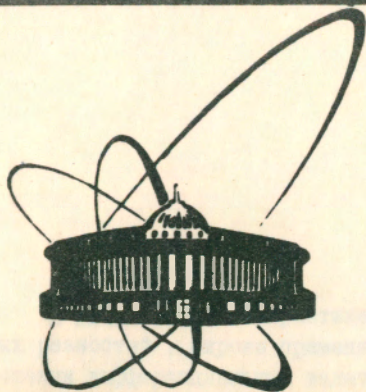


98-49



♀  
ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

Ж 306

P11-90-49

Т. Жанлав

О ТРЕХТОЧЕЧНОЙ СПЛАЙН-СХЕМЕ  
ПОВЫШЕННОЙ ТОЧНОСТИ

Направлено в "Журнал вычислительной математики  
и математической физики"

1990

## ВВЕДЕНИЕ

В вычислительной практике, наряду с традиционным методом конечных разностей, широко применяется метод сплайн-коллокации<sup>/1-3/</sup>. При решении дифференциальных задач второго порядка как с точки зрения простоты реализации алгоритма на ЭВМ, так и с точки зрения скорости сходимости наиболее подходящим является кубический сплайн класса  $C^2$ . В последнее время интенсивно развиваются<sup>/1,4-6/</sup> методы построения сплайн-схем повышенной точности. Обычно они сводятся к решению систем с пятидиагональными матрицами.

С другой стороны, хорошо известны<sup>/7-9/</sup> разностные методы повышенной точности, реализация которых сводится к решению простой трехдиагональной системы. Недавно в работе<sup>/6/</sup> был предложен сплайн-метод повышенной точности, приводящий к трехдиагональным системам. Однако эти методы были построены на равномерной сетке только для дифференциальных уравнений второго порядка, не содержащих первую производную решения.

В настоящей работе предлагается трехточечная сплайновая схема повышенной точности. Ее преимущества состоят в том, что она построена, во-первых, на неравномерной сетке и, во-вторых, для полных дифференциальных уравнений второго порядка с общими краевыми условиями.

В § 1 рассматривается квазиинтерполяционный сплайн, аппроксимирующий решение заданной дифференциальной задачи. Выводятся некоторые полезные формулы. На основе этих формул в § 2 строится схема и доказываются теоремы сходимости.

В § 3 метод распространяется на нелинейные дифференциальные уравнения второго порядка. При этом сначала нелинейная задача линеаризуется с помощью непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН). На каждом шаге итераций линейная краевая задача решается предложенным в § 2 методом.

В § 4 приводятся численные результаты как для линейных, так и для нелинейных задач.

## § I. Вывод вспомогательных формул

Рассмотрим краевую задачу

$$Lu \equiv u'' + p(x)u' + q(x)u = r(x), \quad x \in [a, b], \quad (I.1)$$

$$e_1 u \equiv \bar{\alpha}_1 u + \bar{\beta}_1 u' = \chi_1, \quad x = a, \quad (I.2)$$

$$e_2 u \equiv \bar{\alpha}_2 u + \bar{\beta}_2 u' = \chi_2, \quad x = b,$$

где  $\alpha_i > 0$ ,  $i = 1, 2$ ,  $\bar{\beta}_2 \geq 0$ ,  $\bar{\beta}_1 \leq 0$ ,  $q(x) < 0$ .

Пусть коэффициенты и правая часть уравнения (I.1) такие, что обеспечивают достаточную гладкость решения задачи (I.1) и (I.2). Введем на отрезке  $[a, b]$  сетку  $\Delta_N: a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$ ,  $h_i = x_{i+1} - x_i$ ,  $i = 0, \dots, N-1$ .  $\bar{h} = \max h_i$ ,  $\underline{h} = \min h_i$ . Сетку  $\Delta_N$  назовем регулярной, если  $\bar{h}/\underline{h} \sim O(1)$  и в дальнейшем мы будем рассматривать регулярную сетку. Дополняя сетку  $\Delta_N$  с узлами  $x_{-3} < x_{-2} < x_{-1} < x_0$ ,  $x_N < x_{N+1} < x_{N+2} < x_{N+3}$  (в частности, можно считать, что  $x_{-i} = x_0 - ih_0$ ,  $x_{N+i} = x_N + ih_{N-1}$ ,  $i = 1, 2, 3$ ) рассмотрим кубический сплайн класса  $C^2[a, b]$

$$S(x) = \sum_{j=-1}^{N+1} \alpha_j B_j(x), \quad (I.3)$$

где  $B_j(x)$  - нормализованные B-сплайны /I/.

Пусть коэффициенты сплайна (I.3) определяются формулами /IO/

$$\alpha_{-1} = u_0 - h_0 u_0' + \frac{h_0^2}{3} u_0'',$$

$$\alpha_i = u_i + \frac{h_i - h_{i-1}}{3} u_i' - \frac{h_i h_{i-1}}{6} u_i'', \quad i = 0, \dots, N, \quad (I.4)$$

$$\alpha_{N+1} = u_N + h_{N-1} u_N' + \frac{h_{N-1}^2}{3} u_N''.$$

Такой сплайн (I.3) называется квазиинтерполяционным сплайном, аппроксимирующим решение краевой задачи (I.1)-(I.2). Известно /IO/, что если  $u \in W_\infty^4[a, b]$ , то справедливы

$$\|S^{(\nu)} - u^{(\nu)}\|_C = O(\bar{h}^{4-\nu}), \quad \nu = 0, 1, 2. \quad (I.5)$$

Поскольку мы предполагали достаточную гладкость решения краевой задачи (I.1)-(I.2), то, очевидно, выполняется соотношение (I.5).

