уравнениям в частных производных, однако полученные для линейных уравнений результаты позволяют анализировать устойчивость численного решения нелинейных уравнений.

Иногда на неустойчивость схемы указывает физическая нереальность следующих из нее результатов, т. е. неустойчивая разностная схема неправильно описывает физические процессы. Покажем это на примере явной схемы для уравнения теплопроводности (3.28). Введя параметр  $r = \alpha \Delta t / (\Delta x)^2$ , преобразуем это уравнение к виду

$$u_j^{n+1} = r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + (1 - 2r)u_j^n. \quad (3.33)$$

Пусть в момент времени  $t$   $u_{j+1}^n = u_{j-1}^n = 100^\circ \text{C}$ , а  $u_j^n = 0^\circ \text{C}$  (рис. 3.4). Если  $r > 1/2$ , то температура в узле  $j$  на  $(n+1)$ -м шаге по времени будет выше температуры в соседних узлах в момент времени  $n$ , но это физически невозможно, так как тепло передается от более теплого тела к более холодному, а не наоборот. С физической точки зрения температура в узле  $j$  не может на  $(n+1)$ -м шаге по времени превышать  $100^\circ \text{C}$ , а из уравнения (3.33) следует, что при  $r = 1$  эта температура равна  $200^\circ \text{C}$ .

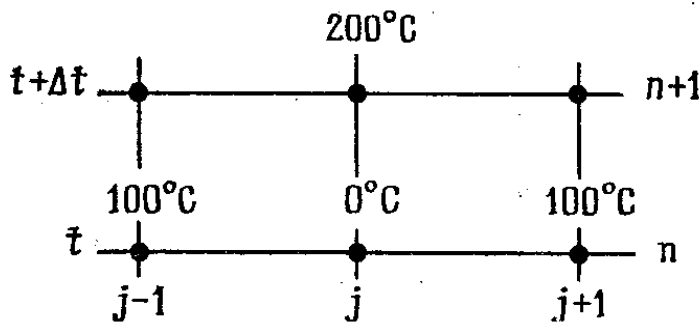


Рис. 3.4. Противоречащее законам физики изменение температуры при  $r = 1$ .

**Сходимость решения маршевых задач.** Выполнения условий устойчивости и согласованности достаточно для сходимости разностной схемы. Под *сходимостью* в данном случае понимается стремление решения конечно-разностного аналога уравнения в частных производных к решению исходного уравнения (для одинаковых начальных и граничных условий) при измельчении сетки.

Для линейных уравнений в частных производных доказана теорема Лакса, которую мы приведем без доказательства: *необходимым и достаточным условием сходимости разностной схемы для решения корректно поставленной задачи с начальными данными для линейного уравнения в частных производных является выполнение условий согласованности и устойчивости.*

Необходимо отметить, что справедливость этой теоремы для нелинейных уравнений в частных производных *не доказана.*

**Погрешность округления.** Любое численно полученное решение, даже так называемое точное аналитическое решение уравнения в частных производных, зависит от ошибок округления, связанных с конечным числом знаков, используемых при арифметических операциях. Возникающая при этом погрешность называется *погрешностью округления*. Она может оказать существенное влияние на решение конечно-разностных уравнений, так как получение этого решения обычно связано с выполнением большого числа однотипных арифметических операций. В ряде случаев погрешность округления пропорциональна числу узлов разностной сетки, поэтому измельчение сетки, снижая погрешность аппроксимации, может увеличивать погрешность округления.

Напомним, что погрешностью аппроксимации называется погрешность, возникающая при замене уравнения в частных производных его конечно-разностным аналогом. Она равна разности точных (без учета погрешностей округления) решений исходного дифференциального уравнения и его конечно-разностного аналога. Следовательно, погрешность полученного на ЭВМ решения уравнения в частных производных равна сумме погрешностей аппроксимации и округления. Точность численного решения уравнения в частных производных определяется погрешностью аппроксимации не только самого уравнения, но и граничных условий.

**Некоторые замечания.** В этом разделе мы обсудим две разные проблемы. Первая из них относится к форме записи уравнений в частных производных. Уравнение в частных производных записано в «дивергентной форме», или, что эквивалентно, в «консервативной форме», если коэффициенты при производных являются либо константами, либо функциями, производные которых в уравнение не входят. Обычно уравнения в частных производных, описывающие законы сохранения, записываются в дивергентной форме тогда, когда в них явно входит дивергенция той величины, для которой этот закон формулируется.

В качестве примера рассмотрим одномерный процесс



распространения тепла в среде с зависящими от координаты плотностью  $\rho$ , удельной теплоемкостью  $c$  и коэффициентом теплопроводности  $k$ . Запишем это уравнение в дивергентной форме

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.34)$$

и в недивергентной форме

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (3.35)$$

Правая часть уравнения (3.34) равна дивергенции вектора теплового потока в одномерном случае. При использовании разностных схем, построенных для записанных в недивергентной форме уравнений в частных производных, часто сложно решать уравнения с разрывными коэффициентами, например, проводить расчет течений с ударными волнами.

Второй вопрос, который мы рассмотрим в этом разделе, связан с понятием *консервативности конечно-разностной схемы*. Большинство из используемых вычислительных методов, посвящено решению уравнений, являющихся следствием физических законов сохранения, например законов сохранения массы, импульса и энергии. Уравнения в частных производных описывают эти законы сохранения в точке. Конечно-разностная схема обеспечивает близкую аппроксимацию уравнений в частных производных в небольшой области, содержащей несколько узлов разностной сетки. Если конечно-разностная схема даст близкую аппроксимацию уравнения в частных производных в окрестности каждого узла разностной сетки, то можно ожидать, что законы сохранения будут приближенно выполняться и для большего контрольного объема, содержащего довольно большое число узлов разностной сетки. *Консервативной* схемой называется разностная схема, обеспечивающая точное выполнение законов сохранения (исключая погрешности округления) на любой сетке в конечной области, содержащей произвольное число узлов разностной сетки. Для решения некоторых задач можно использовать *только* консервативные разностные схемы.

Обычно для построения консервативных конечно-разностных схем используют записанные в дивергентной форме уравнения в частных производных. Если записать уравнение в дивергентной форме не удастся, то для построения консервативной конечно-разностной схемы можно воспользоваться *методом контрольного объема*. Построенная этим методом конечно-разностная схема

оказывается, как правило, консервативной.

На практике часто используют неконсервативные конечно-разностные схемы, которые в ряде случаев оказываются точнее консервативных. Вопрос о том, нужно ли обеспечивать очень точное выполнение законов сохранения в конечной области, зависит от поставленной задачи. Все согласованные конечно-разностные схемы независимо от того, консервативны они или нет, на достаточно мелкой сетке позволяют в большинстве случаев достичь требуемой точности решения уравнения.

### **Различные методы построения конечно-разностных схем.**

Для заданного уравнения в частных производных и данной конечно-разностной сетки конечно-разностный аналог этого уравнения может быть построен разными методами. Укажем на некоторые из них:

- разложение функций в ряд Тейлора;
- интерполяция функций полиномами;
- метод контрольного объема.

Иногда все эти методы приводят к одному и тому же конечно-разностному аналогу исходного уравнения. Сначала проанализируем подробно метод разложения функций в ряд Тейлора, иногда привлекая для аппроксимации граничных условий интерполяционные полиномы.

Пусть мы хотим построить конечно-разностную аппроксимацию производной  $\partial u / \partial x|_{i,j}$ , имеющую погрешность аппроксимации  $O[(\Delta x)^2]$  используя лишь значения  $u_{i-2,j}, u_{i-1,j}, u_{i,j}$ . Проще всего для этого представить  $u_{i-2,j}$  и  $u_{i-1,j}$  с помощью ряда Тейлора для функции  $u$  в точке  $(i,j)$  и попытаться выразить из полученных соотношений производную  $\partial u / \partial x|_{i,j}$  с требуемой точностью:

$$u_{i-2,j} = u_{i,j} + \frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{i,j} (-2\Delta x) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\bigg|_{i,j} \frac{(2\Delta x)^2}{2!} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\bigg|_{i,j} \frac{(-2\Delta x)^3}{3!} + \dots$$

,

(3.36)

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} + \frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{i,j} (-\Delta x) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\bigg|_{i,j} \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\bigg|_{i,j} \frac{(-\Delta x)^3}{3!} + \dots$$

Требуемую конечно-разностную аппроксимацию удастся часто

получить путем наблюдения или простой подстановкой. Чтобы произвести подстановку, выразим производную  $\frac{\partial u}{\partial x}|_{i,j}$  из соотношения (3.36); тогда

$$\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-2,j}}{2\Delta x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\bigg|_{i,j} \Delta x + O(\Delta x)^2.$$

(3.37)

Порядок аппроксимации  $O(\Delta x)$  определяется членом  $(\partial^2 u / \partial x^2) / \Delta x$ , содержащим вторую производную. Подставляя  $(\partial^2 u / \partial x^2)$  из соотношения (3.36), получаем требуемую аппроксимацию производной  $\partial u / \partial x$

$$\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{i,j} = \frac{u_{i-2,j} - 4u_{i-1,j} + 3u_{i,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2,$$

(3.38)

совпадающую с полученной ранее.

Мы показали, как, используя разложение функций в ряд Тейлора, строить конечно-разностные аналоги отдельной производной. Но нас в основном интересует построение конечно-разностного аналога всего заданного уравнения в частных производных, обеспечивающих его аппроксимацию во всех точках заданной области. Поэтому все члены уравнения надо раскладывать в ряд Тейлора в одной и той же точке. При таком подходе к построению разностной схемы погрешность аппроксимации уравнения в частных производных равна сумме погрешностей аппроксимации его членов.

Явная разностная схема для уравнения теплопроводности (рис.3.5) имеет вид

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n).$$

(3.39)

Полностью неявная разностная схема для уравнения теплопроводности имеет вид

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}.$$

(3.40)

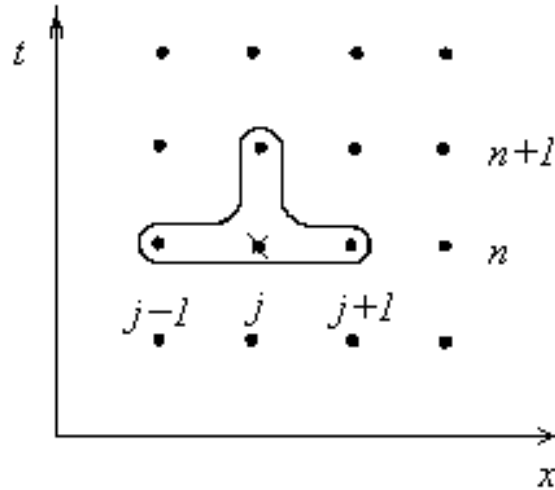


Рис.3.5. Шаблон, используемый при решении уравнения теплопроводности по явной схеме. Крестиком указана точка, в которой проводится разложение в ряд Тейлора.

Погрешность аппроксимации схемы равна  $O[\Delta t, (\Delta x)^2]$ .

Используемый шаблон и точка  $(n+1, j)$ , в которой удобнее всего проводить разложение функции в ряд Тейлора, показаны на рис. 3.6.

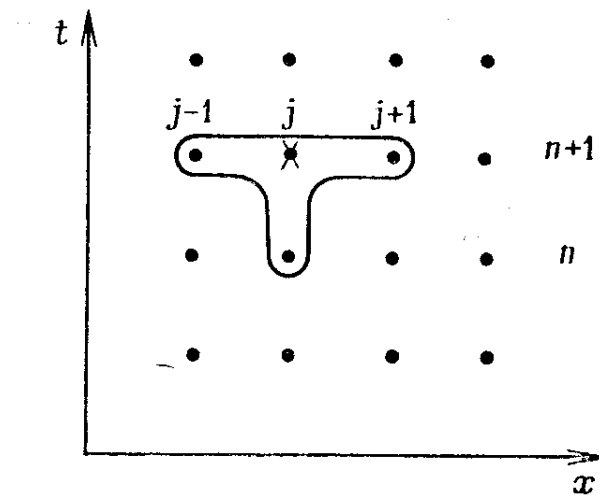


Рис.3.6. Шаблон, используемый при решении уравнения теплопроводности по неявной схеме. Крестиком указана точка, в которой проводится разложение в ряд Тейлора.

**Пример.** Схема Кранка-Николсона для уравнения теплопроводности имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \\ = \frac{\alpha}{2(\Delta x)^2} [u_{j+1}^{n+1} + u_{j+1}^n - 2(u_j^{n+1} + u_j^n) + u_{j-1}^{n+1} + u_{j-1}^n] \end{aligned} \quad (3.41)$$

с погрешностью аппроксимации схемы  $O[(\Delta t)^2, (\Delta x)^2]$ . Используемый шаблон и точка  $(n + 1/2, j)$ , в которой удобнее всего проводить разложение решения в ряд Тейлора, показаны на рис. 3.7.

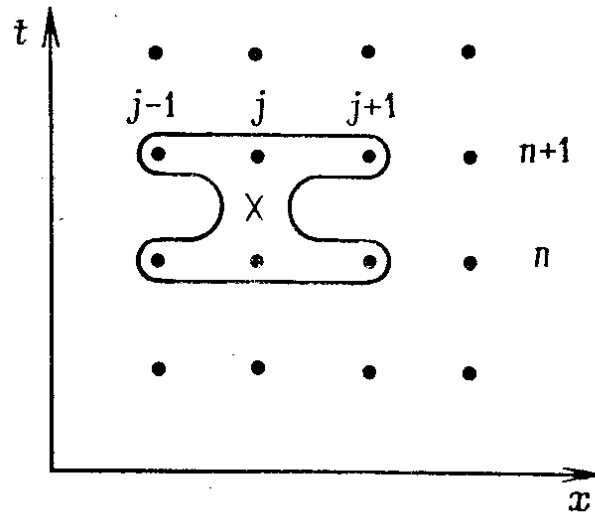


Рис.3.7. Шаблон, используемый при решении уравнения теплопроводности по схеме Кранка - Николсона. Крестиком указана точка, в которой проводится разложение в ряд Тейлора.

