

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ И ИХ СИСТЕМ

В этой главе рассматриваются основные численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка и систем таких уравнений, а также решение краевых задач для ОДУ второго порядка.

1. Численные методы решения задачи Коши

Рассмотрим ОДУ первого порядка, записанное в общем виде:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y). \quad (1)$$

Известно, что его общее решение содержит произвольную константу C , т.е. является однопараметрическим семейством интегральных кривых

$$y(x) = \int f(x, y(x))dx + C. \quad (2)$$

Для выбора конкретной интегральной кривой следует определить значение константы C , для чего достаточно задать при каком-либо значении $x = x_0$ значение $y = y_0$. Поэтому задача Коши, позволяющая получить единственное решение уравнения (1), формулируется так: *Найти решение уравнения (1) с начальным условием $y = y_0$ при $x = x_0$.*

Решение задачи Коши для (1) на отрезке $[x_i, x_i + h]$ может быть записано в виде, аналогичном (2):

$$y(x_i + h) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_i+h} f(x, y(x))dx \quad (3)$$

или

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_i+h} f(x, y(x))dx,$$

где $y_{i+1} = y(x_{i+1})$, $y_i = y(x_i)$, $x_{i+1} = x_i + h$.

Наиболее распространенным подходом при вычислении интеграла в (3) является замена в подинтегральной функции полиномом невысокой степени, интеграл от которого вычисляется точно. Так, если $f(x, y)$ заменить полиномом нулевой степени, т.е. положить $f(x, y) = f(x_i, y_i)$ или $f(x, y) = f(x_{i+1}, y_{i+1})$, то получим соответственно явную и неявную формулы Эйлера:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i) \quad (4)$$

и

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_{i+1}) \quad (5)$$

В первом случае значение y_{i+1} находится непосредственно (явным образом), во втором - уже необходимо решать алгебраическое (как правило, нелинейное) уравнение.

Если подинтегральную функцию заменить полиномом первой степени $f(x, y) = f(x_i, y_i) + (x - x_i)[f(x_{i+1}, y_{i+1}) - f(x_i, y_i)]/h$, то получим также алгебраическое уравнение $y_{i+1} = y_i + h \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]/2$.

Заметим, что правая часть этого уравнения при малых h удовлетворяет принципу сжатых отображений и его можно решать методом простых итераций

$y_{i+1}^{(n+1)} = y_i + h \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(n)})]/2$, $n = 0, 1, \dots$. При этом оказывается, что если $y_{i+1}^{(0)}$ вычисляется по явной формуле Эйлера, то дальнейшие итерации не приводят к повышению порядка точности по h и пара формул

$$\begin{aligned} y_{i+1}^* &= y_i + h \cdot f(x_i, y_i) \\ y_{i+1} &= y_i + h \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^*)]/2 \end{aligned} \quad (6)$$

называется формулой Эйлера с пересчетом и имеет второй порядок точности. Ее можно видоизменить, если воспользоваться для вычисления интеграла формулой

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x, y(x)) dx \approx h/2 \cdot f(x_{i+1/2}, y_{i+1/2}),$$

где $x_{i+1/2} = x_i + h/2$, $y_{i+1/2} = y(x_{i+1/2})$, имеющей второй порядок точности:

$$\begin{aligned} y_{i+1/2} &= y_i + h/2 \cdot f(x_i, y_i), \\ y_{i+1} &= y_i + h \cdot f(x_{i+1/2}, y_{i+1/2}) \end{aligned} \quad (7)$$

Полученная формула является частным случаем методов Рунге-Кутты.

2. Методы Рунге-Кутты

Немецкие математики Рунге и Кутт независимо предложили способ построения семейства методов произвольного порядка точности численного решения задачи Коши для ОДУ. Суть этого способа заключается в следующем. Строятся последовательности

$$\begin{aligned}
k_1(h) &= h \cdot f(x, y), \\
k_2(h) &= h \cdot f(x + \alpha_2 h, y + \beta_{21} k_1(h)), \\
k_3(h) &= h \cdot f(x + \alpha_3 h, y + \beta_{31} k_1(h) + \beta_{32} k_2(h)), \\
&\dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots, \\
k_q(h) &= h \cdot f(x + \alpha_q h, y + \beta_{q1} k_1(h) + \dots + \beta_{q, q-1} k_{q-1}(h)),
\end{aligned}$$

и полагается

$$y(x+h) \approx y(x) + \sum_{n=1}^q p_n k_n(h), \quad (8)$$

где $\alpha_n, p_n, \beta_{nj}, 0 < j < n \leq q$ - некоторые фиксированные числа (параметры).