Далее из (I.4) легко получаем

$$\alpha_i = u_{i-1} + \frac{2h_{i-1} + h_i}{3} u'_{i-1} + \frac{(h_i + h_{i-1})h_{i-1}}{6} u''_{i-1} - \frac{(2h_i + h_{i-1})h_{i-1}^3}{72} u^{IV}_{i-1} + O(\bar{h}^5), \quad i=1, \dots, N, \quad (\text{I.6})$$

$$\alpha_i = u_{i+1} - \frac{2h_i + h_{i+1}}{3} u'_{i+1} + \frac{h_i(h_i + h_{i+1})}{6} u''_{i+1} - \frac{(2h_{i+1} + h_i)h_i^3}{72} u^{IV}_{i+1} + O(\bar{h}^5), \quad i=0, \dots, N-1. \quad (\text{I.7})$$

Теперь рассмотрим соотношения

$$u''_{i-1} + p_{i-1} u'_{i-1} + q_{i-1} u_{i-1} = r_{i-1}, \quad (\text{I.8})$$

$$- \frac{h_{i-2} h_{i-1}}{6} u''_{i-1} + \frac{h_{i-1} - h_{i-2}}{3} u'_{i-1} + u_{i-1} = \alpha_{i-1},$$

$$\frac{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})}{6} u''_{i-1} + \frac{2h_{i-1} + h_i}{3} u'_{i-1} + u_{i-1} = \alpha_i + \frac{h_{i-1}^3(2h_i + h_{i-1})}{72} u^{IV}_{i-1} + O(\bar{h}^5),$$

$$i=1, \dots, N,$$

которые можно решать как систему относительно величин  $u''_{i-1}$ ,  $u'_{i-1}$  и  $u_{i-1}$ . Легко показать, что определитель у этой системы отличен от нуля для достаточно малого  $\bar{h}$  и равен

$$\Delta_{1,i-1} = -\hat{h}_{i-1} \left(1 - \frac{h_{i-1}}{2} p_{i-1} + \frac{h_{i-1}^2}{6} q_{i-1}\right) \neq 0, \quad \hat{h}_i = \frac{h_{i-1} + h_i + h_{i+1}}{3}, \quad (\text{I.9})$$

В результате мы имеем

$$u_{i-1}^{(\nu)} = \tilde{u}_{i-1}^{(\nu)} + O(\bar{h}^3), \quad \nu = 0, 1, 2, \quad i=1, \dots, N, \quad (\text{I.10})$$

где

$$\tilde{u}_{i-1}'' = \frac{-\hat{h}_{i-1} r_{i-1} + (p_{i-1} - \frac{h_{i-1} - h_{i-2}}{3} q_{i-1}) \alpha_i + (\frac{2h_{i-1} + h_i}{3} q_{i-1} - p_{i-1}) \alpha_{i-1}}{\Delta_{1,i-1}}, \quad (\text{I.11})$$

$$\tilde{u}_{i-1}' = \frac{\frac{h_{i-1}}{2} \hat{h}_{i-1} r_{i-1} - (1 + \frac{h_{i-1} - h_{i-2}}{6} q_{i-1}) \alpha_i + (1 - \frac{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})}{6} q_{i-1}) \alpha_{i-1}}{\Delta_{1,i-1}},$$

$$\tilde{u}_{i-1} = \frac{-\frac{h_{i-1}^2}{6} \hat{h}_{i-1} z_{i-1} + \left(\frac{h_{i-1}-h_{i-2}}{3} + \frac{h_{i-1}-h_{i-2}}{6} p_{i-1}\right) \alpha_i - \left(\frac{2h_{i-1}+h_i}{3} - \frac{h_{i-1}(h_i+h_{i-1})}{6} p_{i-1}\right) \alpha_{i-1}}{\Delta_{1,i-1}}$$

$i = 1, \dots, N.$

Совершенно аналогично, рассматривая систему

$$u_{i+1}'' + p_{i+1} u_{i+1}' + q_{i+1} u_{i+1} = z_{i+1}, \quad (I.12)$$

$$-\frac{h_i h_{i+1}}{6} u_{i+1}'' + \frac{h_{i+1}-h_i}{3} u_{i+1}' + u_{i+1} = \alpha_{i+1},$$

$$\frac{h_i (h_i + h_{i-1})}{6} u_{i+1}'' - \frac{2h_i + h_{i-1}}{3} u_{i+1}' + u_{i+1} = \alpha_i + \frac{h_i^3 (2h_{i-1} + h_i)}{72} u_{i+1}^{IV} + O(\bar{h}^5),$$

$i = 0, \dots, N-1,$

найдем

$$u_{i+1}^{(z)} = \hat{u}_{i+1}^{(z)} + O(\bar{h}^3), \quad z = 0, 1, 2, \quad i = 0, \dots, N-1, \quad (I.13)$$