Интересно отметить, что погрешность конечно-разностной аппроксимации всего уравнения в частных производных (но не его отдельных членов) не зависит от выбора точки, в которой проводится разложение решения в ряд Тейлора.

**Интерполяция функций полиномами.** Интерполяция полиномами имеет много приложений в вычислительной гидродинамике и теплопередаче. Эту технику можно использовать для построения конечно-разностного аналога уравнений в частных производных, однако, обычно ее применяют лишь для записи граничных условий или получения более подробной информации вблизи границ при известном численном решении задачи. Рассмотрим

характерный пример.

Построим конечно-разностные аналоги всех входящих в уравнение производных, предполагая, что решение этого уравнения локально аппроксимируется полиномом. Значения полинома в прилегающих к узлу  $(i, j)$  узлах разностной сетки должны совпадать с решением уравнения. Достаточное для точного определения коэффициентов полинома число узлов разностной сетки определяется степенью полинома. Продифференцировав интерполяционный полином, можно найти требуемую аппроксимацию входящих в уравнение производных. Рассмотрим уравнение Лапласа, описывающее стационарное двумерное распределение температуры в твердом теле:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0.$$

(3.42)

Предположим, что в окрестности узла  $(i, j)$  зависимость температуры от  $x$  и  $y$  описывается полиномами второго порядка. Например, зафиксировав  $y$ , будем считать, что изменение температуры по  $x$  вблизи узла  $(i, j)$  описывается полиномом

$$T(x, y_0) = a + bx + cx^2.$$

(3.43)

Для удобства положим, что  $x=0$  в точке  $(i, j)$ , а  $\Delta x = \text{const}$ . Очевидно,

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{i,j} = b, \quad \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j} = 2c.$$

(3.44)

Коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$  можно определить, зная температуру в конкретных узлах сетки и шаг сетки  $\Delta x$ . Для этого, сначала надо выбрать используемые при интерполяции средние узлы разностной сетки, т.е. задать геометрическое расположение точек, определяющих разностный шаблон и характер разностной аппроксимации производных: вперед, назад или центрально-разностная аппроксимация. Выбрав узлы  $(i-1, j)$ ,  $(i, j)$  и  $(i+1, j)$ , получим

$$T(i, j) = a,$$

$$T(i+1, j) = a + b\Delta x + c(\Delta x)^2,$$

$$T(i-1, j) = a - b\Delta x + c(\Delta x)^2.$$

(3.45)

Решив эти уравнения, найдем

$$b = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2\Delta x},$$

$$c = \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{2(\Delta x)^2}.$$

Следовательно,

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{2(\Delta x)^2}.$$

(3.46)

Полученное выражение является точным, если зависимость температуры от  $x$  действительно описывается полиномом второго порядка. В общем случае мы лишь предполагаем, что полином второго порядка является хорошей аппроксимацией решения. Погрешность аппроксимации производной (3.46) можно определить подстановкой разложений в ряд Тейлора в окрестности точки  $(i, j)$  для  $T_{i+1,j}$ ,  $T_{i-1,j}$ . Она равна  $O[(\Delta x)^2]$ , причем в выражение для погрешности аппроксимации входят лишь производные температуры четвертого и более высоких порядков, которые равны нулю, если зависимость температуры от  $x$  описывается полиномом второго порядка.

Аналогично можно построить конечно-разностную аппроксимацию производной  $(\partial^2 T / \partial y^2)$ . Рассмотренный пример показывает, что при использовании интерполяции полиномами приходится произвольно выбирать ряд параметров, влияющих на погрешность аппроксимации уравнений с частными производными и вид разностной схемы, в том числе и используемый шаблон. Следовательно, этот метод не обладает какими-либо особыми преимуществами, гарантирующими, например, оптимальность или устойчивость разностной схемы (для маршевой задачи).

**Метод контрольного объема.** Метод контрольного объема принципиально отличается от уже рассмотренных методов построения разностных схем для уравнений в частных производных. При использовании метода контрольных объемов разностная схема строится на основе физических законов сохранения, следствием которых является рассматриваемое уравнение в частных производных. Сначала этот закон сохранения формулируется словесно для некоторого контрольного объема, окружающего узел разностной сетки, а потом записывается математически с учетом

дискретной сетки. На практике метод контрольных объемов позволяет обычно строить более точные вблизи границ разностные схемы, чем другие методы. Возможно, это связано с тем, что этот метод сохраняет дискретную природу решения задачи на всех этапах построения разностной схемы.

В качестве примера рассмотрим двумерный установившийся процесс распространения тепла в твердом теле с постоянным коэффициентом теплопроводности. Как известно, распределение температуры удовлетворяет в этом случае уравнению Лапласа (3.42).

Решение задачи начнем с построения разностной сетки. Сначала расположим узлы сетки на границе расчетной области, так как температура границы входит в граничное условие. Затем разобьем всю область решения на контрольные объемы, каждый из которых содержит лишь один узел разностной сетки. Границы контрольных объемов удобнее всего проводить посередине между смежными узлами, хотя при этом узлы разностной сетки окажутся в центрах контрольных объемов лишь в случае равномерной сетки, т. е. при  $\Delta x = c_1, \Delta y = c_2$ .

Рассмотрим сначала контрольный объем, не прилежащий к границе, например, объем  $A$  на рис. 3.8. Так как рассматривается установившийся процесс, то суммарный поток тепла через границу контрольного объема  $A$  должен равняться нулю. Именно из этого закона сохранения выводится уравнение Лапласа для температуры, описывающее распределение температуры внутри области. Этот закон можно вывести также из исходного уравнения в частных производных, воспользовавшись теоремой Гаусса — Остроградского. По закону Фурье тепловой поток пропорционален градиенту температуры:  $\vec{q} = -k\vec{\nabla}T$ . Следовательно, если  $k$  — константа, то уравнение (3.42) можно переписать в виде

$$-\vec{\nabla} \cdot \vec{q} = \vec{\nabla} \cdot (k\vec{\nabla}T) = 0.$$

(3.47)



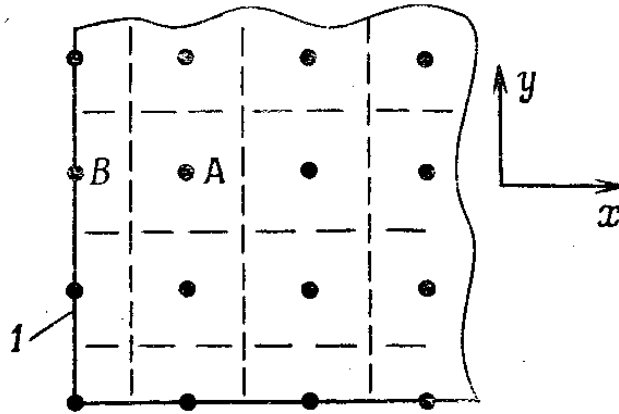


Рис. 3.8. Конечно-разностная сетка, используемая при решении уравнений методом контрольного объема;  $T_\infty, h$  заданы на границе 1.

Интегрируя это уравнение по контрольному объему и используя теорему о дивергенции Гаусса - Остроградского, получим

$$\iiint_R \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) dR = \iint_S (k \vec{\nabla} T) \cdot \vec{n} dS = 0. \quad (3.48)$$

Интеграл в правой части описывает суммарный поток тепла через границу контрольного объема. Представляя этот интеграл в виде суммы потоков через все границы контрольного объема с центром в узле  $(i, j)$ , получим

$$-k\Delta y \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{i-1/2,j} + k\Delta y \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{i+1/2,j} - k\Delta x \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{i,j-1/2} + k\Delta x \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{i,j+1/2} = 0. \quad (3.49)$$

Здесь  $1/2$  в нижнем индексе указывает на то, что соответствующая величина вычисляется в центре грани объема (посередине между узлами сетки). Законы сохранения энергии выполняются точно, если на границах для производных выбраны подходящие средние значения. Используя центральные разности, получаем

$$-k\Delta y \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\Delta x} + k\Delta y \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\Delta x} - k\Delta x \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\Delta y} + k\Delta x \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta y} = 0$$

и, разделив это уравнение на  $k\Delta x\Delta y$ , находим

$$\frac{T_{i-1,j} - 2T_{i,j} + T_{i+1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i,j-1} - 2T_{i,j} + T_{i,j+1}}{(\Delta y)^2} = 0. \quad (3.50)$$

В последнем уравнении каждое из двух слагаемых совпадает с аппроксимацией вторых производных  $\partial^2 T / \partial x^2$  и  $\partial^2 T / \partial y^2$ , полученной ранее при помощи рядов Тейлора.

Рассмотрим теперь прилегающий к границе контрольный объем, обозначенный на рис. 3.8 буквой  $B$ . Пусть граничное условие для исходной (не дискретизированной) задачи имеет вид  $h(T_\infty - T_{i,j}) = -k \partial T / \partial x|_{i,j}$ , где  $(i,j)$  - точка на физической границе области, соответствующей границе контрольного объема  $B$ . Если бы применили метод разложения в ряд Тейлора для задания граничных условий, то нашим следующим шагом было бы построение конечно-разностного аналога производной  $\partial T / \partial x|_{i,j}$ . Аппроксимируя производные односторонними разностями вперед, граничное условие получаем в виде

$$h(T_\infty - T_{i,j}) = \frac{k}{\Delta x} (T_{i,j} - T_{i+1,j}).$$

Следует заметить, что при применении метода контрольного объема необходимо обеспечить выполнение закона сохранения в прилегающем к границе объеме. Приравняем нулю суммарный поток тепла через границу:

$$h\Delta y (T_\infty - T_{i,j}) + k\Delta y \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{i+1/2,j} + k \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial T}{\partial y}\bigg|_{i,j+1/2} - k \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial T}{\partial y}\bigg|_{i,j-1/2} = 0$$

Применяя для аппроксимации производных центральные разности, получаем

$$h\Delta y (T_\infty - T_{i,j}) + k\Delta y \frac{(T_{i+1,j} - T_{i,j})}{\Delta x} + k \frac{\Delta x}{2} \frac{(T_{i,j+1} - T_{i,j})}{\Delta y} + k \frac{\Delta x}{2} \frac{(T_{i,j-1} - T_{i,j})}{\Delta y} = 0$$

и, разделив на  $k$ , приведем это соотношение к виду

$$\frac{h\Delta y}{k} T_\infty + \frac{\Delta y}{\Delta x} T_{i+1,j} + \frac{\Delta x}{2\Delta y} (T_{i,j+1} + T_{i,j-1}) - \left( \frac{h\Delta y}{k} + \frac{\Delta y}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{\Delta y} \right) T_{i,j} = 0.$$

Эта запись граничного условия несколько отличается от записи граничного условия, получаемого при формальной аппроксимации

производной  $\partial T / \partial x|_{i,j}$ , с помощью рядов Тейлора.

Сравнивая метод контрольного объема и метод построения разностных схем, основанный на разложении решения в ряд Тейлора, можно заметить, что последний позволяет построить конечно-разностную аппроксимацию всех входящих в дифференциальное уравнение производных путем суммирования конечно-разностных аналогов входящих в него производных. В противоположность ему метод контрольного объема, основанный на применении физических законов сохранения, дает возможность построить лишь конечно-разностный аналог всего уравнения в частных производных, однако в принципе с его помощью нельзя построить конечно-разностный аналог какой-то отдельно взятой производной, например производной  $du/dx$ . Отличительной особенностью метода контрольного объема является то, что он обеспечивает «баланс» физической величины в окрестности узла разностной сетки. Метод контрольных объемов учитывает дискретный характер решения поставленной задачи, поэтому он обеспечивает выполнение законов сохранения в конечной области, а не только в точке при стремлении шага сетки к нулю. Конечно-разностные схемы, построенные методом контрольных объемов, почти всегда консервативны.

**Применение нерегулярных сеток.** Наиболее удобными для проведения расчетов являются регулярные сетки с постоянными шагами  $\Delta x, \Delta y$  во всей расчетной области. Однако на практике такие сетки часто использовать не удастся либо из-за того, что граница расчетной области не совпадает с узлами регулярной сетки, либо из-за необходимости сгущать сетку в некоторых подобластях для достижения требуемой точности решения задачи. При решении физических проблем нерегулярные сетки приходится использовать довольно часто, поэтому в вычислительной гидродинамике и теплообмене их применению уделяется довольно большое внимание. На практике, прежде чем вводить нерегулярную сетку, имеет смысл попробовать применить преобразование координат, позволяющее согласовать форму границы и регулярную сетку.

Так при расчете притока нефти или газа из пласта к скважине, при тепловом или ином воздействии вблизи скважины необходимо использовать сетку с мелким шагом по координате, в то же время поскольку характерные размеры задач много больше размеров скважины, вдали от нее представляется разумным выбор сетки с более крупным шагом.