Рассмотрим вопрос о выборе этих параметров. Обозначим через

$$\varphi(h) = y(x+h) - [y(x) + \sum_{n=1}^q p_n k_n(h)]$$

погрешность метода на шаге интегрирования. Понятно, что если $f(x, y)$ - достаточно гладкая функция своих аргументов, то $k_1(h), k_2(h), \dots, k_q(h)$ - тоже гладкие функции параметра h . Тогда $\varphi(h)$ можно разложить в конечный ряд Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа в окрестности $h = 0$:

$$\varphi(h) = \sum_{n=0}^s \frac{\varphi^{(n)}(0)}{n!} h^n + \frac{\varphi^{(s+1)}(\Theta h)}{(s+1)!} h^{s+1}, \quad 0 < \Theta < 1$$

и если параметры $\alpha_n, p_n, \beta_{nj}$ в (8) выбрать так, чтобы

$\varphi(0) = \varphi^{(1)}(0) = \dots = \varphi^{(s)}(0) = 0$ для как можно больших значений s , то величина погрешности

$$\varphi(h) = \frac{\varphi^{(s+1)}(\Theta h)}{(s+1)!} h^{s+1}$$

за счет увеличения значения q (а, следовательно, и s) может быть сделана как угодно малой. Полученное при этом значение s называется порядком погрешности метода.

Пример. Пусть $q = 1$. Тогда

$$\varphi(h) = y(x+h) - y(x) - p_1 h f(x, y), \quad \varphi(0) = 0,$$

$$\varphi^{(1)}(h) = [y^{(1)}(x+h) - y(x) - p_1 f(x, y)]_{h=0} = f(x, y)(1 - p_1),$$

$$\varphi^{(2)}(h) = y^{(2)}(x+h)$$

Равенство $\varphi^{(1)}(0) = 0$ выполняется при $p_1 = 1$, а $\varphi^{(2)}(0) \neq 0$. Тогда $s = 1$, и мы имеем метод Эйлера

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i). \quad (9)$$

Его погрешность $\varphi(h) = y^{(2)}(x + \Theta h) / 2 \cdot h^2$ на шаге интегрирования.

Аналогично получаются формулы методов Рунге-Кутты более высоких порядков точности. Приведём их без вывода.

При $q = 2, s = 2, p_1 = 0, p_2 = 1, \alpha_2 = 0.5, \beta_{21} = 0.5,$

$$k_1 = h \cdot f(x, y), k_2 = h \cdot f(x + h/2, y + k_1/2),$$

$$y_{i+1} = y_i + k_2, \varphi(h) = O(h^3), \quad (10)$$

(совпадает с формулой (7)).

При $q = 3, s = 3,$

$$k_1 = h \cdot f(x, y), k_2 = h \cdot f(x + h/2, y + k_1/2),$$

$$k_3 = h \cdot f(x + h, y - k_1 + 2k_2),$$

$$y_{i+1} = y_i + (k_1 + 4k_2 + k_3)/6, \varphi(h) = O(h^4). \quad (11)$$

При $q = 4, s = 4,$

$$k_1 = h \cdot f(x, y), k_2 = h \cdot f(x + h/2, y + k_1/2),$$

$$k_3 = h \cdot f(x + h/2, y + k_2/2), k_4 = h \cdot f(x + h, y + k_3),$$

$$y_{i+1} = y_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6, \varphi(h) = O(h^5). \quad (12)$$

Для практической оценки точности методов Рунге-Кутты можно воспользоваться следующим обстоятельством. Главный член погрешности на шаге интегрирования есть

$$\varphi(h) = \frac{\varphi^{(s+1)}(0)}{(s+1)!} h^{s+1} + \frac{\varphi^{(s+2)}(\Theta_1 h)}{(s+2)!} h^{s+2}, \quad 0 < \Theta_1 < 1$$