где

$$\hat{u}_{i+1}'' = \frac{\hat{h}_i z_{i+1} + \left(p_{i+1} - \frac{h_{i+1}-h_i}{3} q_{i+1}\right) \alpha_i - \left(p_{i+1} + \frac{2h_i+h_{i-1}}{3} q_{i+1}\right) \alpha_{i+1}}{\Delta_{2,i+1}},$$

$$\hat{u}_{i+1}' = \frac{\frac{h_i}{2} \hat{h}_i z_{i+1} - \left(1 + \frac{h_i h_{i+1}}{6} q_{i+1}\right) \alpha_i + \left(1 - \frac{h_i (h_i + h_{i-1})}{6} q_{i+1}\right) \alpha_{i+1}}{\Delta_{2,i+1}}, \quad (I.14)$$

$$\hat{u}_{i+1} = \frac{\frac{h_i^2}{6} \hat{h}_i z_{i+1} + \left(\frac{h_{i+1}-h_i}{3} + \frac{h_i h_{i+1}}{6} p_{i+1}\right) \alpha_i + \left(\frac{2h_i+h_{i-1}}{3} + \frac{h_i (h_i + h_{i-1})}{6} p_{i+1}\right) \alpha_{i+1}}{\Delta_{2,i+1}},$$

$$\Delta_{2,i+1} = \hat{h}_i \left(1 + \frac{h_i}{2} p_{i+1} + \frac{h_i^2}{6} q_{i+1}\right), \quad i = 0, \dots, N-1.$$

Далее из (I.10) и (I.13) с учетом (I.6) и (I.7) получаем

$$\frac{1}{h_i} u_{i+1}'' + \frac{1}{h_{i-1}} u_{i-1}'' = \frac{1}{h_i} \hat{u}_{i+1}'' + \frac{1}{h_{i-1}} \tilde{u}_{i-1}'' + O(\bar{h}^3) + O(\bar{h}(h_j - h_{j-1})), \quad (I.15)$$

$i-1 \leq j \leq i+1, \quad i = 1, \dots, N-1$

$$u_i'' = \frac{1}{2} (\bar{u}_i'' + \hat{u}_i'') + O(\bar{h}^4) + O(\bar{h}^2 (h_j - h_{j-1})),$$

$$u_i' = \frac{1}{2} (\bar{u}_i' + \hat{u}_i') + O(\bar{h}^4) + O(\bar{h}^2 (h_j - h_{j-1})),$$
(I.16)

$$i-1 \leq j \leq i+1, \quad i = 1, \dots, N-1.$$

Сетку  $\Delta_N$  назовем квазиравномерной, если выполняется условие

$$h_i - h_{i-1} = O(\bar{h}^2), \quad i = 1, \dots, N-1.$$
(I.17)

Таким образом, для квазиравномерной сетки (в частности, равномерной) остаточный член в (I.15) имеет порядок  $O(\bar{h}^3)$ , а в (I.16) —  $O(\bar{h}^4)$ . Далее из (I.3) с учетом (I.4) получаем

$$S_i' = u_i' + O(\bar{h}^4) + O(\bar{h}^2 (h_j - h_{j-1})),$$
(I.18)

$$S_i'' = u_i'' - \frac{E_i}{12} u_i^{IV} + O(\bar{h}^4) + O(\bar{h}^2 (h_j - h_{j-1})),$$

$$i = 1, \dots, N-1,$$

где

$$E_i = h_i^2 + h_{i-1} (h_{i-1} - h_i) + \frac{h_{i-1}^3 (h_{i-2} - h_i)}{6} B_{i-1}''(x_i) + \frac{h_i^3 (h_{i+1} - h_{i-1})}{6} B_{i+1}''(x_i). \quad (I.19)$$

## § 2. Построение схемы повышенной точности

Рассмотрим выражение  $LS$  в узлах сетки  $\Delta_N$ . Учитывая (I.5), (I.18), (I.19) и соотношение

$$u_i^{IV} = \frac{2}{h_i + h_{i-1}} \left( \frac{u_{i+1}'' - u_i''}{h_i} - \frac{u_i'' - u_{i-1}''}{h_{i-1}} \right) + O(\bar{h}^2) + O(h_i - h_{i-1}),$$

$$i = 1, \dots, N-1,$$
(2.1)

его можно записать в виде

$$LS_i = \tau_i - \frac{E_i}{6(h_i + h_{i-1})} \left[ -\frac{h_i + h_{i-1}}{h_i h_{i-1}} u_i'' + \left( \frac{1}{h_i} u_{i+1}'' + \frac{1}{h_{i-1}} u_{i-1}'' \right) \right] +$$

$$+ O(\bar{h}^4) + O(\bar{h}^2 (h_j - h_{j-1})), \quad i = 1, \dots, N-1.$$
(2.2)