**Пример.** Для радиальной задачи о фильтрации нефти или газа из однородного пласта к скважине, обычно, размеры скважины  $r_0$  много меньше характерных размеров задачи  $L$  и, как правило, вблизи нее температура среды достигает максимального значения и имеет следующее характерное поведение  $T \approx \ln(1/r)$ . Поэтому, для того, чтобы обеспечить необходимую точность определения распределения температуры и давления вокруг скважины и, в тоже время, не измельчить пространственные шаги интегрирования вокруг нее, расчетную область разделяют на две части: микрообласть вокруг скважины ( $r_0 \leq r \leq r_*$ ) и макрообласть ( $r_* \leq r$ ), где  $r_*$  - граница раздела областей. При этом в микрообласти вводится новая растягивающая

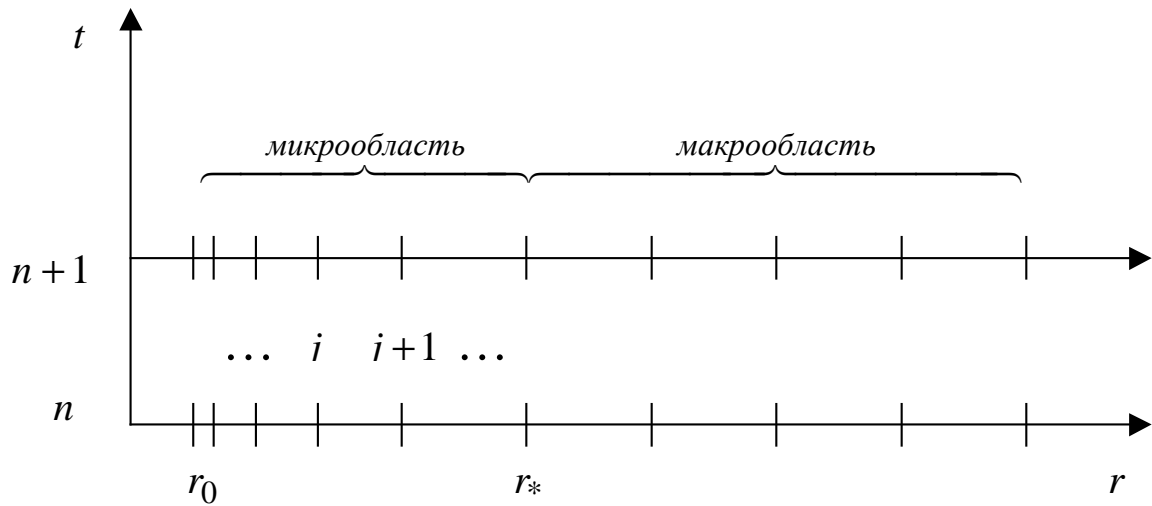


Рис.3.10. Иллюстрация неравномерной сетки.

переменная  $\xi(r) = \ln \frac{r}{r_0} \ln^{-1} \frac{r_*}{r_0}$ . Откуда следует, что

$$\frac{\partial}{\partial r} = f_\xi \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) = f_\xi^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}, \quad \text{где } f_\xi = \left( r \ln \frac{r_*}{r_0} \right)^{-1}.$$

Нерегулярные или переменные сетки можно строить различными методами, например, можно применить преобразование координат, переводящее неравномерную сетку в физических координатах в равномерную, при этом изменяется вид уравнения в частных производных.

### 3.4. УСТОЙЧИВОСТЬ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

**Общие замечания.** Не любая согласованная конечно-разностная схема обеспечивает сходимость решения конечно-разностных уравнений к решению уравнения в частных производных. Такую сходимость решения обеспечивает лишь устойчивая разностная схема. Ниже подробно рассмотрим теорию устойчивости конечно-разностных схем.

Рассмотрим маршевую задачу. Пусть на  $n$ -м шаге по времени начальные значения известны, а на  $(n+1)$ -м шаге по времени значения этих величин надо определить. Теория устойчивости разностных схем изучает способ, которым разностный оператор преобразует начальные значения величин в их значения на следующем шаге по времени.

Начнем изучение устойчивости конечно-разностных схем с анализа простой явной схемы для уравнения теплопроводности

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n).$$

(3.51)

Решая это уравнение относительно  $u_j^{n+1}$ , получим

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n).$$

(3.52)

Обозначим буквой  $D$  точное решение этого разностного уравнения, т. е. решение, которое мы получили бы на ЭВМ при отсутствии ошибок округления, а буквой  $N$ —решение, полученное на реальной ЭВМ. Если  $A$  — аналитическое решение исходного уравнения в частных производных, то можно записать:

- погрешность аппроксимации =  $A - D$ ,
- погрешность округления =  $N - D$ .

Устойчивость конечно-разностной схемы определяется изменением погрешности в процессе вычисления. О'Брайен и др. [O'Brien et al., 1950] предложили следующую классификацию устойчивости разностных схем:

1. Если полная погрешность округления *растет (не растет)*, то разностная схема называется *сильно неустойчивой (устойчивой)*.
2. Если отдельная погрешность округления *растет (не растет)*, то разностная схема называется *слабо неустойчивой (устойчивой)*.

Обычно изучают лишь слабую устойчивость, так как для ее анализа можно использовать метод *разложения решения в ряд Фурье*, называемый в вычислительной математике *методом Неймана*. При этом предполагают, что если выполнено условие слабой устойчивости, то выполнено и условие сильной устойчивости.

**Метод Фурье или метод Неймана.** Рассмотрим разностное уравнение (3.52). Если  $\varepsilon$  - погрешность округления, то численное решение разностного уравнения можно представить в виде

$$N = D + \varepsilon. \quad (3.53)$$

Так как численное  $N$  и точное решение  $D$  должны удовлетворять разностному уравнению, то, и погрешность  $\varepsilon$  удовлетворяет тому же уравнению:

$$\frac{\varepsilon_j^{n+1} - \varepsilon_j^n}{\Delta t} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} (\varepsilon_{j+1}^n - 2\varepsilon_j^n + \varepsilon_{j-1}^n). \quad (3.54)$$

Так как точное решение разностного уравнения  $D$  и погрешность округления  $\varepsilon$  удовлетворяют одному и тому же уравнению, то и растут по времени они одинаково. Если разностная схема устойчива, то рост любого возмущения, вводимого на  $n$ -м шаге по времени, ограничен; для неустойчивых конечно-разностных схем возмущение возрастает.

Рассмотрим распределение погрешности на сетке в любой момент времени. Для удобства выберем момент времени  $t = 0$ .

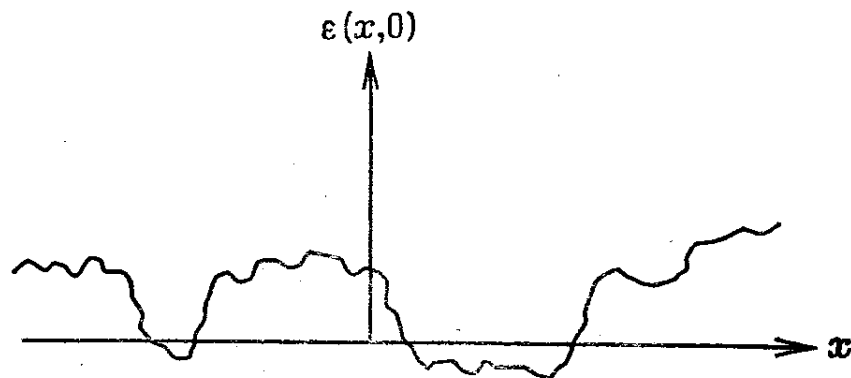


Рис. 3.11. Начальное распределение погрешности.

Схематически это распределение погрешности показано на рис. 3.11. Предположим, что погрешность  $\varepsilon(x,t)$  можно представить в виде суммы ряда Фурье

$$\varepsilon(x,t) = \sum_m b_m(t) e^{ik_m x}, \quad (3.55)$$

причем период основной частоты ( $m = 1$ ) равен  $2L$ . Нас интересует

решение в интервале длины  $L$ , поэтому волновые числа

$$k_m = m\pi/L, \quad m = 0, 1, 2, \dots, M,$$

где  $M$  — число отрезков длины  $\Delta x$ , помещающихся в отрезке длины  $L$ . Например, если интервал длины  $2L$  разбит на отрезки пятью узлами, то  $M = 2$ , а в сумму ряда входят лишь гармоники

$$f_m = k_m/2\pi = m/2L,$$

$$f_0 = 0, \quad m = 0, \quad f_1 = 1/2L, \quad m = 1, \quad f_2 = 1/L, \quad m = 2.$$

Напомним, что частота указывает на число волн, помещающихся в отрезке длины  $2L$ . Если  $m=0$ ,  $f_0 = 0$ , а соответствующее слагаемое описывает стационарную составляющую решения.

Так как погрешность удовлетворяет линейному уравнению, то поведение каждой гармоники, входящей в (3.55), можно рассмотреть независимо. Рассмотрим член  $\varepsilon_m(x, t) = b_m(t)e^{ik_mx}$ . Будем искать решение уравнения в виде  $z^n e^{ik_mx}$ . При  $t = 0$ , ( $n = 0$ ) оно имеет вид  $e^{ik_mx}$ . Пусть  $z = e^{a\Delta t}$ , тогда

$$z^n = e^{an\Delta t} = e^{at}, \quad \varepsilon_m(x, t) = e^{at} e^{ik_mx},$$

(3.56)

причем  $k_m$  вещественно, но  $a$  может быть и комплексным. Подставляя (3.56) в (3.54), получим

$$e^{a(t+\Delta t)} e^{ik_mx} - e^{at} e^{ik_mx} = r \left( e^{at} e^{ik_m(x+\Delta x)} - 2e^{at} e^{ik_mx} + e^{at} e^{ik_m(x-\Delta x)} \right)$$

,

где  $r = \alpha \Delta t / (\Delta x)^2$ . При помощи тригонометрических тождеств перепишем последнее соотношение в окончательном виде

$$e^{a\Delta t} = 1 - 4r \sin^2(\beta/2).$$

(3.57)

Так как для каждой гармоники  $\varepsilon_j^{n+1} = e^{a\Delta t} \varepsilon_j^{n+1}$ , то погрешность округления не будет возрастать на каждом шаге по маршевой координате (времени), если  $|e^{a\Delta t}|$  не превосходит единицы. Следовательно, разностная схема устойчива при

$$|1 - 4r \sin^2(\beta/2)| \leq 1.$$

(3.58)

Коэффициент  $1 - 4r \sin^2(\beta/2)$  (равный отношению  $\varepsilon_j^{n+1} / \varepsilon_j^{n+1}$ ) называют *коэффициентом* (или множителем) *перехода* и обозначают

через  $G$ . Отметим, что при анализе Фурье устойчивости конечно-разностных схем реальные граничные условия не учитываются; вместо них для гармоник выставляют обычно периодические граничные условия.

При решении неравенства (3.58) надо рассмотреть два возможных случая:

1. Если  $1 - 4r \sin^2(\beta/2) > 0$ , то  $4r \sin^2(\beta/2) > 0$ ;
2. Если  $1 - 4r \sin^2(\beta/2) < 0$ , то  $4r \sin^2(\beta/2) - 1 \leq 1$ .

Первое неравенство выполняется для всех  $r > 0$ , а второе — лишь при  $r \leq 1/2$ . Последнее неравенство и является условием устойчивости рассматриваемой конечно-разностной схемы; оно накладывает ограничение на соотношение шагов по времени и пространственной координате. Теперь можно легко объяснить, почему в примере на рис.3.4, получались физически нереальные значения температуры. Шаг  $\Delta t$  в этом примере был вдвое больше максимально допустимого условием устойчивости конечно-разностной схемы, поэтому решение резко росло.

Метод Неймана (или Фурье) применим и к анализу конечно-разностных схем решения уравнений гиперболического типа. В качестве примера рассмотрим одномерное волновое уравнение первого порядка

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

(3.59)

описывающего распространение волны, бегущей со скоростью  $c$ . Это уравнение имеет только одно семейство характеристик, являющихся решением характеристического уравнения  $x_t = c$ . Общее решение уравнения (3.59) имеет вид:  $u(x - ct) = \text{const}$ .

Это решение требует, чтобы начальные данные, заданные при  $t = 0$ , без изменения переносились вдоль характеристик.

Лаксом была предложена конечно-разностная схема первого порядка для решения уравнений такого типа:

$$u_j^{n+1} = \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2} - c \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2} \right).$$

(3.60)

Первое слагаемое в правой части есть среднее значение неизвестной на предыдущем шаге по времени, а второе — конечно-разностный аналог первой производной по пространству. Пусть  $u_j^n = e^{at} e^{ik} m^x$ .. Подставляя это выражение в разностное уравнение,



получим, что коэффициент перехода принимает вид  $e^{a\Delta t} = \cos\beta - i\nu \sin\beta$ .

Следовательно, схема Лакса устойчива при  $|\cos\beta - i\nu \sin\beta| \leq 1$ , где параметр  $\nu = c\Delta t/\Delta x$  называется *числом Куранта*. Так как квадрат модуля комплексного числа равен сумме квадратов его вещественной и мнимой частей, то рассматриваемая конечно-разностная схема устойчива при  $|\nu| \leq 1$ . И в этом случае устойчивость конечно-разностной схемы определяется соотношением шагов по времени и пространственной координате. Условие (3.61) называется *условием устойчивости Куранта - Фридрихса - Леви (КФЛ)*, которое обычно рассматривают как основополагающее для развития современных численных методов решения уравнений в частных производных.

Коэффициент перехода для некоторой конечно-разностной схемы зависит от шагов сетки и волнового числа. Для конечно-разностной схемы Лакса коэффициент перехода имеет вид

$$G = \cos\beta - i\nu \sin\beta = |G| e^{i\phi} = \sqrt{\cos^2\beta - \nu^2 \sin^2\beta} e^{i \arctg(-\nu \tan\beta)},$$

где  $\phi$  – фазовый угол. Из последнего соотношения ясно, как коэффициент  $G$  зависит от числа Куранта  $\nu$  и параметра частоты  $\beta$ . Зависимость коэффициента  $G$  от этих параметров построена на рис. 3.12 при разных числах Куранта в фазовой плоскости. Тщательный анализ этих кривых позволяет сделать ряд интересных выводов.