Точка $(x+h, y(x+h))$ находится достаточно близко от точки (x, y) и поэтому погрешность на следующем шаге интегрирования будет иметь тот же главный член. В результате на двух половинных шагах $(h/2)$ будет получено приближение $y^{(1)}$ к значению $y(x+h)$ такое, что

$$y^{(1)} - y(x+h) \approx 2 \frac{\varphi^{(s+1)}(0)(h/2)^{s+1}}{(s+1)!}$$

Если же исходя из точки (x, y) , сделать один шаг величиной h , то получим приближение $y^{(2)}$, для которого

$$y^{(2)} - y(x+h) \approx \frac{\varphi^{(s+1)}(0)(h)^{s+1}}{(s+1)!}$$

Из этих соотношений вытекает представление главного члена погрешности на шаге h :

$$y^{(1)} - y(x+h) \approx \frac{y^{(2)} - y^{(1)}}{2^s - 1} \quad (13)$$

Учитывая этот главный член погрешности, можно уточнить полученное приближенное решение в точке $(x+h)$:

$$y(x+h) \approx y^{(1)} + \frac{y^{(1)} - y^{(2)}}{2^s - 1}$$

Оценку погрешности, определяемую по формуле (13), можно использовать для автоматического выбора шага интегрирования при проведении расчетов с заданной точностью.

3. Решение систем ОДУ

Система ОДУ в общем виде может быть записана следующим образом:

$$\frac{dy_j}{dx} = f_j(x, y_1, y_2, \dots, y_n), \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (18)$$

или в векторном виде

$$\frac{d\vec{y}}{dx} = \vec{f}(x, \vec{y}).$$

Если при этом правая часть не зависит от x , то система ОДУ называется автономной, и неавтономной в противном случае. Заметим, что неавтономная система может быть легко приведена к автономной путем добавления еще одного уравнения для x .

Задача Коши для систем ОДУ формулируется совершенно аналогично: *найти решение системы ОДУ (18) с начальными условиями $y_j(x_0) = y_j^0$ при $x = x_0$* . К решению задачи Коши для системы ОДУ сводится также задача Коши для ОДУ высших порядков

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y^{(1)}, \dots, y^{(n-1)}),$$

$$y(x_0) = \varphi_0, y^{(1)}(x_0) = \varphi_1, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = \varphi_{n-1}$$

путем замены переменных $z_k(x) = y^{(k)}(x)$, $k = 1, 2, \dots, n-1$. В результате получается система из n уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= z_1, \\ \frac{dz_1}{dx} &= z_2, \\ &\vdots \\ \frac{dz_{n-1}}{dx} &= f(x, y, z_1, \dots, z_{n-1}) \end{aligned}$$

Для решения систем ОДУ полностью применимы все рассмотренные выше методы, так как они легко обобщаются на случай векторных величин.

4. Решение систем "жестких" уравнений

При решении систем ОДУ с помощью большинства рассмотренных выше методов довольно часто оказывалось, что уже на первых шагах интегрирования в численном решении появляются осцилляции с быстро нарастающей амплитудой, приводящей к "авосту". При уменьшении шага интегрирования эти осцилляции пропадали, но величина шага оказывалась настолько малой, что проведение расчетов становилось нереальным. Анализ возникшей ситуации показал, что причиной этого является зависимость правой части системы от y_j , что и привело к появлению понятия "жесткая" система ОДУ. Для простоты будем рассматривать далее только автономные системы.

Определение. Если для системы ОДУ вида

$$\frac{dy_j}{dx} = f_j(y_1, y_2, \dots, y_n), \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (19)$$

все вещественные части матрицы Якоби $J = \left(\frac{\partial f_j}{\partial y_k} \right)$ ($j, k = 1, 2, \dots, n$)

отрицательны и имеют большой разброс по модулю, т. е. $\text{Re}(\lambda_j(J)) < 0$, $\max |\text{Re}(\lambda_j(J))| \gg \min |\text{Re}(\lambda_j(J))|$, то такую систему называют жесткой.

