УДК 519.688:519.62

ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ ПОДПРОГРАММ РЕШЕНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ БИБЛИОТЕКИ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА НИВЦ МГУ

О. Б. Арушанян[1], **С. Ф. Залёткин**[1]

Дается общая характеристика раздела подпрограмм решения обыкновенных дифференциальных уравнений Библиотеки численного анализа НИВЦ МГУ.

В настоящей работе рассматривается раздел библиотеки программ по численному анализу НИВЦ МГУ [1, 2], предназначенный для решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Приводится предметная классификация раздела, даются общие характеристики подпрограмм, излагаются некоторые аспекты применения численных методов, которые могут быть использованы при практическом выборе наиболее подходящих подпрограмм.

1. Предметная классификация. Раздел включает основные типы задач из следующих подразделов.

1. Задача Коши для уравнений и систем уравнений первого порядка, разрешенных относительно производных, без контроля точности.

2. Задача Коши для уравнений и систем уравнений первого порядка, разрешенных относительно производных, с контролем точности.

3. Задача Коши для уравнений и систем уравнений второго порядка, разрешенных относительно старших производных, с контролем и без контроля точности.

4. Задача Коши для жестких систем уравнений и систем с большой константой Липшица.

5. Краевые задачи.

2. Общие характеристики подпрограмм решения задачи Коши. Подпрограммы вычисления решения задачи Коши для явных уравнений и систем уравнений первого и второго порядков, основанные на численных методах, выполняющих интегрирование шаг за шагом, можно условно разделить на два вида: подпрограммы, выполняющие один шаг численного интегрирования, и подпрограммы, выполняющие последовательность шагов и вычисляющие решение в конце интервала интегрирования. Эти подпрограммы могут использоваться как для непосредственного решения задачи пользователя, так и в качестве готовых подалгоритмов для составления индивидуальных программ, которые находят решение, например, при нескольких значениях аргумента, в нулях некоторой функции или на другом конкретном множестве значений аргумента.

Размер шага численного интегрирования в каждой из этих групп программ может оставаться постоянным или изменяться от шага к шагу. Постоянный шаг соответствует интегрированию без контроля точности приближенного решения. Переменный шаг выбирается самой подпрограммой (исходя из задаваемого пользователем начального его значения) таким образом, чтобы удовлетворить некоторый критерий достижения требуемой точности приближенного решения, и для большей эффективности рекомендуется использовать при выполнении очередного шага интегрирования то его значение, которое определено подпрограммой на предыдущем шаге.

Подпрограммы вычисления решения задачи Коши реализуют численные методы разного порядка точности. Более высокий порядок обеспечивает при малых размерах шага интегрирования более высокую точность при наличии достаточной гладкости правой части дифференциальных уравнений. Метод высшего порядка оказывается более эффективным, если требуется высокая точность, и менее эффективным в противном случае. Однако при выборе порядка метода следует помнить, что каждый порядок требует существования соответствующих непрерывных частных производных правой части уравнений. Если для какого-то порядка правая часть не является достаточно гладкой, то применение методов этого и более высоких порядков нецелесообразно, так как решение данной задачи может быть получено с той же точностью методом более низкого порядка с меньшим объемом вычислений и за меньшее время.

[1] Научно-исследовательский вычислительный центр, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992, Москва; e-mail: arush@srcc.msu.su

Следует иметь также в виду, что даже те методы, которые используют для контроля точности оценку главного члена погрешности приближенного решения, не гарантируют заданную точность, так как эта оценка является асимптотической, т.е. справедлива в пределе при $h \to 0$.

На точность результата вычислений влияют ошибки округления, зависящие от длины машинного слова. Каждая подпрограмма библиотеки имеет версию, предназначенную для выполнения промежуточных вычислений с удвоенным числом значащих цифр, когда под мантиссу отводится не одно машинное слово, а два слова. В тех случаях, когда вычислительная погрешность в одинарном случае превышает допустимую предельную погрешность приближенного решения, необходимо использовать версии программ с удвоенным числом значащих цифр.

Параметры подпрограмм решения задачи Коши можно условно разделить на следующие группы:

а) параметры, определяющие постановку математической задачи; к ним относятся:

— число уравнений в системе,

— начальное значение независимой переменной,

— начальное значение зависимой переменной (решения),

— подпрограмма вычисления правой части системы уравнений,

— конечное значение независимой переменной, при котором требуется вычислить решение задачи,

— для жестких систем уравнений может присутствовать дополнительный параметр, указывающий подпрограмму вычисления матрицы Якоби системы;

б) параметры, характеризующие точность приближенного решения (для подпрограмм с контролем точности);

в) параметры, относящиеся к величине шага интегрирования или к величине, обратной к нему;

г) параметр, задающий режим использования подпрограммы (задается, как правило, для подпрограмм, реализующих один шаг численного интегрирования);

д) рабочие массивы, необходимые для хранения промежуточных результатов;

е) параметр, указывающий причину окончания работы подпрограммы; нулевое значение этого параметра указывает на благополучное окончание работы для заданных пользователем исходных данных; после окончания работы подпрограммы необходимо проверить значение этого параметра.