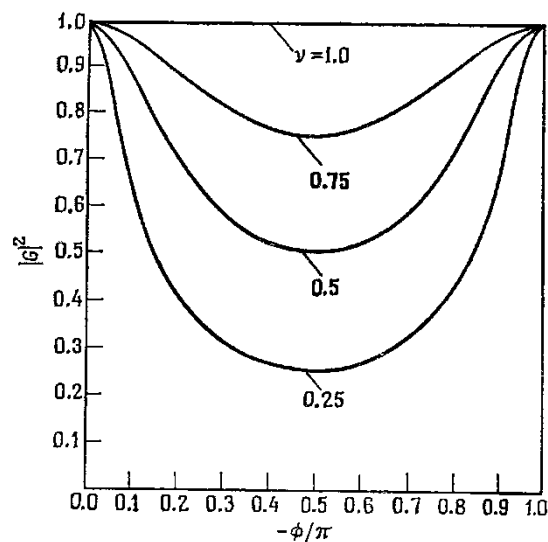


Рис. 3.12. Зависимость модуля коэффициента перехода от фазы при различных числах Куранта для схемы Лакса.

Фазовый угол в методе Лакса меняется от 0 для малых частот до  $-\pi$  для больших, что легко проверить, вычислив этот угол для обоих

предельных случаев. При числе Куранта, равном единице, все гармоники распространяются без затуханий. При числах Куранта, меньших единицы, низкочастотные и высокочастотные гармоники меняются слабо, тогда как гармоники со средней частотой затухают довольно сильно. По представленным на рис. 3.12 кривым - можно оценить и затухание по величине фазового угла.

## 4. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ МОДЕЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Мы ограничимся рассмотрением следующих модельных уравнений - волнового уравнения первого порядка, уравнения теплопроводности и уравнения Лапласа. Эти уравнения называются *модельными*, так как они, с одной стороны, являются наиболее распространенными, а с другой стороны, используются для изучения свойств решений более сложных уравнений в частных производных.

### 4.1. ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ

Одномерным волновым уравнением называется следующее гиперболическое уравнение в частных производных второго порядка:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (4.1)$$

Это уравнение описывает распространение звуковых волн в однородной среде со скоростью  $c$ . Существует уравнение первого порядка, свойства решений которого близки к свойствам решения уравнения (4.1):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad c > 0. \quad (4.2)$$

Отметим, что уравнение (4.1) можно получить из уравнения (4.2). В этом параграфе в качестве модельного уравнения выберем одномерное волновое уравнение первого порядка, или просто *волновое уравнение*. Оно является линейным гиперболическим уравнением, описывающим распространение волны со скоростью  $c$  вдоль оси  $x$  и в элементарной форме моделирует нелинейные уравнения, описывающие газодинамические течения.

**Простые явные методы (методы Эйлера)** неустойчивы и, следовательно, для численного решения волнового уравнения непригодны.

**Метод использования разностей против потока.** Простую явную схему можно сделать устойчивой, если при аппроксимации производной по пространству использовать не разности вперед, а разности назад в тех случаях, когда скорость волны  $c$  положительна. Если скорость волны отрицательна, то устойчивость схемы обеспечивается при использовании разностей вперед. При использовании разностей назад разностные уравнения принимают вид

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0, \quad c > 0. \quad (4.3)$$

Эта разностная схема имеет первый порядок точности с погрешностью аппроксимации  $O(\Delta t, \Delta x)$ . Из условия устойчивости Неймана следует, что схема устойчива при  $0 \leq v \leq 1$ , где  $v = c\Delta t / \Delta x$ . Подставим в (4.3) вместо  $u_j^{n+1}$  и  $u_{j-1}^n$  их выражения в виде ряда Тейлора. Тогда получим

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \left\{ \left[ u_j^n + \Delta t u_t + \frac{(\Delta t)^2}{2} u_{tt} + \frac{(\Delta t)^3}{6} u_{ttt} + \dots \right] - u_j^n \right\} + \\ & \frac{c}{\Delta x} \left\{ u_j^n - \left[ u_j^n - \Delta x u_x + \frac{(\Delta x)^2}{2} u_{xx} - \frac{(\Delta x)^3}{6} u_{xxx} + \dots \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (4.4)$$

После несложных преобразований это уравнение приводится виду

$$u_t + cu_x = -\frac{\Delta t}{2} u_{tt} + \frac{c\Delta x}{2} u_{xx} - \frac{(\Delta t)^2}{6} u_{ttt} - c \frac{(\Delta x)^2}{6} u_{xxx} + \dots \quad (4.5)$$

В левой части последнего равенства записано исходное волновое уравнение, а в правой - погрешность аппроксимации, которая обычно отлична от нуля. Значение членов, входящих в погрешность аппроксимации, можно лучше понять, если заменить производные по времени производными по пространству. Для этого выразим производную  $u_{tt}$  через производную по  $x$ . Дифференцируя по времени, получаем

$$u_{tt} + cu_{xt} = -\frac{\Delta t}{2} u_{ttt} + \frac{c\Delta x}{2} u_{xxt} - \frac{(\Delta t)^2}{6} u_{tttt} - c \frac{(\Delta x)^2}{6} u_{xxxt} + \dots,$$

и дифференцируя по  $x$  и умножая на  $-c$ , находим

$$-cu_{tx} - c^2 u_{xx} = \frac{c\Delta t}{2} u_{ttx} - \frac{c^2 \Delta x}{2} u_{xxx} + \frac{c(\Delta t)^2}{6} u_{tttx} + \frac{c^2 (\Delta x)^2}{6} u_{xxxx} + \dots$$

Складывая эти выражения, получаем

$$u_{tt} = c^2 u_{xx} + \Delta t \left( \frac{-u_{ttt}}{2} + \frac{c}{2} u_{ttx} + O(\Delta t) \right) + \Delta x \left( \frac{c}{2} u_{xxt} - \frac{c^2}{2} u_{xxx} + O(\Delta x) \right). \quad (4.6)$$

Аналогично можно получить следующие выражения для производных  $u_{ttt}, u_{ttx}, u_{xxt}$ :

$$\begin{aligned} u_{ttt} &= -c^3 u_{xxx} + O(\Delta t, \Delta x), \\ u_{ttx} &= c^2 u_{xxx} + O(\Delta t, \Delta x), \\ u_{xxt} &= -cu_{xxx} + O(\Delta t, \Delta x). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Из этих уравнений следует, что

$$\begin{aligned} u_t + cu_x &= \frac{c\Delta x}{2} (1-v) u_{xx} - c \frac{(\Delta x)^2}{6} (2v^2 - 3v + 1) u_{xxx} + \\ &+ O((\Delta x)^3, (\Delta x)^2 \Delta t, \Delta x (\Delta t)^2, (\Delta t)^3). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Уравнение, аналогичное (4.8), называют *модифицированным уравнением*. При использовании метода конечных разностей решается на самом деле модифицированное уравнение, а не исходное уравнение в частных производных. Подчеркнем, что для исключения производных по времени высших порядков необходимо использовать именно уравнение, получающееся после подстановки разложения в ряд Тейлора в разностное уравнение, т. е. уравнение (4.8), а не исходное уравнение в частных производных (4.2).

В отечественной литературе *модифицированное уравнение* обычно называют *дифференциальным приближением разностной схемы*.

Если  $v = 1$ , то правая часть равна нулю и решение разностного уравнения является точным решением исходного дифференциального уравнения.

Если  $v \neq 1$ , то схема с разностями против потока неявно вводит в уравнение *искусственную вязкость*, которая часто называют *неявной* (схемной) вязкостью в отличие от *явной вязкости*, которая преднамеренно вводится в разностное уравнение.

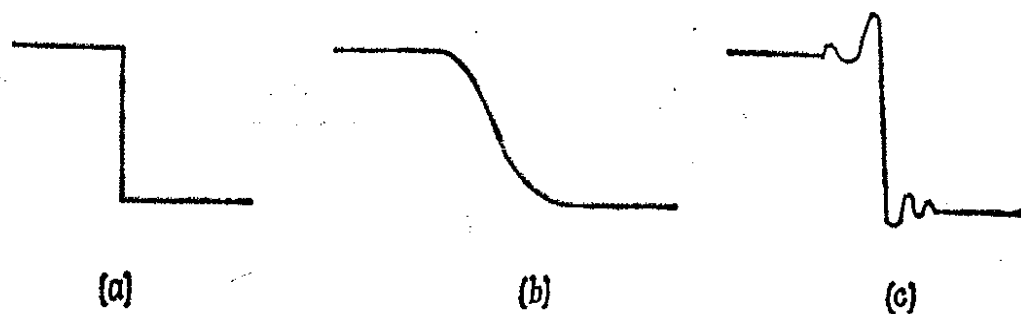


Рис. 3.13. Влияние диссипации и дисперсии.

- а) - точное решение,
- б) - численное решение, полученное для диссипативной ошибки,
- с) численное решение, полученное для дисперсионной ошибки.

Искусственная вязкость сглаживает решение уравнения, уменьшая градиенты всех параметров независимо от причины возникновения этих градиентов, физической или вычислительной. Такое свойство разностной схемы, обусловленное наличием в выражении для погрешности аппроксимации производных четного порядка, называют *диссипацией* на разностной сетке.

Другое, близкое к физическому, свойство разностных схем называют *дисперсией*. Оно непосредственно связано с производными нечетного порядка в выражении для погрешности аппроксимации. Дисперсия приводит к искажению соотношения фаз различных волн. Совместное воздействие диссипации и дисперсии на решение иногда называют *диффузией*. Диффузия приводит к растяжению крутых линий раздела, которые могут появляться в расчетной области. На рис. 3.13 показаны эффекты диссипации и дисперсии на расчет разрыва. Обычно если главный член в выражении для погрешности аппроксимации содержит производную четного порядка, то схема обладает в основном диссипативными свойствами, а если производную нечетного порядка - то дисперсионными.

**Неявный метод Эйлера.** Рассмотрим неявную разностную схему

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{c}{2\Delta x}(u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}) = 0. \quad (4.9)$$

Это схема первого порядка точности с погрешностью аппроксимации  $O(\Delta t, (\Delta x)^2)$ . Анализ устойчивости Неймана (анализ

Фурье) показывает, что она устойчива при любом шаге по времени, т. е. абсолютно устойчива. Однако при использовании этой схемы на каждом шаге по времени приходится решать систему алгебраических уравнений. Чтобы проиллюстрировать это, перепишем уравнение (4.9) так, что члены, содержащие значения неизвестных на  $(n + 1)$ -м шаге по времени, будут в левой части, а известное значение  $u_j^n$  - в правой части уравнения. В результате получим

$$\frac{v}{2}u_{j+1}^{n+1} + (1)u_j^{n+1} - \frac{v}{2}u_{j-1}^{n+1} = u_j^n,$$

или

$$au_{j+1}^{n+1} + du_j^{n+1} + bu_{j-1}^{n+1} = C,$$

(4.10)

$$\text{где } a = \frac{v}{2}, \quad d = 1, b = -\frac{v}{2}, \quad C = u_j^n.$$

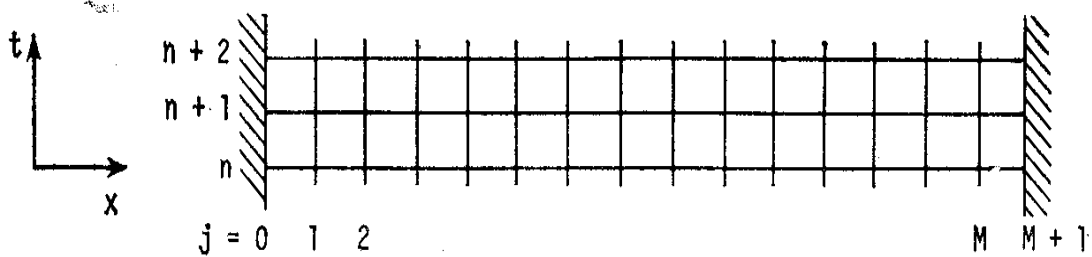


Рис. 4.1. Расчетная сетка.

Пусть расчет проводится на сетке, изображенной на рис. 4.1, состоящей из  $M + 2$  узлов по  $x$ . Начальные условия заданы при  $n = 0$ . На левой границе величина  $u_0^{n+1}$  задана и равна  $u_0$ , а значение  $u_{M+1}^{n+1}$  и, на правой границе можно вычислить в процессе решения методом характеристик. Например, если  $v = 1$ , то  $u_{M+1}^{n+1} = u_M^n$ . На заданной сетке разностная схема (4.10) сводится к решению системы  $M$  линейных алгебраических уравнений на  $(n + 1)$ -м шаге по времени:

$$[A] [u] = [C]$$

$$\begin{bmatrix} d_1 & a_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ b_2 & d_2 & a_2 & & & & & & \cdot \\ 0 & b_3 & d_3 & a_3 & & & & & \cdot \\ \cdot & & & & & & & & \cdot \\ \cdot & & & & & & & & 0 \\ \cdot & & & & & & & & \cdot \\ \cdot & & & & & & & & u_{M-1}^{n+1} \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & b_M & d_M & u_M^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{M-1}^{n+1} \\ u_M^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{M-1} \\ C_M \end{bmatrix}$$

В системе уравнений коэффициенты  $C_1$  и  $C_M$  определяются соотношениями

$$C_1 = u_1^n - bu_0^{n+1},$$

$$C_M = u_M^n - au_{M+1}^{n+1},$$

где  $u_0^{n+1}$  и  $u_{M+1}^{n+1}$ , известны из граничных условий.