Линеаризуем (19) на шаге интегрирования, т.е. на интервале $[x_i, x_{i+1}]$:

$$\frac{d\vec{y}}{dx} = \left(\frac{\partial f_j}{\partial y_k} \right)_i (\vec{y} - \vec{y}_i) + \vec{f}_i$$

где \vec{y}_i, \vec{f}_i - известные значения векторов на левой границе интервала (как начальные данные задачи Коши). Не умаляя общности, их можно включить в эти начальные данные и тогда линеаризованная система (19) запишется в виде:

$$\frac{d\vec{y}}{dx} = \left(\frac{\partial f_j}{\partial y_k} \right)_i \vec{y} = J(x_i) \vec{y}$$

или

$$\frac{d\vec{y}}{dx} = A \vec{y}, \quad A = J(x_i) \text{ - числовая матрица.} \quad (20)$$

Наряду с системой (19) рассмотрим ее скалярный аналог

$$\frac{dy}{dx} = \alpha y, \quad \alpha < 0, \quad |\alpha| \gg 1, \quad x \geq 0, \quad y(0) = y_0, \quad (21)$$

представляющий собой ОДУ с малым параметром при старшей производной, которое часто называют также модельным уравнением для (20). Его точное решение есть $y = y_0 e^{\alpha x}$.

Запишем для (21) семейство методов Рунге-Кутты (9)- (12):

$$\begin{aligned} y_{i+1}^{(1)} &= y_i^{(1)} + \alpha h y_i^{(1)} = (1 + \alpha h) y_i^{(1)} = \lambda_1 y_i^{(1)}, \\ y_{i+1}^{(2)} &= (1 + \alpha h + \alpha^2 h^2 / 2) y_i^{(2)} = \lambda_2 y_i^{(2)}, \\ y_{i+1}^{(3)} &= (1 + \alpha h + \alpha^2 h^2 / 2 + \alpha^3 h^3 / 6) y_i^{(3)} = \lambda_3 y_i^{(3)}, \\ y_{i+1}^{(4)} &= (1 + \alpha h + \alpha^2 h^2 / 2 + \alpha^3 h^3 / 6 + \alpha^4 h^4 / 24) y_i^{(4)} = \lambda_4 y_i^{(4)}, \end{aligned}$$

где через λ_k ($k = 1, 2, 3, 4$) обозначены соответствующие выражения в круглых скобках, совпадающие с первыми $k+1$ членами разложения точного решения в ряд Тейлора в точке x_i при $x = x_i + h$. Это означает, что эти методы имеют порядок точности $O(h^{k+1})$ на шаге интегрирования, что полностью соответствует теории. Поскольку точное решение является убывающим, для численного решения должна выполняться цепочка неравенств

$$|y_{i+1}| \leq |y_i| \leq |y_{i-1}| \leq \dots \leq |y_0|,$$

известных в теории устойчивости разностных схем (см. главу 7) как принцип максимума. Это ограничение является достаточно сильным, но зато обеспечивает стремление к нулю ошибок численной аппроксимации (погрешности) при

стремлении числа шагов интегрирования к бесконечности. Методы решения (20), удовлетворяющие этим требованиям, называются А-устойчивыми методами. Заметим, что если вместо требования равномерной сходимости ограничиться сходимостью в среднем (например, в пространстве L_2), то класс методов, пригодных для решения (20), можно расширить, но при этом может иметь место колебание численного решения около точного, а это не всегда является приемлемым при решении прикладных задач. Выразим теперь последовательно каждое $y_i^{(k)}$ через предыдущее:

$$y_{i+1}^{(k)} = \lambda_k^{i+1} y_0^{(k)}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad k = 1, 2, 3, 4.$$

Тогда для выполнения принципа максимума

$$|y_{i+1}^{(k)}| = \lambda_k^{i+1} |y_0^{(k)}|, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad k = 1, 2, 3, 4$$

необходимо и достаточно, чтобы выполнялись условия

$$0 \leq \lambda_k \leq 1 \quad (22)$$

Отсюда сразу следуют ограничения на шаги интегрирования для явных методов (не только методов Рунге-Кутты) соответствующих порядков точности. Так, при $k = 1$ $\lambda_1 \leq h / |\alpha|$, при $k = 2$ $\lambda_2 \leq 2h / |\alpha|$ и т.д.