Без потери точности можно заменить в (2.2)  $u''$  величиной  $v_i - p_i S'_i - q_i S_i$ , а  $u''_{i+1}/h_i + u''_{i-1}/h_{i-1}$  формулой (I.15). При этом полученное уравнение содержит лишь три коэффициента  $\alpha_{i-1}$ ,  $\alpha_i$  и  $\alpha_{i+1}$  и имеет вид

$$-A_i \alpha_{i-1} + C_i \alpha_i - B_i \alpha_{i+1} = F_i + O(\bar{h}^4) + O(\bar{h}^2(h_j - h_{j-1})), \quad (2.3)$$

$$i-1 \leq j \leq i-1, \quad i=1, \dots, N-1,$$

где

$$A_i = \frac{2}{(h_i + h_{i-1})\hat{h}_{i-1}} \left( 1 + D_i \left( -\frac{h_i}{2} p_i + \frac{h_i^2}{6} q_i \right) + \frac{E_i}{12 h_{i-1}} \cdot \frac{p_{i-1} - \frac{2h_{i-1} + h_i}{3} q_{i-1}}{d_{1,i}} \right),$$

$$B_i = \frac{2}{(h_i + h_{i-1})\hat{h}_i} \left( 1 + D_i \left( \frac{h_{i-1}}{2} p_i + \frac{h_{i-1}^2}{6} q_i \right) - \frac{E_i}{12 h_i} \cdot \frac{p_{i+1} + \frac{2h_i + h_{i-1}}{3} q_{i+1}}{d_{2,i}} \right),$$

$$C_i = A_i + B_i - \left[ D_i q_i - \frac{E_i}{6(h_i + h_{i-1})} \cdot \left( \frac{q_{i-1}}{h_{i-1} \cdot d_{1,i}} + \frac{q_{i+1}}{h_i \cdot d_{2,i}} \right) \right], \quad (2.4)$$

$$F_i = -D_i v_i + \frac{E_i}{6(h_i + h_{i-1})} \left( \frac{v_{i-1}}{h_{i-1} \cdot d_{1,i}} + \frac{v_{i+1}}{h_i \cdot d_{2,i}} \right),$$

$$D_i = 1 + \frac{E_i}{6 h_i h_{i-1}}, \quad d_{1i} = 1 - \frac{h_{i-1}}{2} p_{i-1} + \frac{h_{i-1}^2}{6} q_{i-1},$$

$$d_{2,i} = 1 + \frac{h_i}{2} p_{i+1} + \frac{h_i^2}{6} q_{i+1}, \quad i=1, \dots, N-1.$$

Далее из (I.10) и (I.13) с учетом краевых условий (I.2) легко следуют соотношения

$$C_0 \alpha_0 - B_0 \alpha_1 = F_0 + O(\bar{h}^4 \cdot \bar{\alpha}_1) + O(\bar{h}^3 \cdot \bar{\beta}_1), \quad (2.5)$$

$$-A_N \alpha_{N-1} + C_N \alpha_N = F_N + O(\bar{h}^4 \cdot \bar{\alpha}_2) + O(\bar{h}^3 \cdot \bar{\beta}_2),$$

где

$$C_0 = \frac{\bar{\alpha}_1 \left( \frac{2h_0 + h_1}{3} - \frac{h_0(h_0 + h_1)}{6} p_0 \right) - \bar{\beta}_1 \left( 1 - \frac{h_0(h_0 + h_1)}{6} q_0 \right)}{\hat{h}_0 \cdot d_{1,1}},$$

$$B_0 = \frac{\frac{h_0^2}{6} p_0 \bar{\alpha}_1 - \bar{\beta}_1 (1 + \frac{h_0^2}{6} q_0)}{\hat{h}_0 \cdot d_{1,1}}, \quad (2.6)$$

$$F_0 = \gamma_1 + \frac{\frac{h_0}{6} r_0 (-h_0 \bar{\alpha}_1 + 3\bar{\beta}_1)}{d_{1,1}},$$

$$C_N = \frac{\bar{\alpha}_2 \left( \frac{2h_{N-1} + h_{N-2}}{3} + \frac{h_{N-1}(h_{N-1} + h_{N-2})}{6} p_N \right) + \bar{\beta}_2 \left( 1 - \frac{h_{N-1}(h_{N-1} + h_{N-2})}{6} q_N \right)}{\hat{h}_{N-1} d_{2,N-1}},$$

$$A_N = \frac{\bar{\beta}_2 \left( 1 + \frac{h_{N-1}^2}{6} q_N \right) - \frac{h_{N-1}^2}{6} p_N \bar{\alpha}_2}{\hat{h}_{N-1} \cdot d_{2,N-1}}, \quad (2.7)$$

$$F_N = \gamma_2 - \frac{\frac{h_{N-1}}{6} r_N (h_{N-1} \bar{\alpha}_2 + 3\bar{\beta}_2)}{d_{2,N-1}}.$$

Теперь мы рассмотрим систему

$$\begin{aligned} C_0 v_0 - B_0 v_1 &= F_0, \\ -A_i v_{i-1} + C_i v_i - B_i v_{i+1} &= F_i, \quad i=1, \dots, N-1, \\ -A_N v_{N-1} + C_N v_N &= F_N, \end{aligned} \quad (2.8)$$

где коэффициенты и правая часть которой определяются формулами (2.4), (2.6) и (2.7).

Построим сплайн  $S_K = \sum_{j=1}^{N+1} v_j B_j(x)$ .