**Метод прогонки.** В матричном уравнении матрица  $[A]$  трехдиагональная. Имеется метод быстрого решения систем уравнений с трехдиагональной матрицей, который обычно называют *прогонкой*. При применении этого алгоритма система уравнений сначала приводится к системе уравнений с верхней треугольной матрицей заменой диагональных элементов  $d_i$  элементами

$$d_i - \frac{b_i}{d_{i-1}} a_{i-1}, \quad i = 2, 3, \dots, M,$$

(4.11)

и коэффициентов  $C_i$  коэффициентами

$$C_i - \frac{b_i}{d_{i-1}} C_{i-1}, \quad i = 2, 3, \dots, M.$$

(4.12)

После этого вычисление неизвестных начинается от значения  $u$  на границе  $u_M^{n+1} = C_M / d_M$  продолжается по рекуррентной формуле

$$u_j^{n+1} = \frac{C_j - a_j u_{j+1}^{n+1}}{d_j}, \quad j = M-1, M-2, \dots, 1.$$

(4.13)

При использовании неявных схем на каждом шаге по времени приходится проводить больше вычислений, чем при использовании явных схем, но зато можно проводить расчет с существенно большим шагом по времени, так как они безусловно устойчивы. Однако при использовании слишком большого шага по времени можно получить бессмысленные результаты. Это связано с тем, что при увеличении шага по времени растет погрешность аппроксимации.

**Метод с перешагиванием (метод «чехарда»).** До сих пор мы в этой главе рассматривали лишь схемы первого порядка точности решения линейного волнового уравнения. В большинстве случаев эти схемы не используются для решения уравнений в частных производных из-за их низкой точности. Простейшим методом второго



порядка точности является *метод с перешагиванием*. Применяя его к волновому уравнению первого порядка, получаем явную одношаговую трехслойную по времени разностную схему

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + c \frac{(u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1})}{2\Delta x} = 0. \quad (4.14)$$

Метод с перешагиванием называют *трехслойным по времени*, так как для определения значения  $u$  на  $(n+1)$ -м шаге по времени необходимо знать значения  $u$  на  $(n-1)$ -м и  $n$ -м шагах по времени. Метод имеет погрешность аппроксимации  $O((\Delta t)^2, (\Delta x)^2)$  и устойчив при  $|v| \leq 1$ . Модифицированное уравнение имеет вид

$$u_t + cu_x = \frac{c(\Delta x)^2}{6}(v^2 - 1)u_{xxx} - \frac{c(\Delta x)^4}{120}(9v^4 - 10v^2 + 1)u_{xxxxx} + \dots \quad (4.15)$$

Главный член в выражении для погрешности аппроксимации пропорционален производной нечетного порядка  $u_{xxx}$ , поэтому разностная схема должна обладать в основном дисперсионными свойствами. Последнее вообще характерно для схем второго порядка точности. Схему с перешагиванием отличает то, что в правой части модифицированного уравнения вообще нет производных четного порядка, поэтому связанные с диссипацией ошибки вообще отсутствуют. Следовательно, метод с перешагиванием нейтрально устойчив и любые появляющиеся при расчете ошибки, например ошибки от неточного задания граничных условий или от округления, не затухают (предполагается, что граничные условия периодические, а  $|v| \leq 1$ ). Коэффициент перехода

$$G = \pm(1 - v^2 \sin^2 \beta)^{1/2} - iv \sin \beta. \quad (4.16)$$

Хотя метод с перешагиванием имеет второй порядок точности и не вносит в решение диссипацию, он обладает рядом недостатков. Прежде всего начальные условия необходимо задать на двух временных слоях. С этой проблемой можно справиться, используя двухслойную схему на первом шаге по времени. Второй недостаток метода связан именно с «перешагиванием» (т. е. с тем, что  $u_j^{n+1}$  не

зависит от  $u_j^n$ ), которое приводит к появлению при расчете двух независимых решений. И, наконец, метод с перешагиванием предъявляет более высокие требования к памяти ЭВМ, так как является трехслойным по времени.

**Двухшаговый метод Лакса — Вендроффа.** Для решения нелинейных уравнений, например уравнений, описывающих движение невязкой жидкости, можно использовать двухшаговый вариант метода Лакса - Вендроффа. Применяя этот метод для решения волнового уравнения, получаем явную двухшаговую трехслойную по времени разностную схему:

$$\text{Шаг 1 } \frac{u_{j+1/2}^{n+1/2} - (u_{j+1}^n + u_j^n)/2}{\Delta t/2} + c \frac{(u_{j+1}^n - u_j^n)}{\Delta x} = 0;$$

(4.17)

$$\text{Шаг 2 } \frac{(u_j^{n+1} - u_j^n)}{\Delta t} + c \frac{u_{j+1/2}^{n+1/2} - u_{j-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} = 0.$$

(4.18)

Эта схема имеет второй порядок точности с погрешностью аппроксимации  $O((\Delta x)^2, (\Delta t)^2)$  и устойчивая при  $|v| \leq 1$ .

**Метод Мак-Кормака.** Метод Мак-Кормака широко применяется для решения уравнений газовой динамики. Фактически это один из вариантов двухшагового метода Лакса - Вендроффа, не требующий вычисления значений искомой функции в точках  $j + 1/2$  и  $j - 1/2$ . Благодаря этому метод Мак-Кормака особенно удобен для решения нелинейных уравнений в частных производных:

$$\text{Предиктор: } \overline{u_j^{n+1}} = u_j^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^n - u_j^n);$$

(4.19)

$$\text{Корректор: } u_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left[ u_j^n + \overline{u_j^{n+1}} - c \frac{\Delta t}{\Delta x} (\overline{u_j^{n+1}} - \overline{u_{j-1}^{n+1}}) \right].$$

(4.20)

Первоначально (предиктор) находится оценка  $\overline{u_j^{n+1}}$  величины  $u$  на  $(n + 1)$ -м шаге по времени, а потом (корректор) определяется

окончательное значение  $u$  на  $(n + 1)$ -м шаге по времени. Отметим, что в предикторе производная  $\partial u / \partial x$  аппроксимируется разностями вперед, а в корректоре - разностями назад. Можно поступить и наоборот, что бывает полезным при решении некоторых задач. Для линейного волнового уравнения схема Мак-Кормака эквивалентна схеме Лакса—Вендроффа, поэтому у них одинаковые погрешность аппроксимации, условие устойчивости, модифицированное уравнение и коэффициент перехода.

## 4.2. УРАВНЕНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Одномерное уравнение теплопроводности (уравнение диффузии)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.21)$$

является параболическим уравнением в частных производных. Оно описывает одномерный процесс распространения тепла или одномерную диффузию в однородной изотропной среде. Это уравнение является простейшим модельным уравнением для параболических уравнений.

Перейдем теперь к изучению некоторых наиболее важных разностных схем решения уравнения теплопроводности.

**Простой явный метод.** Явный одношаговый метод

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

(4.22)

имеет первый порядок точности с погрешностью аппроксимации  $O(\Delta t, (\Delta x)^2)$ . В стационарном случае погрешность аппроксимации равна  $O((\Delta x)^2)$ . Как показано выше, такая разностная схема устойчива при

$$0 \leq r \leq 1/2, \quad r = \alpha \Delta t / (\Delta x)^2.$$

(4.23)

Модифицированное уравнение в рассматриваемом случае имеет вид

$$u_t + \alpha u_{xx} = \left[ -\frac{1}{2} \alpha^2 \Delta t + \frac{\alpha (\Delta x)^2}{12} \right] u_{xxxx} + \left[ \frac{1}{3} \alpha^3 (\Delta t)^2 - \frac{1}{12} \alpha^2 \Delta t (\Delta x)^2 + \frac{1}{360} \alpha (\Delta x)^4 \right] u_{xxxxx} + \dots \quad (4.24)$$

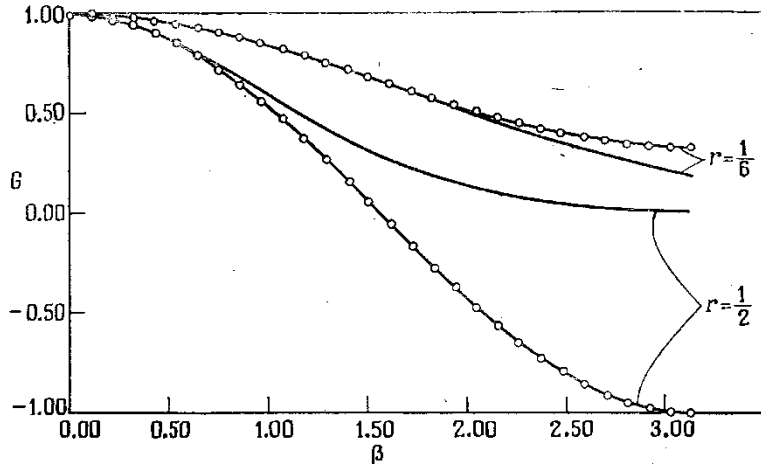


Рис. 4.2. Коэффициент перехода для простой явной схемы. — о — простой явный метод; — точное решение.

Отметим, что при  $r = 1/6$  погрешность аппроксимации равна  $O((\Delta t)^2, (\Delta x)^4)$ . Интересно также заметить, что в выражение для погрешности аппроксимации не входят производные нечетного порядка. Поэтому для этого метода, так же как для большинства других методов решения уравнения теплопроводности, дисперсия на разностной сетке отсутствует. Этот факт следует и из анализа выражения для коэффициента перехода рассматриваемой схемы:

$$G = 1 + 2r(\cos \beta - 1),$$

(4.25)

причем мнимая часть этого коэффициента перехода равна нулю и, следовательно, сдвиг по фазе отсутствует. На рис. 4.2 проведено сравнение коэффициента перехода (4.25) с его точным значением при двух различных  $r$ . Точное значение коэффициента перехода (затухания) определялось путем подстановки фундаментального решения

$$u = e^{-\alpha k_m^2 t} e^{ik_m x} \text{ в соотношение } G_e = \frac{u(t + \Delta t)}{u(t)}.$$

Отсюда

$$G_e = e^{-\alpha k_m^2 \Delta t},$$

(4.26)

или

$$G_e = e^{-r\beta^2}, \quad \text{где } \beta = k_m \Delta x.$$

(4.27)

Следовательно, амплитуда точного решения уравнения теплопроводности уменьшается на каждом шаге по времени в  $e^{-r\beta^2}$  раз (если не учитывать влияние граничных условий).

Из рис. 4.2 видно, что простой явный метод решения уравнения теплопроводности при  $r = 1/2$  характеризуется сильной диссипацией при больших значениях параметра  $\beta$ . Как и следовало ожидать, при  $r = 1/6$  наблюдается гораздо лучшее совпадение коэффициента перехода с его точным значением.

При использовании простого явного метода уравнение теплопроводности решается последовательным продвижением (маршем) от линии, на которой заданы начальные данные, т. е. так же, как решались явными методами гиперболические уравнения. Этот процесс проиллюстрирован на рис. 4.3. Из рисунка видно, что решение в точке  $P$  не зависит от граничных условий, заданных на линиях  $AB$  и  $CD$ . Однако решение уравнения теплопроводности в точке  $P$  должно зависеть от граничных условий на линиях  $AB$  и  $CD$ , так как характеристики параболического уравнения теплопроводности имеют вид  $t = \text{const}$ .

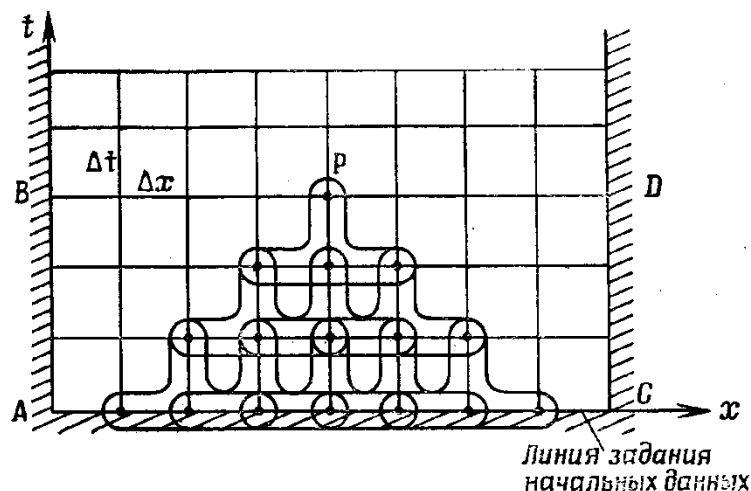


Рис. 4.3. Зона зависимости для простой явной схемы.

Следовательно, простая явная схема (с конечным  $M$ ) неправильно моделирует физические особенности уравнений в частных производных параболического типа. Представляется, что для

решения уравнений в частных производных параболического типа лучше использовать неявные методы, так как они учитывают всю информацию, известную на характеристике  $t = const$  и под ней. С другой стороны, явные схемы лучше использовать для решения гиперболических уравнений, так как у них размер зоны зависимости ограничен.

**Простой неявный метод.** Простой неявный метод характеризуется следующей разностной схемой:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}.$$

(4.28)

Используя центральный разностный оператор,  $\delta_x^2 u_j^n = u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n$ , уравнение можно переписать более компактно:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{\delta_x^2 u_j^{n+1}}{(\Delta x)^2}.$$

(4.29)

Рассматриваемая разностная схема имеет первый порядок точности с погрешностью аппроксимации  $O(\Delta t, (\Delta x)^2)$ . и абсолютно устойчива. Как следует из уравнения (4.29), на  $(n + 1)$ -м шаге по времени следует решать систему линейных уравнений с трехдиагональной матрицей.