Семейство методов Рунге-Кутты для системы уравнений (20) запишется аналогично:

$$\begin{aligned} \bar{y}_{i+1}^{(1)} &= \bar{y}_i^{(1)} + A h \bar{y}_i^{(1)} = (E + A h) \bar{y}_i^{(1)} = \Lambda_1 \bar{y}_i^{(1)}, \\ \bar{y}_{i+1}^{(2)} &= (1 + A h + A^2 h^2 / 2) \bar{y}_i^{(2)} = \Lambda_2 \bar{y}_i^{(2)}, \\ \bar{y}_{i+1}^{(3)} &= (1 + A h + A^2 h^2 / 2 + A^3 h^3 / 6) \bar{y}_i^{(3)} = \Lambda_3 \bar{y}_i^{(3)}, \\ \bar{y}_{i+1}^{(4)} &= (1 + A h + A^2 h^2 / 2 + A^3 h^3 / 6 + A^4 h^4 / 24) \bar{y}_i^{(4)} = \Lambda_4 \bar{y}_i^{(4)}, \end{aligned}$$

(Λ_k - соответствующие матрицы) и в случае жесткой системы уравнений возникают аналогичные ограничения на шаг интегрирования $0 \leq \max |\lambda_j^{(k)}| \leq 1$, где $\max |\lambda_j^{(k)}|$ - максимальное по модулю собственное число матрицы Λ_k .

Рассмотрим теперь простейший неявный метод Эйлера (9) для решения модельного уравнения (21): $y_{i+1} = y_i + h \alpha y_{i+1}$ или

$$y_{i+1} = \frac{y_i}{(1 - h \alpha)} = \lambda y_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad (23)$$

где $\lambda = 1 / (1 - h \alpha)$. Выражая, как и раньше, y_{i+1} через предыдущие значения, имеем

$$y_{i+1} = y_0 / (1 - h \alpha)^i = \lambda^i y_0, \quad |y_{i+1}| \leq \lambda^i |y_0|,$$

причем уже для любых значений α выполняется условие $0 \leq \lambda \leq 1$ и, следовательно, имеет место принцип максимума, т.е. метод (23) не имеет ограничения по α на шаг интегрирования и является А-устойчивым.

Аналогично может быть записан неявный А-устойчивый метод Эйлера и для системы уравнений (20): $\vec{y}_{i+1} = \vec{y}_i + h A \vec{y}_{i+1}$ или

$$\vec{y}_{i+1} = (E - hA)^{-1} \vec{y}_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots,$$

но здесь уже требуется вычисление обратной матрицы.

Рассмотрим теперь, как построить такие методы более высокого порядка точности. Один из подходов к построению семейства неявных А-устойчивых методов произвольного порядка точности был предложен автором. Запишем (20) в виде

$$\vec{y}_{i+1} = \vec{y}_i + \int_0^h A \vec{y} dz, \quad z = x - x_i, \quad h = x_{i+1} - x_i.$$

Аппроксимируем подынтегральную функцию многочленом Тейлора, разложив ее в ряд в окрестности точки $x + h$. Для числовой матрицы А многочлен Тейлора (конечный отрезок ряда Тейлора) порядка s имеет вид

$$A \vec{y} = A(\vec{y}_{i+1} + \vec{y}_{i+1}^{(1)}(z - h) + \vec{y}_{i+1}^{(2)}(z - h)^2 / 2 + \dots + \vec{y}_{i+1}^{(s)}(z - h)^s / s!).$$

Производные вычисляются путем дифференцирования (20) необходимое число раз. Так, например, $\vec{y}^{(2)} = \frac{d\vec{y}^{(1)}}{dx} = \frac{d(A\vec{y})}{dx} = A^2\vec{y}$.

Интеграл вычисляется аналитически:

$$\int_0^h A \vec{y} dz = A(\vec{y}_{i+1}h - A \vec{y}_{i+1}h^2 / 2 + \dots + (-1)^s A^{s-1} \vec{y}_{i+1}h^s / s!).$$

Тогда схема s -го порядка точности запишется

$$\vec{y}_{i+1} = (E - hA + h^2 / 2A^2 + \dots + (-1)^s h^s / s! A^s)^{-1} \vec{y}_i \quad (24)$$

Для уравнения (21) это семейство схем имеет более простой вид:

$$y_{i+1} = y_i / (1 - h\alpha + h^2 / 2\alpha^2 + \dots + (-1)^s h^s / s! \alpha^s) \quad (25)$$

Видно, что случай $s = 1$ соответствует неявной схеме Эйлера.