**Теорема I.** Пусть сплайн  $S_K$  удовлетворяет краевому условию (I.2) и его коэффициенты  $v_i$  ( $0 \leq i \leq N$ ) определяются из системы (2.8). Тогда для любой регулярной сетки  $\Delta_N$  с достаточно малым  $h$  справедливо



$$\|S_k - u\|_c = O(\bar{h}^3). \quad (2.9)$$

Доказательство. Пусть  $S$  -квазиинтерполяционный сплайн, аппроксимирующий решение краевой задачи (I.1)-(I.2). Обозначим  $z_i = \alpha_i - \beta_i$ . Тогда из равенств (2.3), (2.5) и уравнений (2.8) видно, что  $z_i$  удовлетворяют системе

$$\begin{aligned} C_0 z_0 - B_0 z_1 &= O(\bar{h}^4 \bar{\alpha}_1) + O(\bar{h}^3 \bar{\beta}_1), \\ -A_i z_{i-1} + C_i z_i - B_i z_{i+1} &= O(\bar{h}^4) + O(\bar{h}^2 (h_j - h_{j-1})), \\ & \quad i-1 \leq j \leq i+1, \quad i=1, \dots, N-1, \\ -A_N z_{N-1} + C_N z_N &= O(\bar{h}^4 \bar{\alpha}_2) + O(\bar{h}^3 \bar{\beta}_2). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Из выражений (2.4), (2.6) и (2.7) видно, что для регулярной сетки с достаточно малым  $\bar{h}$  имеет место

$$A_i > 0, \quad B_i > 0, \quad C_i > 0, \quad C_0 > 0, \quad C_N > 0, \\ i=1, \dots, N-1$$

В силу достаточной гладкости функций  $p$ ,  $q$  и  $\chi$  имеют место соотношения

$$R_i = C_i - A_i - B_i = -q_i + O(\bar{h}^2) > 0, \\ i=1, \dots, N-1, \quad (2.11)$$

$$R_0 = C_0 - |B_0| = \bar{\alpha}_1 + O(\bar{h}),$$

$$R_N = C_N - |A_N| = \bar{\alpha}_2 + O(\bar{h}).$$

Это означает, что система (2.10) имеет диагональное преобладание. Следовательно, из (2.10) имеем

$$z_i = O(\bar{h}^3), \quad i=0, \dots, N. \quad (2.12)$$

Так как сплайн  $S_k$  удовлетворяет краевому условию (I.2), то легко показать, что равенства (2.12) справедливы и для  $i=-1$  и  $i=N+1$ . Тогда из неравенства

$$\|S_K - u\| \leq \|S_K - S\| + \|S - u\|,$$

с учетом (2.12) и (1.5) сразу следует (2.9).

Теорема 2. Пусть сплайн  $S_K$  удовлетворяет первому краевому условию и его коэффициенты  $b_i$  ( $0 \leq i \leq N$ ) определяются из системы (2.8). Тогда для квазиравномерной (в частности, равномерной) сетки  $\Delta_N$  с достаточно малым  $\bar{h}$  справедливо

$$\|S_K - u\|_C = O(\bar{h}^4). \quad (2.13)$$

Доказательство. Величины  $z_i$ , как и раньше, удовлетворяют системе (2.10). Для квазиравномерной сетки правая часть системы (2.10) имеет порядок  $O(\bar{h}^4)$ , так как  $\bar{\beta}_1 = \bar{\beta}_2 = 0$ . Тогда из (2.10) получаем

$$z_i = O(\bar{h}^4), \quad i = 0, \dots, N \quad (2.14)$$

Отсюда и из условий интерполяции в точках  $x = x_0$  и  $x = x_N$  немедленно вытекает равенство (2.14) и при  $i = -1$ , и  $i = N+1$ . Дальнейшее рассуждение аналогично завершению доказательства теоремы 1.

Замечание. В случае третьей краевой задачи, т.е. при  $\beta_1 \neq 0$ , или  $\bar{\beta}_2 \neq 0$  из (2.10) видно, что только правые части первого и последнего уравнений в ней имеют порядок  $O(\bar{h}^3)$ , а правые части остальных уравнений в (2.10) имеют порядок  $O(\bar{h}^4)$  на квазиравномерной сетке. Однако такая локальная потеря согласованности точности, как утверждают авторы в [11], вовсе не обязательно снижает точность численного решения в целом.

Отметим также, что наша схема (2.8) отличается от трехточечной схемы в [6], в случае равномерной сетки, когда  $\rho(x) \equiv 0$ .

В результате решения системы (2.8) мы получаем сплайн  $S_K$ , являющийся близким к квазиинтерполяционному сплайну (1.3). Поэтому, как правило, его первые две производные тоже будут аппроксимировать соответствующие производные решения  $u(x)$  задачи (1.1)-(1.2). С другой стороны, из формул (1.15) видно, что коэффициенты квазиинтерполяционного сплайна представляют самостоятельный интерес с точки зрения аппроксимации производных решения краевой задачи. Поэтому по формулам (1.16), в которых роль  $\alpha_j$  играет теперь уже коэффициенты  $b_j$  сплайна  $S_K$ , можно приближенно вычислить производные  $u'_i$  и  $u''_i$  в узлах

$$x_i, \quad i = 1, \dots, N-1.$$

### § 3. Решение нелинейных дифференциальных задач

Рассмотрим задачу

$$u'' = f(x, u, u'), \quad x \in [a, b], \quad (3.1)$$

$$\bar{\ell}_1(u, u') = 0, \quad x = a, \quad (3.2)$$

$$\bar{\ell}_2(u, u') = 0, \quad x = b,$$

где  $\bar{\ell}_1, \bar{\ell}_2$  и  $f(x, u, u')$  - нелинейные операторы относительно  $u$  и  $u'$ . Предположим, что  $f(x, u, u')$  достаточное число раз непрерывно дифференцируема по последним двум аргументам, а  $\bar{\ell}_1$  и  $\bar{\ell}_2$  - дифференцируемые операторы. Предположим также, что решение задачи (3.1)-(3.2) изолированное, в случае неединственности. Одним из наиболее эффективных методов решения нелинейных задач является непрерывный аналог метода Ньютона /12-13/, который сводит к решению последовательности линейных задач