Модифицированное уравнение для рассматриваемой схемы имеет вид

$$u_t - \alpha u_{xx} = \left[ \frac{1}{2} \alpha^2 \Delta t + \frac{\alpha (\Delta x)^2}{12} \right] u_{xxxx} + \left[ \frac{1}{3} \alpha^3 (\Delta t)^2 + \frac{1}{12} \alpha^2 \Delta t (\Delta x)^2 + \frac{1}{360} \alpha (\Delta x)^4 \right] u_{xxxxxx} + \dots$$

(4.30)

Коэффициент перехода

$$G = [1 + 2r(1 - \cos \beta)]^{-1} \quad (4.31)$$

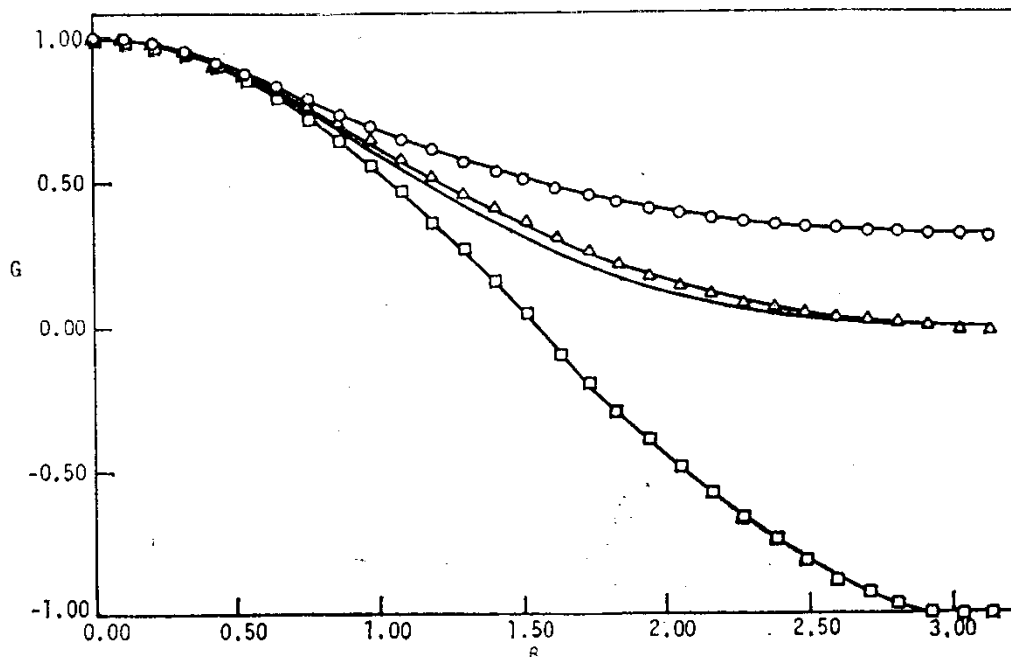


Рис. 4.4. Коэффициент перехода для нескольких численных схем,  $r = 1/2$ ;  $-\circ-$  простая неявная схема;  $-\Delta-$  схема Кранка—Николсона;  $-\square-$  схема Дюфорта — Франкела; — точное решение.

приведен на рис. 4.4 при  $r = 1/2$  и сравнивается с его точным значением.

**Метод Кранка — Николсона.** Кранк и Николсон предложили для решения уравнения теплопроводности неявную схему

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{\delta_x^2 u_j^n + \delta_x^2 u_j^{n+1}}{2(\Delta x)^2}.$$

(4.32)

Это широко известная абсолютно устойчивая схема, которую обычно называют *схемой Кранка — Николсона*. Благодаря тому, что правая часть уравнения аппроксимируется полусуммой значений производных на двух последовательных шагах по времени, схема имеет второй порядок точности с погрешностью аппроксимации  $O((\Delta t)^2, (\Delta x)^2)$ . Как и в предыдущем случае, на  $(n+1)$ -м слое по времени приходится решать систему алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей. При применении метода Кранка — Николсона модифицированное уравнение имеет вид

$$u_t - \alpha u_{xx} = \frac{\alpha(\Delta x)^2}{12} u_{xxxx} + \left[ \frac{1}{12} \alpha^3 (\Delta t)^2 + \frac{1}{360} \alpha (\Delta x)^4 \right] u_{xxxxxx} + \dots$$

(4.33)

Коэффициент перехода

$$G = \frac{1-r(1-\cos\beta)}{1+r(1-\cos\beta)}$$

(4.34)

при  $r = 1/2$  построен на рис. 4.4.

### Метод Дюфорта - Франкела. Явная трехслойная схема

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^n - u_j^{n+1} - u_j^{n-1} + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2},$$

(4.35)

названа, именами, впервые предложивших ее Дюфорта и Франкела. Переписав уравнение (4.35) в виде

$$u_j^{n+1}(1+2r) = u_j^{n-1} + 2r(u_{j+1}^n - u_j^{n-1} + u_{j-1}^n), \quad r = \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2},$$

(4.37)

обнаружим, что в него входит лишь одна неизвестная величина  $u_j^{n+1}$ , и, следовательно, схема явная. Схема Дюфорта - Франкела имеет погрешность аппроксимации  $O((\Delta t)^2, (\Delta x)^2, (\Delta t/\Delta x)^2)$ . Поэтому если она удовлетворяет условию согласованности, то  $(\Delta t/\Delta x)^2$  должно стремиться к нулю при  $\Delta t$  и  $\Delta x$ , стремящихся к нулю.

Если при стремлении  $\Delta t$  и  $\Delta x$  к нулю  $r$  остается постоянным, то величина  $(\Delta t/\Delta x)^2$  формально имеет порядок  $O(\Delta t)$ . Тогда модифицированное уравнение имеет вид

$$u_t - \alpha u_{xx} = \left[ \frac{1}{12} \alpha (\Delta x)^2 - \alpha^3 \frac{(\Delta t)^2}{(\Delta x)^2} \right] u_{xxxx} + \left[ \frac{1}{360} \alpha (\Delta x)^4 - \frac{1}{3} \alpha^3 (\Delta t)^2 + 2\alpha^5 \frac{(\Delta t)^4}{(\Delta x)^4} \right] u_{xxxxxx} + \dots$$

(4.37)

Коэффициент перехода



$$G = \frac{2r \cos \beta \pm \sqrt{1 - 4r^2 \sin^2 \beta}}{1 + 2r}$$

(4.38)

при  $r = 1/2$  изображен на рис. 4.4. Схема Дюфорта - Франкела обладает необычным для явных схем свойством - безусловной устойчивостью.

**Пример.** Рассмотрим одномерную задачу о фильтрации идеального газа в пласте при нагреве и понижении давления (депрессии). Поля давления и температуры в пласте рассчитываются на основе уравнений теплопроводности и пьезопроводности, которые для небольших отклонений давления и температуры  $T - T_0 \ll T_0$ ,  $p - p_0 \ll p_0$  от исходных значений имеют вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{m \rho_g c_g k}{\rho_s c_s \mu} \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x},$$

(4.39)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{k p}{\mu m} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2},$$

(4.40)

где  $T$  - температура в пласте,  $p$  - давление,  $m$  - пористость,  $\chi_T$  - коэффициент температуропроводности системы,  $\chi_p = \frac{k p_0}{\mu m}$  - коэффициент пьезопроводности,  $k$  - абсолютная проницаемость,  $\mu$  - динамическая вязкость газа,  $\rho$  - плотность,  $c$  - удельная теплоемкость; индексы  $g, s$  - относятся к параметрам газа и пласта, индекс 0 - к начальному состоянию.

Разностные уравнения, полученные с использованием неявной схемы, примут вид

$$\frac{p_i^{n+1} - p_i^n}{\Delta t} = \chi_p \frac{p_{i+1}^{n+1} - 2p_i^{n+1} + p_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2},$$

(4.41)

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \chi_T \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} - g \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{\Delta x} \frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{\Delta x}$$

,

где  $g = \frac{m \rho_g c_g k}{\chi_T \rho_s c_s \mu}.$

Если известны значения давления и температуры на  $n$  временном шаге, то сначала решаем первое из системы уравнений

(4.41), следующее уравнение решается с учетом полученных для  $n + 1$  шага по времени значений  $p_i^{n+1}$ . Для решения приводим уравнения к следующему виду:

$$b_1 p_{i-1}^{n+1} + d_1 p_i^{n+1} + a_1 p_{i+1}^{n+1} = c_1$$

$$b_2 T_{i-1}^{n+1} + d_2 T_i^{n+1} + a_2 T_{i+1}^{n+1} = c_2$$

(4.42)

$$b_1 = -\frac{\chi_p \Delta t}{\Delta x^2}, \quad d_1 = 1 + 2\frac{\chi_p \Delta t}{\Delta x^2}, \quad a_1 = -\frac{\chi_p \Delta t}{\Delta x^2}, \quad c_1 = p_i^n,$$

$$b_2 = -\frac{\chi_T \Delta t}{\Delta x^2}, \quad d_2 = 1 + 2\frac{\chi_T \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{g \Delta t}{\Delta x^2} (p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}),$$

$$a_2 = -\frac{\chi_T \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{g \Delta t}{\Delta x^2} (p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}), \quad c_2 = T_i^n.$$

Далее используем метод прогонки, заключающийся в следующем.

1. Запишем уравнение в виде

$$\begin{bmatrix} d_1 & a_1 & 0 & . & . & 0 \\ b_2 & d_2 & a_2 & . & . & . \\ 0 & b_3 & d_3 & a_3 & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & a_{NJ-1} \\ 0 & . & . & 0 & b_{NJ} & d_{NJ} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ . \\ . \\ . \\ u_{NJ}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ . \\ . \\ . \\ c_{NJ} \end{bmatrix}.$$

(4.43)

2. Производим замену

$$d_i = d_i - \frac{b_i}{d_{i-1}} a_{i-1}, \quad j = 2, 3, \dots, NJ;$$

$$c_i = c_i - \frac{b_i}{d_{i-1}} c_{i-1}, \quad j = 2, 3, \dots, NJ.$$

3. После этого, начиная с  $u_{NJ} = c_{NJ} / d_{NJ}$ , проводится обратная

$$\text{подстановка } u_k = \frac{c_k - a_k u_{k+1}}{d_k}, \quad k = NJ - 1, NJ - 2, \dots, 1.$$

Отметим, что при использовании явной схемы для совместного

решения уравнений необходимо, чтобы выполнялись условия устойчивости для обоих уравнений, таким образом выбирается меньший из двух шагов по времени. Однако, это оказывается неудобным, ввиду того, что значения  $\chi_T$  и  $\chi_P$  на практике отличаются на несколько порядков. Поэтому, для задач неизотермической фильтрации, как правило, используют неявные схемы. На рис.4.5. Приведен пример расчета задачи неизотермической фильтрации газа.

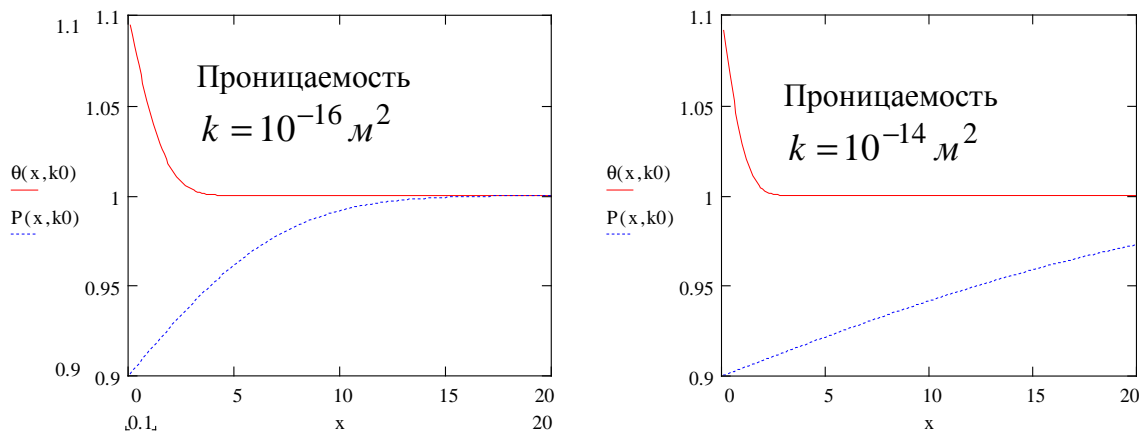


Рис.4.5. Распределение безразмерной температуры  $\theta = T/T_0$  и давления  $P = p/p_0$  в пластах с различной проницаемостью через 10 суток.

**Методы решения двумерного уравнения теплопроводности.** Двумерное  $(2 - D)$  уравнение теплопроводности имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right).$$

(4.44)

Так как это уравнение отличается от одномерного  $(1 - D)$  уравнения теплопроводности, то необходимо аккуратно проанализировать возможность применения для его решения методов, описанных в предыдущих разделах. Приведем два примера, иллюстрирующих возникающие при этом проблемы. Если для решения двумерного уравнения теплопроводности применим простой явный метод, то получим следующую разностную схему:

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = \alpha \left[ \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} \right],$$

(4.45)

где  $x = i\Delta x, y = j\Delta y$ . Условие устойчивости этой схемы имеет вид

$$\alpha \Delta t \left[ \frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right] \leq \frac{1}{2},$$

(4.46)

т. е. при  $(\Delta x)^2 = (\Delta y)^2$  схема устойчива, если  $r \leq 1/4$ . Это условие накладывает в два раза более жесткое ограничение на соотношение шагов по времени и пространству по сравнению с одномерным случаем (условием  $r \leq 1/2$ ) и, следовательно, делает применение явного метода на практике еще менее целесообразным.