5. Решение краевых задач для ОДУ второго порядка

Рассмотрим линейное ОДУ второго порядка общего вида

$$\frac{d^2u}{dx^2} + p(x)\frac{du}{dx} + q(x)u = f(x) \quad (26)$$

или, вводя дифференциальный оператор $L = \frac{d^2}{dx^2} + p(x)\frac{d}{dx} + q(x)$, запишем его в операторном виде $Lu = f(x)$. Пусть это уравнение определено на отрезке $[a, b]$ и удовлетворяет на нем двум краевым условиям:

$$\begin{aligned} l_0u &\equiv \alpha_0u(a) + \beta_0u'(a) = \gamma_0, \\ l_1u &\equiv \alpha_1u(b) + \beta_1u'(b) = \gamma_1, \end{aligned} \quad (27)$$

где $l_0 = \alpha_0 + \beta_0\frac{d}{dx}$, $l_1 = \alpha_1 + \beta_1\frac{d}{dx}$, $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ - заданные числа, $p(x), q(x)$ - непрерывные функции. Если при этом $\alpha_j = 0, \beta_j = 0$ ($j = 0, 1$), то говорят, что заданы краевые условия первого рода, если $\alpha_j = 0, \beta_j \neq 0$, то - второго, и если $\alpha_j \neq 0, \beta_j \neq 0$, то третьего.

В отличие от задачи Коши, имеющей всегда единственное решение, краевая задача может иметь одно решение, бесконечное множество решений или же не иметь его совсем. Здесь имеет место следующая теорема.

Теорема. Для того чтобы существовало единственное решение неоднородной краевой задачи (26), (27), необходимо и достаточно, чтобы соответствующая однородная краевая задача

$$\begin{aligned} \frac{d^2u}{dx^2} + p(x)\frac{du}{dx} + q(x)u &= 0 \\ l_0u &\equiv \alpha_0u(a) + \beta_0u'(a) = 0, \\ l_1u &\equiv \alpha_1u(b) + \beta_1u'(b) = 0, \end{aligned}$$

имела бы только тривиальное решение $u(x) \equiv 0$.

Это условие теоремы далеко не всегда удается проверить и чаще всего о существовании единственного решения судят по физической сущности решаемой задачи. Например, уравнение

$$\frac{d^2u}{dx^2} = f(x), \quad a \leq x \leq b \quad (28)$$

описывает распределение температуры в тонком стержне с внутренним распределенным источником тепла. Рассмотрим для нее краевые условия (27).

Однородное уравнение $\frac{d^2u}{dx^2} = 0$ имеет решение $u(x) = C_1x + C_2$ и для однородных краевых условий первого рода $u(x) \equiv 0$ при $C_1 = C_2 = 0$, т. е. первая краевая задача для неоднородного уравнения имеет единственное решение. В случае же второй краевой задачи решением однородной задачи является $u(x) = C_2$, в общем случае не равное тождественно нулю. Поэтому решение соответствующей неоднородной задачи будет не единственным. Рассмотрим физические соображения. Проинтегрировав (28), получим

$$u'(b) - u'(a) = \int_a^b f(x) dx = \gamma_1 - \gamma_0.$$

Это выражение отражает закон сохранения количества тепла ($u'(a)$ и $u'(b)$ пропорциональны тепловым потокам через соответствующие границы), и из него следует, что для существования решения γ_0 и γ_1 не могут быть заданы произвольно. Поэтому в дальнейшем, чтобы не связывать себя с проблемами существования и единственности решения уравнения (26) с условиями (27), мы будем рассматривать исключительно первую краевую задачу.

Рассмотрим два основных подхода к решению краевых задач: семейство методов, основанных на использовании базисных функций и метод конечных разностей.

5.1. Методы базисных функций

Зададимся на $[a, b]$ некоторой системой линейно-независимых функций $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ таких, что $\varphi_0(x)$ удовлетворяет краевым условиям $l_0\varphi_0(a) = \gamma_0, l_0\varphi_0(b) = \gamma_1$, а остальные $\varphi_k(x)$ удовлетворяют однородным краевым условиям, т.е. $l_0\varphi_k(a) = 0, l_0\varphi_k(b) = 0, k = 1, 2, \dots, n$. Заданная система функций называется базисной.