$$r_k'' - f_{u'}(x, u_k, u_k') r_k' - f_{uu}(x, u_k, u_k') r_k = f(x, u_k, u_k') - u_k'', \quad x \in [a, b], \quad (3.3)$$

$$\bar{\ell}_{1u}(u_k, u_k') r_k + \bar{\ell}_{1u'}(u_k, u_k') r_k' = -\bar{\ell}_1(u_k, u_k'), \quad x = a,$$

$$\bar{\ell}_{2u}(u_k, u_k') r_k + \bar{\ell}_{2u'}(u_k, u_k') r_k' = -\bar{\ell}_2(u_k, u_k'), \quad x = b$$

и последовательному вычислению следующего приближения по формуле

$$u_{k+1} = u_k + \tau_k v_k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.4)$$

Известно /12, 13/, что при выполнении определенных условий относительно производных  $f_u$  и  $f_{u'}$  в окрестности изолированного решения и выборе достаточно хорошего начального приближения имеет место сходимость итераций, т.е.

$$\|u - u_k\| \rightarrow 0, \quad \text{при } k \rightarrow \infty.$$

В итерационном процессе (3.4) играет важную роль выбор итерационного параметра  $\tau_k$ , от которого зависит как скорость сходимости, так и вообще сходимость. Существует оптимальный метод выбора параметра  $\tau_k$  /14, 15/. Очевидно, точность приближенного решения определяется тем, с какой точностью найдутся поправки  $v_k$ . Следовательно, с целью нахождения приближенного решения  $u_k$  с высокой точностью, можно применять предлагаемый в § 2 метод для численного решения линейных граничных задач (3.3).

Таблица I.

$x_i$	$N=10$				$N=20$			
	$s_i - u_i$	$s'_i - u'_i$	$\frac{\tilde{u}'_i + \hat{u}'_i}{2} - u'_i$	$\frac{\tilde{u}''_i + \hat{u}''_i}{2} - u''_i$	$s_i - u_i$	$s'_i - u'_i$	$\frac{\tilde{u}'_i + \hat{u}'_i}{2} - u'_i$	$\frac{\tilde{u}''_i + \hat{u}''_i}{2} - u''_i$
0	-0,242-03	-0,121-03	-	-	-0,171-04	-0,858-05	-	-
0,4	-0,104-03	0,424-03	0,527-03	-0,247-03	-0,737-05	0,556-04	0,756-04	-0,324-04
0,7	0,206-05	0,276-03	0,408-03	-0,261-03	0,887-06	0,438-04	0,634-04	-0,402-04
0,9	-0,713-04	-0,124-02	-0,251-02	0,190-02	-0,522-05	-0,179-03	-0,318-03	0,244-03
1,3	-0,513-04	0,117-02	0,131-02	-0,133-02	-0,895-06	0,192-03	0,243-03	-0,236-03
1,57	0,664-04	-0,411-04	-0,308-03	0,412-03	0,833-05	-0,693-05	-0,210-04	0,340-04
1,84	-0,438-04	-0,926-03	-0,218-02	0,202-02	-0,299-05	-0,173-03	-0,300-03	0,284-03
2,24	0,836-04	0,136-02	0,201-02	-0,139-02	0,828-05	0,183-03	0,281-03	-0,202-03
2,44	0,144-03	-0,390-03	-0,725-03	0,820-03	0,120-04	-0,537-04	-0,840-04	0,836-04
2,74	0,306-04	-0,388-03	-0,740-03	0,373-03	0,318-05	-0,533-04	-0,882-04	0,432-04
3,14	-0,843-04	0,170-03	-	-	-0,500-05	0,113-04	-	-

Примечание. Результаты получены на неравномерной сетке  $\Delta_N$  с 10 узлами.

Сетка с  $N=20$  узлами получена из основной сетки за счет разбиения каждого из интервалов  $[x_i, x_{i+1}]$  на две равные части.

Вычисление поправки  $V_k$  с высокой точностью может способствовать ускорению сходимости итерационного процесса (3.4).

### § 4. Результаты численных расчетов

4.1. Качество схемы проверено на ряде примеров.

Сначала рассмотрим линейную тестовую задачу

$$u'' + \sin x \cdot u' - xu = 2 \sin x (\cos x - 1 - x), \quad x \in [0, \pi],$$

$$u - 2u' = -4, \quad x = 0,$$

$$u + \frac{1}{2}u' = -1, \quad x = \pi.$$

Точное решение задачи имеет вид  $u(x) = 2 \cdot \sin x$ . В таблице I приведены численные результаты, полученные на неравномерной сетке с узлами  $X_i$ , которые подтверждают теоретический вывод относительно порядка сходимости приближенного решения.