Применяя для решения двумерного уравнения теплопроводности метод Кранка—Николсона, получаем разностную схему

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{\alpha}{2} (\hat{\delta}_x^2 + \hat{\delta}_y^2) (u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j}^n).$$

(4.47)

Для сокращения записи здесь введены двумерные центрально-разностные операторы  $\hat{\delta}_x^2$  и  $\hat{\delta}_y^2$  определяемые соотношениями

$$\hat{\delta}_x^2 u_{i,j}^n = \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} = \frac{\delta_x^2 u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2},$$

$$\hat{\delta}_y^2 u_{i,j}^n = \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} = \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^n}{(\Delta y)^2}.$$

Как и в одномерном случае, схема Кранка—Николсона абсолютно устойчива, если применяется для решения уравнения с периодическими граничными условиями. К сожалению,

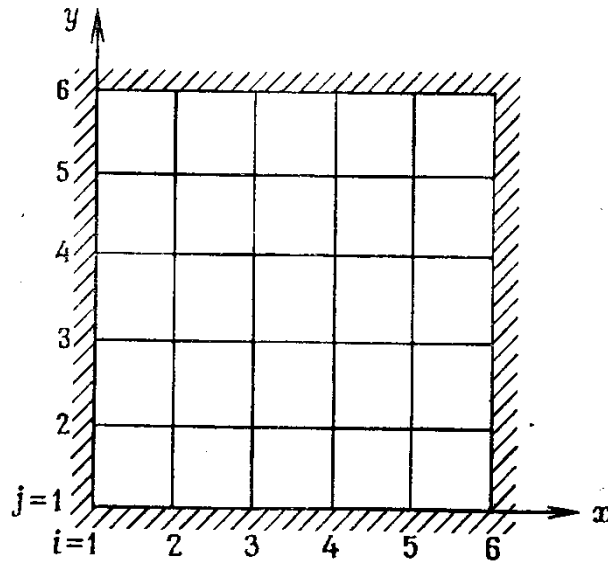


Рис. 4.6. Двумерная расчетная сетка;  $u = u_0 = \text{const}$  на границе.

получающаяся в результате система линейных алгебраических уравнений не является больше трехдиагональной, так как в разностные уравнения входят пять неизвестных  $u_{i,j}^{n+1}, u_{i+1,j}^{n+1}, u_{i-1,j}^{n+1}, u_{i,j+1}^{n+1}, u_{i,j-1}^{n+1}$ . То же самое верно и для всех описанных ранее неявных разностных схем. Чтобы подробнее изучить получающуюся систему уравнений, перепишем уравнение (4.47) в виде

$$a u_{i,j-1}^{n+1} + b u_{i-1,j}^{n+1} + c u_{i,j}^{n+1} + b u_{i+1,j}^{n+1} + a u_{i,j+1}^{n+1} = d_{i,j}^n, \quad (4.48)$$

где

$$a = -\frac{a\Delta t}{2(\Delta y)^2} = -\frac{1}{2}r_y, \quad b = -\frac{a\Delta t}{2(\Delta x)^2} = -\frac{1}{2}r_x, \quad c = 1 + r_x + r_y,$$

$$d_{i,j}^n = u_{i,j}^n + \frac{\alpha \Delta t}{2} (\hat{\delta}_x^2 + \hat{\delta}_y^2) u_{i,j}^n.$$

**F** 11

[illegible]

$$\text{Шаг 1} \quad \frac{u_{i,j}^{n+1/2} - u_{i,j}^n}{\Delta t/2} = \alpha(\hat{\delta}_x^2 u_{i,j}^{n+1/2} + \hat{\delta}_y^2 u_{i,j}^n),$$

(4.49)

$$\text{Шаг 2} \quad \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta t/2} = \alpha(\hat{\delta}_x^2 u_{i,j}^{n+1/2} + \hat{\delta}_y^2 u_{i,j}^{n+1}).$$

(4.50)

В результате проведенного «расщепления» задача сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей. На шаге 1 такая система решается для каждой строки (ряда точек с фиксированным  $j$ , а на шаге 2—для каждого столбца (ряда точек с фиксированным  $i$ ).

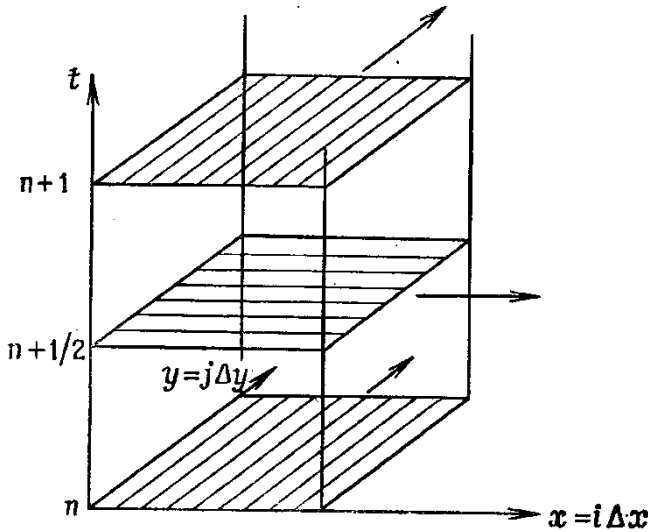


Рис. 4.7. Схема расчета неявным методом переменных направлений. Стрелками указаны направления, по которым схема неявна.

Схематически рассматриваемая процедура решения уравнения теплопроводности показана на рис. 4.7. Неявный метод переменных направлений обладает вторым порядком точности с погрешностью аппроксимации  $O((\Delta t)^2, (\Delta x)^2, (\Delta y)^2)$ . Проанализировав выражение для коэффициента перехода

$$G = \frac{[1 - r_x(1 - \cos \beta_x)][1 - r_x(1 - \cos \beta_y)]}{[1 + r_x(1 - \cos \beta_x)][1 + r_x(1 - \cos \beta_y)]},$$

(4.51)

находим, что этот метод безусловно устойчив.

При обобщении этого метода на трехмерный случай разностная схема (трехшаговая схема, использующая значения величин на шагах по времени  $n, n + 1/3, n + 2/3, n + 1$ ) оказывается лишь условно

устойчивой и имеет погрешность аппроксимации  $O(\Delta t, (\Delta x)^2, (\Delta y)^2, (\Delta z)^2)$ . Для того чтобы обойти это, предложен общий метод построения неявных схем переменных направлений, имеющих второй порядок точности и безусловно устойчивых. Применяя этот метод, можно обобщить схему Кранка — Николсона на случай трехмерного уравнения теплопроводности. В результате получим следующую трехшаговую схему:

Шаг 1

$$u^* - u^n = \frac{r_x}{2} \delta_x^2 (u^* + u^n) + r_y \delta_y^2 u^n + r_z \delta_z^2 u^n.$$

Шаг 2

$$(u^{**} - u^n) = \frac{r_x}{2} \delta_x^2 (u^* + u^n) + \frac{r_y}{2} \delta_y^2 (u^{**} + u^n) + r_z \delta_z^2 u^n.$$

(4.52)

Шаг 3

$$u^{n+1} - u^n = \frac{r_x}{2} \delta_x^2 (u^* + u^n) + \frac{r_y}{2} \delta_y^2 (u^{**} + u^n) + \frac{r_z}{2} \delta_z^2 (u^{n+1} + u^n).$$

Здесь верхние индексы \* и \*\* обозначают промежуточные значения, а индексы  $i, j, k$  опущены во всех членах уравнений.

**Методы дробных шагов, или методы расщепления.** Неявные методы переменных направлений тесно связаны, а иногда и совпадают с *методами расщепления*, или, как их еще иногда называют, *методами дробных шагов*, которые были созданы советскими математиками примерно в то же время, когда в США были разработаны неявные методы переменных направлений. Основная идея этих методов состоит в расщеплении конечно-разностного оператора на ряд одномерных операторов. Например, к простой неявной схеме решения двумерного уравнения теплопроводности можно применить метод расщепления следующим образом:

$$\text{Шаг 1} \quad \frac{u_{i,j}^{n+1/2} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = \alpha \hat{\delta}_x^2 u_{i,j}^{n+1/2},$$

(4.53)

$$\text{Шаг 2} \quad \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta t} = \alpha \hat{\delta}_y^2 u_{i,j}^{n+1}.$$



Эта схема имеет первый порядок точности с погрешностью аппроксимации.  $O(\Delta t, (\Delta x)^2, (\Delta y)^2)$ .

**Явные методы переменных направлений.** Для решения двумерного уравнения теплопроводности можно также воспользоваться явным методом переменных направлений. В отличие от неявного метода переменных направлений он не требует обращения трехдиагональных матриц. Так как явный метод переменных направлений можно использовать для решения одномерного уравнения теплопроводности, для простоты ограничимся применением явного метода переменных направлений к этому уравнению.

Применяя этот метод, получим двухшаговую разностную схему:

$$\begin{aligned} \text{Шаг 1} \quad \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} &= \alpha \frac{u_{j-1}^{n+1} - u_j^{n+1} - u_j^n + u_{j+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}, \\ (4.54) \\ \text{Шаг 2} \quad \frac{u_j^{n+2} - u_j^{n+1}}{\Delta t} &= \alpha \frac{u_{j-1}^{n+1} - u_j^{n+1} - u_j^{n+2} + u_{j+1}^{n+2}}{(\Delta x)^2}. \end{aligned}$$

На шаге 1 разностные уравнения решаются маршевым методом от левой границы к правой. При таком марше величина  $u_{j-1}^{n+1}$  всегда известна, поэтому неизвестная  $u_j^{n+1}$  определяется «явно». Аналогично на шаге 2 уравнения решаются маршевым методом от правой границы к левой, и схема снова является «явной», так как значение  $u_{j+1}^{n+2}$  уже известно. При этом предполагается, что значения функции  $u$  на границе области известны. Хотя рассматриваемая схема является трехслойной по времени, для хранения в памяти ЭВМ величины  $u$  достаточно одного массива, благодаря тому что при расчете значение  $u$  в каждом узле сетки используется лишь один раз. Явная схема переменных направлений безусловно устойчива и имеет погрешность аппроксимации  $O((\Delta t)^2, (\Delta x)^2, (\Delta t/\Delta x)^2)$ . Из-за наличия в погрешности аппроксимации члена  $(\Delta t/\Delta x)^2$  эта разностная схема формально имеет первый порядок точности.

**Метод «классики».** Последним из методов решения двумерного уравнения теплопроводности рассмотрим метод «классики». Это явный абсолютно устойчивый метод. Схема расчета иллюстрируется на рис. 4.8 и состоит из двух последовательных

проходов всей расчетной области. При первом проходе величина  $u_{i,j}^{n+1}$  вычисляется в тех узлах сетки, где  $(i + j + n)$  – четное число, по простой явной схеме

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = \alpha(\hat{\delta}_x^2 u_{i,j}^n + \hat{\delta}_y^2 u_{i,j}^n).$$

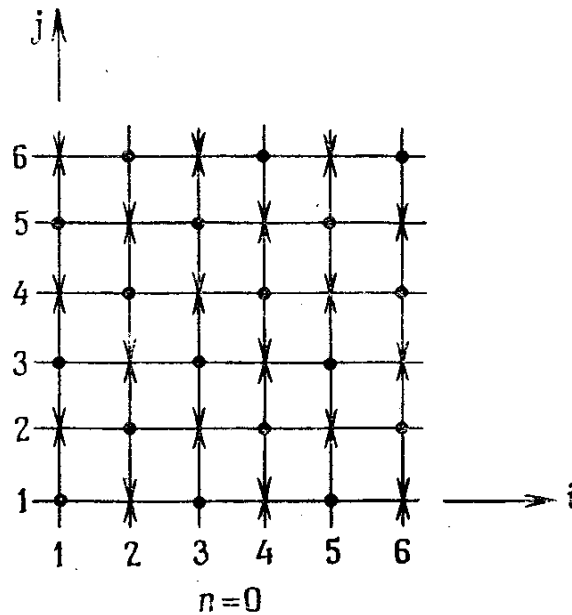


Рис. 4.8. Схема расчета «классики». Крестики для нечетных  $(i + j + n)$ ; кружки для четных  $(i + j + n)$ .

(4.55)

При втором проходе величина  $u_{i,j}^{n+1}$  вычисляется в оставшихся узлах сетки (в тех узлах сетки, где  $(i + j + n)$  – нечетное число) по простой неявной схеме

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = \alpha(\hat{\delta}_x^2 u_{i,j}^{n+1} + \hat{\delta}_y^2 u_{i,j}^{n+1}).$$

(4.56)

Второй проход кажется неявным, но решать систему алгебраических уравнений не надо, так как величины  $u_{i+1,j}^{n+1}, u_{i-1,j}^{n+1}, u_{i,j+1}^{n+1}, u_{i,j-1}^{n+1}$  нам уже известны из первого прохода, т. е. рассматриваемая схема явная. Погрешность аппроксимации метода «классики» равна  $O(\Delta t, (\Delta x)^2, (\Delta y)^2)$ .

**Дополнительные замечания.** Выбор наилучшего метода решения уравнения теплопроводности является нелегким делом из-за

того, что существует большое разнообразие приемлемых методов. Обычно неявные методы больше подходят для их решения, чем явные методы. Для решения одномерного уравнения теплопроводности мы рекомендуем схему Кранка—Николсона, так как она обеспечивает второй порядок точности по времени и пространству. Для двух- и трехмерного уравнений теплопроводности превосходные результаты получаются при использовании как неявного метода переменных направлений Дугласа и Ганна, так и блочного метода Келлера или модифицированного блочного метода.

### 4.3. УРАВНЕНИЕ ЛАПЛАСА

Уравнение Лапласа является модельным уравнением для эллиптических уравнений в частных производных. В декартовой системе координат двумерное уравнение Лапласа имеет вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0.$$

(4.57)

Некоторые важные задачи, часто встречающиеся в приложениях, сводятся к решению одного эллиптического уравнения в частных производных. К ним относятся задачи расчета дозвукового безвихревого (потенциального) течения газа и определения стационарного поля температуры в твердом теле.

Более сложная система уравнений, имеющей эллиптический характер—эллиптическое уравнение Пуассона:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y).$$

(4.58)

Уравнения в частных производных эллиптического типа встречаются в задачах гидродинамики и теплообмена довольно часто, поэтому мы внимательно рассмотрим различные методы решения нашего модельного эллиптического уравнения.

**Конечно-разностные аналоги уравнения Лапласа.** Методы решения уравнения Лапласа, да и вообще большинства эллиптических уравнений различаются не столько методом построения конечно-разностного аналога (хотя и эти методы отличаются), сколько методом решения получающейся системы алгебраических уравнений.