Представим приближенное решение уравнения (26) в виде линейной комбинации этих функций

$$y_n(x) = \varphi_0(x) + \sum_{k=1}^n \alpha_k \varphi_k(x) \quad (29)$$

с неизвестными пока коэффициентами $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$. При этом $y_n(x)$ при любых значениях $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ удовлетворяет краевым условиям. Действительно:

$$l_0 y_n = l_0(\varphi_0 + \sum_{k=1}^n \alpha_k \varphi_k) = l_0 \varphi_0 + \sum_{k=1}^n \alpha_k l_0 \varphi_k = \gamma_0$$

$$\begin{aligned}
l_h u_0 &\equiv \alpha_0 u_0 + \beta_0 \frac{u_1 - u_0}{h} = \gamma_0, \\
l_h u_N &\equiv \alpha_1 u_N + \beta_1 \frac{u_N - u_{N-1}}{h} = \gamma_1,
\end{aligned} \tag{34}$$

которые в данном случае аппроксимируются с порядком $O(h)$, поскольку производные в (27) заменяются односторонними разностями. Такая «двухточечная» аппроксимация граничных условий важна для реализации метода прогонки как эффективного средства решения разностного уравнения (33). В дальнейшем покажем как можно повысить порядок двухточечной аппроксимации до второго. Заметим, что в случае первой краевой задачи аппроксимация краевых условий всегда точная.

Если в (33), (34) формально заменить u_i на y_i , то мы получим для $N+1$ сеточной функции y_i систему из $N+1$ линейных алгебраических уравнений:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q_i y_i = f_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \tag{35}$$

$$\alpha_0 y_0 + \beta_0 \frac{y_1 - y_0}{h} = \gamma_0, \tag{36}$$

$$\alpha_1 y_N + \beta_1 \frac{y_N - y_{N-1}}{h} = \gamma_1,$$

т.е. мы на $[a, b]$ заменили краевую дифференциальную задачу разностной, которая называется разностной схемой. Согласно изложенному выше, при неограниченном измельчении шага сетки ($h \rightarrow 0$) $y_i \rightarrow u(x_i)$. Иными словами, решение (35), (36) будет сколь угодно мало отличаться от точного решения задачи (26), (27) в узлах этой сетки.

Порядок аппроксимации такой разностной схемы равен наименьшему из порядков аппроксимации во внутренних и в граничных узлах разностной сетки. Поэтому схема (35), (36) имеет только первый порядок аппроксимации. Покажем теперь, как повысить порядок аппроксимации до второго, оставаясь в рамках «двухточечной» аппроксимации краевых условий. Аппроксимируем производные в (27) односторонними разностями со вторым порядком точности и запишем разностную схему в следующем виде

$$\begin{aligned}
A_i y_{i-1} + C_i y_i + B_i y_{i+1} &= F_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \\
\alpha_0 y_0 + \beta_0 \frac{-3y_1 + 4y_0 - y_2}{2h} &= \gamma_0, \\
\alpha_1 y_N + \beta_1 \frac{y_{N-2} - 4y_{N-1} + 3y_N}{2h} &= \gamma_1,
\end{aligned} \tag{37}$$

где $A_i = 1/h^2 - p_i/(2h)$, $B_i = 1/h^2 + p_i/(2h)$, $C_i = q_i - 2/h^2$, $F_i = f_i$.

На левой границе ($i = 0$) исключая величину y_2 из имеющей здесь место системы уравнений

$$\begin{aligned} A_1 y_0 + C_1 y_1 + B_1 y_2 &= F_1 \\ \alpha_0 y_0 + \beta_0 \frac{-3y_1 + 4y_0 - y_2}{2h} &= \gamma_0, \end{aligned}$$

получим «двухточечную» аппроксимацию левого краевого условия со вторым порядком точности:

$$\left[\alpha_0 + \frac{\beta_0}{h} \left(2 + \frac{A_1}{2B_1} \right) \right] y_0 + \frac{\beta_0}{2h} \left(\frac{C_1}{B_1} - 3 \right) y_1 = \gamma_0 + \frac{\beta_0}{2h} \frac{F_1}{B_1} \quad (38)$$

Совершенно аналогично, исключая при $i=N$ величину y_{N-2} из системы уравнений

$$\begin{aligned} A_{N-1} y_{N-2} + C_{N-1} y_{N-1} + B_{N-1} y_N &= F_{N-1} \\ \alpha_1 y_N + \beta_1 \frac{y_{N-2} - 4y_{N-1} + 3y_N}{2h} &= \gamma_1, \end{aligned}$$