В таблице 2 приведены численные результаты для первой (I) и третьей (III) краевой задач на равномерной сетке, в которой использованы обозначения

$$\varepsilon^{(z)} = \max_{0 \leq i \leq N} |S_i^{(z)} - u_i^{(z)}|, \quad z = 0, 1; \quad \tilde{\varepsilon}^{(z)} = \max_{1 \leq i \leq N-1} \left| \frac{\tilde{u}_i^{(z)} + \hat{u}_i^{(z)}}{2} - u_i^{(z)} \right|, \quad z = 1, 2.$$

Величины  $\tilde{u}_i^{(z)}$ ,  $\hat{u}_i^{(z)}$  определены по формуле (I.14) с заменой  $\alpha_j$  на  $\beta_j$ , найденные из системы (2.8).

Таблица 2

Погрешности	I			III		
	$h = \pi/10$	$h/2$	$h/4$	$h = \pi/10$	$h/2$	$h/4$
$\varepsilon$	0,563-04*	0,362-05	0,236-06	0,161-03	0,103-04	0,658-06
$\varepsilon'$	0,233-03	0,148-04	0,934-06	0,102-03	0,639-05	0,378-06
$\tilde{\varepsilon}'$	0,361-03	0,210-04	0,130-05	0,337-03	0,195-04	0,122-05
$\tilde{\varepsilon}''$	0,341-03	0,198-04	0,122-05	0,289-03	0,169-04	0,100-05

\*  $0,536 - 0,4 = 0,536 \cdot 10^{-4}$

Из таблицы 2 видно, что все величины  $\varepsilon^{(z)}$ ,  $\tilde{\varepsilon}^{(z)}$  примерно имеют порядок сходимости  $O(h^4)$ .

4.2. Рассмотрим одноканальную задачу рассеяния<sup>/16,17/</sup> с потенциалом  $U(r)$ , стремящимся к нулю на бесконечности

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) \right) u = 0,$$

$$u \sim r^{\ell+1}, \quad r \rightarrow 0,$$

$$u \sim \sin \left( kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta \right), \quad r \rightarrow \infty.$$
(4.1)

Потенциал  $U(r)$  может быть слабосингулярным в точке  $r=0$ . Задача состоит в вычислении фазы рассеяния  $\delta$  при заданном потенциале  $U(r)$ , орбитальном моменте  $\ell$  и энергии  $k^2$ . В<sup>/18/</sup> задача рассеяния (4.1) была сформулирована как нелинейная краевая задача относительно волновой функции  $u(x)$

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) \right) u = 0,$$

$$u = 0, \quad r = 0,$$

$$u'' + k^2 u^2 - k^2 = 0, \quad r \rightarrow \infty.$$
(4.2)

Для решения нелинейной задачи (4.2) можно применить НАМН с последующим решением линейных дифференциальных задач методом, алгоритм которого приведен в § 3. После решения задачи (4.2) фаза рассеяния вычисляется по формуле (6') в<sup>/18/</sup>. В качестве примера мы рассмотрим модельную задачу с потенциалом Морзе ( $\ell=0$ )

$$U(r) = D \left[ e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2 \cdot e^{-\alpha(r-r_0)} \right],$$
(4.3)

для которой известно точное значение фазы<sup>/19/</sup>

$$\delta = -k r_0 - \frac{k}{\alpha} \ln \left( 2 \frac{\sqrt{2MD}}{\alpha} \right) + \omega,$$

$$\omega = \arg \Gamma(1+2is) + \arg \Gamma \left( -\frac{\sqrt{2MD}}{\alpha} + \frac{1}{2} - is \right), \quad s = \frac{k}{\alpha};$$

Из (4.3) ясно, что при  $\alpha, r_0 > 0$  потенциал  $U(r)$  имеет асимптотическое поведение  $U \rightarrow \infty$  при  $r \rightarrow -\infty$ . В связи с этим, в отличие от (4.1), краевое условие для волновой функции ставится так:

$$u(r) = 0, \quad r \rightarrow -\infty.$$

Параметры в (4.3) выбраны  $\mathcal{D} = 0,104$ ,  $\alpha = 0,67$ ,  $z_0 = 2,09$ ,  $\mu = 8,876$ , и в таблице 3 приведены значения фазы рассеяния при различных  $K$  на последовательности равномерных сеток с шагами  $h$ ,  $h/2$  и  $h/4$ .

Таблица 3

$K$	$h = 0,1$ (12)	$h/2$ (3)	$h/4$ (2)
0,0001	-0,65594065-03	-0,65593610-03	-0,65593581-03
0,08	-0,52099437	-0,52099089	-0,52099069
0,1	-0,64867668	-0,64867237	-0,64867209
0,14	-0,89891548	-0,89891020	-0,89891008
0,2	-1,2583360	-1,2583278	-1,2583270

Задача решена на  $[-5,35]$ . Итерационный процесс прекращается, когда невязка уравнений по норме не превышает заданной точности  $\epsilon$  ( $\epsilon = 10^{-9}$ ). Уже при шаге  $h = 0,1$  найдены  $\delta_i$  с четырьмя верными цифрами после запятой, что демонстрирует большую эффективность предложенного алгоритма. В круглых скобках в таблице 3 указаны числа итераций. Видно, что требовалось всего два и три шага для того, чтобы сходился итерационный процесс на сетках с шагами  $h/2$  и  $h/4$ . Этот эффект является следствием того, что согласно теоремам 1 и 2 мы имеем хорошее приближение на всем интервале, и его можно взять за начальное приближение на следующей сетке с мелкими шагами.