**Пятиточечная схема.** Наиболее часто для построения конечно-разностного аналога уравнения Лапласа используется пятиточечная

схема, предложенная Рунге в 1908 г.:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} = 0$$

(4.59)

с погрешностью аппроксимации  $O((\Delta x)^2, (\Delta y)^2)$ . Модифицированное уравнение имеет вид

$$u_{xx} + u_{yy} = -\frac{1}{12} \left[ u_{xxxx} (\Delta x)^2 + u_{yyyy} (\Delta y)^2 \right] + \dots$$

(4.60)

**Девятиточечная схема.** Эта схема представляется наиболее логичной, если мы хотим решить уравнение Лапласа по схеме высокого порядка точности. Пусть  $\Delta x = h$ ,  $\Delta y = k$ , тогда разностная схема имеет вид

$$\begin{aligned} & u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j+1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j-1} - \\ & - 2 \frac{h^2 - 5k^2}{h^2 + k^2} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) + \\ & + 2 \frac{5h^2 - k^2}{h^2 + k^2} (u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) - 20u_{i,j} = 0. \end{aligned}$$

(4.61)

Погрешность аппроксимации этой схемы имеет порядок  $O(h^4, k^4)$ , однако, на квадратной сетке этот порядок повышается до  $O(h^6)$ . Девятиточечная схема кажется довольно привлекательной для уравнения Лапласа из-за подходящей ошибки аппроксимации, но для уравнений более общего вида (в том числе и для уравнения Пуассона), содержащих другие члены, она имеет погрешность аппроксимации лишь  $O(h^2, k^2)$ .

**Другие разностные схемы для уравнения Лапласа.** Так как оператор Лапласа инвариантен относительно поворота системы координат, то не удивительно, что на квадратной сетке ( $\Delta x = \Delta y = h$ ) вместо четырех точек шаблона схемы (4.61) можно использовать точки, в которые они переходят при повороте на  $45^\circ$  относительно узла  $(i, j)$  и одновременном увеличении шага сетки до  $\sqrt{2}h$ . В результате получается диагональная пятиточечная схема решения уравнения Лапласа:

$$u_{i+1,j+1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j-1} + u_{i-1,j+1} - 4u_{i,j} = 0.$$

(4.62)

На рис. 4.9 показано расположение узлов разностной сетки, используемых при аппроксимации оператора Лапласа по двум пятиточечным разностным схемам. Погрешность аппроксимации диагональной пятиточечной разностной схемы составляет.

В литературе приводятся и другие разностные схемы решения уравнения Лапласа, но ни одна из них не обладает сколь-нибудь заметными преимуществами перед приведенными пяти- и девятиточечной схемами. Для повышения порядка аппроксимации приходится увеличивать число точек в шаблоне, поэтому при использовании таких схем трудно обеспечить высокий порядок точности вблизи границ.

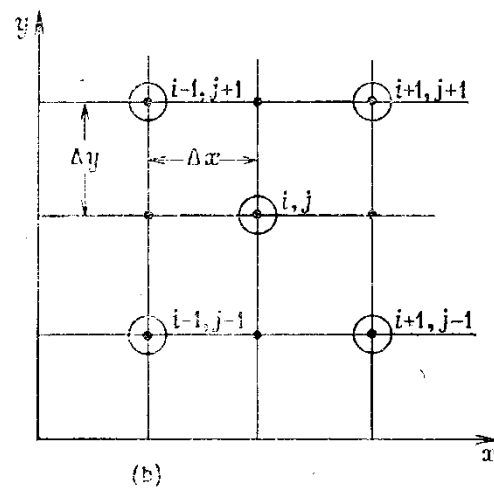
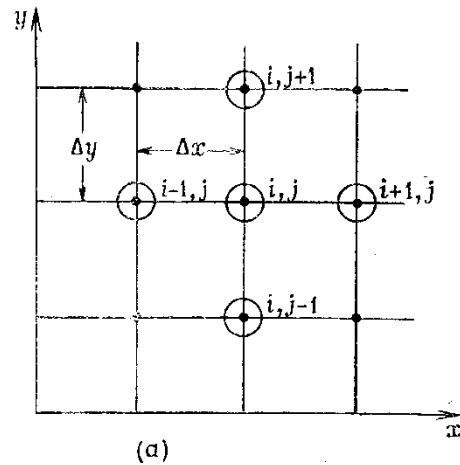


Рис. 4.9. Шаблоны, используемые для расчета по двум пятиточечным схемам при  $\Delta x = \Delta y$ .

- (a) - пятиточечная схема;
- (b) диагональная пятиточечная схема.

Рассмотрим простой пример применения разностной схемы для решения уравнения Лапласа. Требуется найти функцию  $u$ , удовлетворяющей уравнению Лапласа  $\partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2 = 0$  в квадрате  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 \leq y \leq 1$ , если на границе заданы условия Дирихле.

Решение поставленной задачи можно найти в виде суммы ряда (используя метод разделения переменных), коэффициенты которого подбираются так, чтобы удовлетворить заданным условиям для  $u$  на границе. Такое решение приведено в большинстве книг, посвященных теплопередаче, и может быть использовано для проверки конечно-разностных схем. Есть и другой способ проверки разностной схемы.

Возьмем какую-нибудь простую функцию, являющуюся решением уравнения Лапласа в квадратной области, например функцию  $u = x^2 - y^2$ , и используем ее для задания граничных условий при конечно-разностном решении этого уравнения. Тогда результаты расчета можно сравнить с функцией  $u = x^2 - y^2$ . В этом примере мы используем пятиточечную схему, положив  $\Delta x = \Delta y = 0.1$ , т. е. построим равномерную сетку  $11 \times 11$  в квадратной области (рис. 4.10). При  $\Delta x = \Delta y$  разностные уравнения имеют вид

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} = 0. \quad (4.63)$$

Во всех узлах сетки, в которых величина  $u$  неизвестна, т. е. для рассматриваемой задачи с граничными условиями Дирихле в 81 узле. В каждом из этих узлов должно удовлетворяться разностное уравнение, поэтому одновременно надо решить 81 линейное алгебраическое уравнение с 81 неизвестными. Математически такую

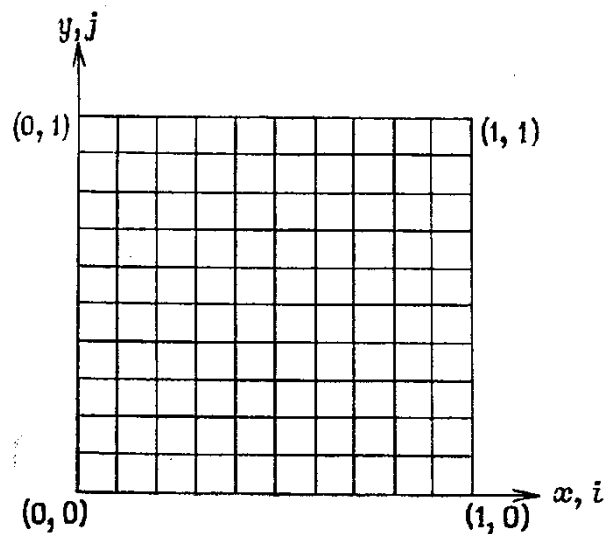


Рис. 4.10. Конечно-разностная сетка для решения уравнения Лапласа.

систему уравнений можно записать в виде компактном:  $[A]u = C$  где  $[A]$  — известная матрица коэффициентов, и  $C$  вектор-столбец, элементы которого надо определить, а  $C$  — известный вектор-столбец или по-другому:

$$\begin{aligned}
a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + \dots + a_{1n}u_n &= c_1, \\
a_{21}u_1 + a_{22}u_2 + \dots + a_{2n}u_n &= c_2, \\
&\vdots \\
&\vdots \\
&\vdots \\
a_{n1}u_1 + a_{n2}u_2 + \dots + a_{nn}u_n &= c_n,
\end{aligned}$$

Стоит заметить, что матрица коэффициентов разреженная, так как 76 из 81 величины  $a$  в каждой строке равны нулю. Для того чтобы получить наиболее простую систему алгебраических уравнений, положим  $\Delta x = \Delta y$ . Если  $\Delta x \neq \Delta y$ , то выражения для коэффициентов уравнения становятся немного более сложными, но система алгебраических уравнений остается линейной и также может быть записана в виде  $[A]u = C$ .

**Пример.** Рассмотрим стационарную задачу о распределении давления в нефтяном пласте при работе трех нагнетательных и одной добывающей скважины на площади  $32 \times 32 \text{ м}^2$ . Нагнетательные и добывающие скважины будем моделировать как точечные источники и стоки. Тогда, задача сводится к решению уравнения Пуассона:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = f(x, y)$$

(4.64)

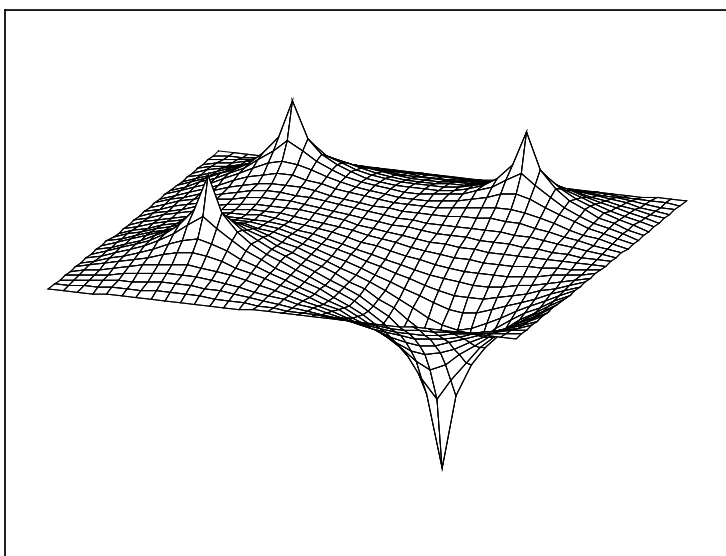
Используя, пятиточечную схему, разностную схему можем записать так:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} = f(x_i, y_i)$$

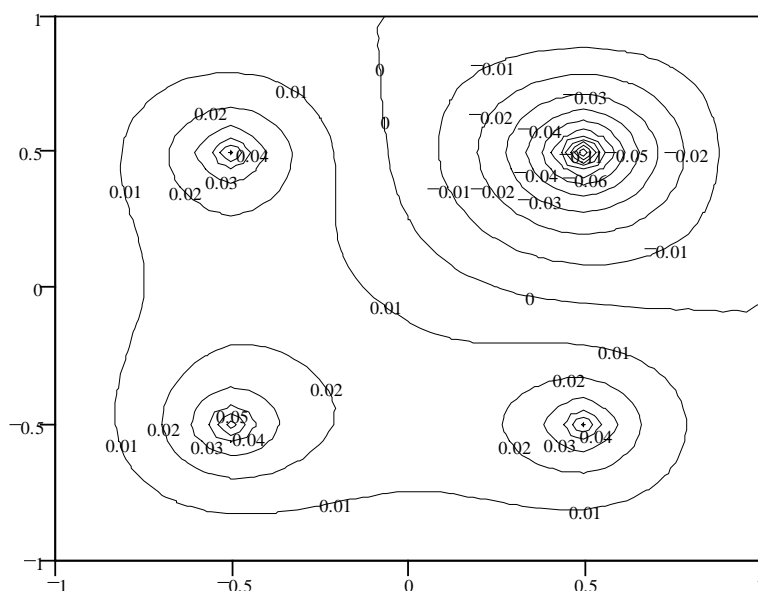
(4.65)

Решая систему алгебраических уравнений методом Зейделя, получим распределение давления в расчетной области (рис.4.11).





Pressure



Pressure

Рис.4.11. Стационарное распределение для перепада давления  $\Delta p/p_0$  в нефтяном пласте при наличии трех нагнетательных и одной добывающей скважины.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. *Вычислительная гидромеханика и теплообмен. Т.1.* - М.: Мир, 1990.
2. Бабенко К.И. *Основы численного анализа.* - М.: Наука, 1986.
3. Бахвалов Н.С. *Численные методы.* - М.: Наука, 1975.
4. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.Н. *Численные методы.* - М.: Наука, 1987.
5. Березин И.С., Жидков Н.П. *Методы вычислений. Т.1.* - М.: Наука, 1966.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. *Методы вычислений. Т.2.* - М.: Физматгиз, 1962.
7. Гутер Р.С., Овчинский Б.В. *Элементы численного анализа и математической обработки результатов опыта.* - М.: Наука, 1970.
8. Дьяченко В.Ф. *Основные понятия вычислительной математики.* - М.: Наука, 1977.
9. Калиткин Н.Н. *Численные методы.* - М.: Наука, 1978.
10. Копченова Н.В., Марон И.А. *Вычислительная математика в примерах и задачах.* - М.: Наука, 1972.
11. Ортега Дж., Пул У. *Введение в численные методы решения.* - М.: Наука, 1986.
12. Рихтмайер Р., Мортон К. *Разностные методы решения краевых задач.* - М.: Мир, 1972.
13. Самарский А.А. *Введение в численные методы.* - М.: Наука, 1987.
14. Самарский А.А., Гулин А.В. *Численные методы.* - М.: Наука, 1989.
15. Тихонов А.Н., Костомаров Д.П. *Вводные лекции по прикладной математике.* - М.: Наука, 1984.
16. Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. *Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи.* - М.: Мир, 1990.

Рашит Ямгитдинович Кучумов  
Виль Ромэнович Сыртланов  
Наиль Габсалямович Мусакаев

## МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Лицензия ЛРН<sup>№</sup>015071 от 28.12.93

Формат 60x84/16. Тираж 250 экз.

Отпечатано с готового набора в типографии издательства  
«Вектор-БУК».

Россия, г. Тюмень,  
ул. Володарского, 45.  
Тел. (3452) 29-33-57