запишем аппроксимацию правого краевого условия:

$$\left[\alpha_1 + \frac{\beta_1}{2h} \left(3 - \frac{B_{N-1}}{A_{N-1}} \right) \right] y_N - \frac{\beta_1}{h} \left(\frac{C_{N-1}}{2A_{N-1}} + 2 \right) y_{N-1} = \gamma_1 - \frac{\beta_1}{2h} \frac{F_{N-1}}{A_{N-1}} \quad (39)$$

Матрица системы (37), (38), (39) является трехдиагональной и может быть реализована с помощью метода прогонки. Прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам (прямая прогонка)

$$\begin{aligned} v_i &= \frac{-B_i}{A_i + C_i v_{i-1}}, \quad \mu_i = \frac{F_i - A_i \mu_{i-1}}{A_i + C_i v_{i-1}}, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \\ v_0 &= \frac{\beta_0}{2h} \left(3 - \frac{C_1}{B_1} \right) / \left[\alpha_0 + \frac{\beta_0}{h} \left(2 + \frac{A_1}{2B_1} \right) \right], \quad \mu_0 = \left(\gamma_0 + \frac{\beta_0}{2h} \frac{F_1}{B_1} \right) / \left[\alpha_0 + \frac{\beta_0}{h} \left(2 + \frac{A_1}{2B_1} \right) \right]. \end{aligned}$$

Значения прогоночных коэффициентов на правой границе определяются из краевого условия (39)

$$\begin{aligned} v_N &= \frac{\beta_1}{h} \left(\frac{C_{N-1}}{2A_{N-1}} + 2 \right) / \left[\alpha_1 + \frac{\beta_1}{2h} \left(3 - \frac{B_{N-1}}{A_{N-1}} \right) \right], \\ \mu_N &= \left(\gamma_1 - \frac{\beta_1}{2h} \frac{F_{N-1}}{A_{N-1}} \right) / \left[\alpha_1 + \frac{\beta_1}{2h} \left(3 - \frac{B_{N-1}}{2A_{N-1}} \right) \right] \end{aligned}$$

после чего сеточная функция y_N на правой границе определяется из выражения

$$y_N = \frac{\mu_N + v_N \mu_{N-1}}{1 - v_N v_{N-1}}$$

и обратной прогонкой находятся все значения сеточной функции

$$y_i = v_i y_{i+1} + \mu_i, \quad i = N-1, N-2, \dots, 0.$$

Нетрудно показать, что матрица системы (37) имеет диагональное преобладание и метод прогонки устойчив.

Имеет место следующий важный результат (приведем его без доказательства).

Теорема. Пусть разностная схема (35), (36) аппроксимирует дифференциальную краевую задачу (26), (27) на ее решении с k -м порядком точности относительно h и пусть она устойчива. Тогда решение разностной задачи сходится к решению дифференциальной с тем же порядком относительно h .

Более кратко: из аппроксимации и устойчивости следует сходимость. Эта теорема известна под названием теоремы Лакса, которая справедлива для линейных разностных схем.

6. Параллельные алгоритмы для решения ОДУ и их систем

Методы Рунге-Кутты для решения ОДУ и их систем являются многошаговыми и распараллелить такие алгоритмы в общем случае не удастся. Имеются лишь отдельные примеры их распараллеливания для специальных видов правых частей уравнений при решении ряда прикладных задач. Более благоприятная ситуация имеет место при решении жестких систем ОДУ с помощью неявных разностных схем, когда используются операции умножения матрицы на вектор и обращение матриц. Поэтому здесь для написания параллельных программ можно использовать методы распараллеливания соответствующих задач линейной алгебры. При решении рассмотренных выше краевых задач методами базисных функций приходится вычислять интегралы и решать системы линейных алгебраических уравнений. Для распараллеливания этих задач также можно использовать соответствующие параллельные алгоритмы численного анализа и линейной алгебры. В методе конечных разностей возникает необходимость в решении системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей и здесь могут использоваться алгоритмы распараллеливания прогонки. Наиболее эффективным является метод встречных прогонок, требующий использования двух процессоров. Использование алгоритма параллельной прогонки на большом числе процессоров существенно увеличивает «накладные расходы», причем его эффективность определяется также структурой памяти и организацией режимов работы с ней на кластерной системе.