4.3. Рассматривается задача на собственные значения

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + 2p(x) \frac{d}{dx} + q(x) - \lambda r(x) \right) y = 0, \quad x \in [a, b]. \quad (4.4)$$

$$\bar{\alpha}_1(\lambda)y + \bar{\beta}_1(\lambda)y' = 0, \quad x = a,$$

$$\bar{\alpha}_2(\lambda)y + \bar{\beta}_2(\lambda)y' = 0, \quad x = b.$$

Задачу (4.4) вместе с условием нормировки

$$(y, y) - 1 = 0 \quad (4.5)$$

можно рассматривать <sup>/15/</sup> как нелинейную задачу относительно пары  $\{\lambda, y\}$ . Сформулированная нелинейная задача (4.4), (4.5) решается НАМН с последующим применением алгоритма (2.8) для линеаризованной задачи. В качестве примера рассмотрим задачу (4.4) с коэффициентами  $p(x) \equiv 0$ ,  $r(x) \equiv 1$ ,  $q(x) = -2M \cdot U(x)$ ; где  $U$  - потенциал Морзе (4.3).

Этот потенциал при определенном выборе параметров используется для приближенных расчетов уровней энергии квантомеханической системы трех тел, взаимодействующих по закону Кулона. Частным случаем такой задачи является определение энергии связи мезомолекул, причем реальный потенциал мезомолекулы хорошо аппроксимируется потенциалом Морзе с соответствующими параметрами<sup>/20/</sup>. На отрезке  $[-5, 35]$  задача (4.4) рассматривалась с краевыми условиями

$$y = 0 \quad x = -5,$$

$$\sqrt{\lambda} y + y' = 0, \quad x = 35.$$

Параметры в потенциале (4.3) выбраны так:  $M = 4.69$ ,  $\alpha = 0.67$ ,  $\varrho = 0.1055$ ,  $\gamma_0 = 2, 15$ .

В таблице 4 приведены значения собственного значения  $\lambda$  и соответствующей ему собственной функции для мезомолекул  $pp\mu$  ( $\vartheta = 0$ ,  $\ell = 0$ ) на последовательности равномерных сеток с шагами  $h$ ,  $h/2$  и  $h/4$ .

Таблица 4

	x	$h = 0,2$ (13)	$h/2 = 0,1$ (3)	$h/4 = 0,05$ (3)	$\sigma$
y(x)	3	0,59271338	0,59271241	0,59271235	16,11
	7	0,92582300-01	0,92579711-01	0,92579547-01	15,78
	11	0,69771874-02	0,69768404-02	0,69768185-02	15,84
	15	0,50018631-03	0,50014926-03	0,50014692-03	15,83
	23	0,25524477-05	0,25521333-05	0,25521135-05	15,87
	31	0,13021629-07	0,13019389-07	0,13019247-07	15,77
$\lambda$		0,43530421	0,43531081	0,43531127	15,71

В последней колонке таблицы 4 вычислена величина  $\sigma$  по формуле

$$\sigma = \frac{z_h - z_{h/2}}{z_{h/2} - z_{h/4}},$$

теоретическое значение которой должно быть равным 16 для схемы, имеющей порядок аппроксимации  $O(h^4)$ . Результаты хорошо согласуются с результатами работы<sup>/20/</sup>.



## Литература

1. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.И. Методы сплайн-функций. - М.: Наука, 1980.
2. Ортега Дж., Пул У. Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений. Пер. с англ. - М.: Наука, 1986.
3. Ильин В.П. *ЖВМ и МФ*, 1978, т.18, № 3, с.620.
4. Жанлаз Т., Жидков Е.П. ОИИИ, РИИ-86-415, Дубна, 1986.
5. Жанлаз Т. ОИИИ, РИИ-89-343, Дубна, 1989.
6. Дронов С.Г., Лыгун А.А. Укр. мат. журн. 1989, т.41, № 5, с.703
7. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. - М.: Наука, 1987.
8. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Ред. Дж. Холл., Дж. Уатт, - М.: Мир, 1979.
9. Коллатц Л. Численные методы решения дифференциальных уравнений. Пер. с немец. - М.: Издательство иностранной литературы, 1953, с.459.
10. Жанлаз Т. В кн.: Методы сплайн-функций (вычислительные системы, вып.87). ИМ СО АН СССР, Новосибирск, 1981, с.3.
11. Пейре Р., Тейлор Т.Д. Вычислительные методы в задачах механики жидкости. - Ленинград, Гидрометеиздат, 1986,
12. Гавурин М.К. Изв. вузов, Матем., 1958, 5(6), с.18.
13. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, вып.1, с.127.
14. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. *ЖВМ и МФ*, 1981, т.21, № 2, с.491.
15. Пузынин И.В. Автореферат докторской диссертации. ОИИИ, ИИ-12016, Дубна, 1978.
16. Давыдов А.С. Квантовая механика. - М.: Наука, 1973.
17. Бабиков В.В. Методы фазовых функций в квантовой механике. - М.: Наука, 1988.
18. Жанлаз Т., Пузынин И.В., Ракитский А.В. ОИИИ, РИИ-88-823, Дубна, 1988.
19. Мележик В.С. ОИИИ, Р4-84-643, Дубна, 1984.
20. Пузынин И.В.; Пузынина Т.П., Стриж Т.А. ОИИИ, РИИ-87-332, Дубна, 1987.

Рукопись поступила в издательский отдел  
25 января 1990 года.