3. Решение нежесткой задачи Коши для уравнений и систем уравнений первого порядка. Решается задача Коши для нормальной системы M уравнений

$$\begin{cases} y' &= f(x,y), \\ y(x_N) &= y_N, \end{cases}$$

где $y = (y^1, \ldots, y^M)$, $f(x,y) = \big(f^1(x, y^1, \ldots, y^M), \ldots, f^M(x, y^1, \ldots, y^M)\big)$.

Подпрограммы решения задачи Коши для нежестких уравнений и систем уравнений первого порядка охватывают наиболее распространенные классы методов численного интегрирования:

— класс одношаговых методов типа Рунге–Кутта [3–5],

— класс многошаговых методов Адамса типа предиктор–корректор, а также многозначный метод Гира [3–7],

— класс экстраполяционных методов [6, 8].

Среди одношаговых методов типа Рунге–Кутта имеются:

— метод Хойна с пятью вычислениями правой части на шаге третьего порядка точности с оценкой погрешности по правилу Рунге (см. гл. 2, п. 3.2, формула (14) в [5]),

— классический метод Рунге–Кутта с четырьмя вычислениями правой части четвертого порядка точности (см. гл. 2, п. 3.4, формула (22) в [5]),

— метод Мерсона с пятью вычислениями правой части четвертого порядка точности (см. гл. 2, п. 5.2.2.3, формулы (79), (81) в [5]),

— метод Фельберга пятого порядка точности с шестью вычислениями правой части на одном шаге (см. гл. 2, п. 5.2.2.3, формулы (84)–(86) в [5]),

— метод Ингленда пятого порядка точности с шестью вычислениями правой части на одном шаге (см. гл. 2, п. 5.2.2.3, формулы (87)–(89) в [5]).

Правило Рунге позволяет достаточно точно оценить погрешность приближенного решения на одном шаге, так как при этом используется оценка главного члена погрешности. В программах, вычисляющих приближенное решение методами Мерсона, Ингленда, Фельберга и классическим методом Рунге–Кутта, контроль точности приближенного решения ведется с использованием так называемого контрольного члена. Контрольный член в названных методах является оценкой главного члена погрешности некоторого другого, вспомогательного, значения приближенного решения, имеющего более низкий порядок точности по сравнению с порядком приближенного решения, принимаемого в качестве ответа (см. гл. 1, п. 5.2.2 в [5]). Для классического метода Рунге–Кутта вспомогательное приближенное значение решения имеет второй порядок точности, главный член погрешности является величиной третьего порядка относительно шага интегрирования $O(h^3)$. Для метода Мерсона вспомогательное приближенное значение решения имеет третий порядок точности, его погрешность является величиной четвертого порядка относительно шага интегрирования $O(h^4)$. В методах Ингленда и Фельберга вспомогательные приближенные значения решения имеют четвертый порядок точности, а главный член их погрешности является величиной пятого порядка относительно шага интегрирования $O(h^5)$.

В тех случаях, когда предпочтительно сократить время счета и иметь невысокую точность приближенного решения, целесообразно использовать классический метод Рунге–Кутта и метод Мерсона. Если важнее поточнее оценить решение, то следует пользоваться методами с более точной оценкой погрешности на шаге.

При громоздких правых частях, требующих выполнения большого числа арифметических операций, методы типа Рунге–Кутта могут потребовать много счетного времени для вычисления решения на всем интервале интегрирования. В этом случае более эффективными оказываются многошаговый метод Адамса пятого порядка и многозначный метод Гира переменного порядка, которые на одном шаге требуют значительно меньшего числа вычислений правой части. Для контроля точности приближенного решения в этих методах используется оценка главного члена погрешности, что позволяет довольно точно учитывать погрешность при малых размерах шага интегрирования.

Класс экстраполяционных методов представлен методом рациональной экстраполяции Грэгга–Булирша–Штёра переменного порядка, в котором приближенные значения решения вычисляются с помощью явного метода прямоугольников второго порядка, которые затем уточняются с помощью рациональной экстраполяции Ричардсона [6, 8]. Получаемое таким способом повышение точности приближенного решения делает метод Грэгга–Булирша–Штёра весьма эффективным методом в случае, когда требуется высокая точность приближенного решения.

Перечисленные в данном пункте методы имеют ограниченные области устойчивости, поэтому соответствующие им программы не достаточно эффективны и даже могут оказаться практически непригодны для сильно жестких систем уравнений.

На рис. 1 приводится дерево решений для выбора метода или группы методов численного интегрирования нежесткой задачи Коши.

Следует иметь в виду, что предлагаемые в данном пункте, а также в следующих п. 4, 5 рекомендации по использованию тех или иных методов не следует рассматривать как строго окончательные.

4. Решение задачи Коши для уравнений и систем уравнений второго порядка. Решается задача Коши для канонической системы M уравнений

$$y'' = f(x, y) \tag{1}$$

или

$$y'' = f(x, y, y') \tag{2}$$

с начальными условиями

$$\begin{cases} y(x_N) \ = y_N, \\ y'(x_N) = y'_N. \end{cases} \tag{3}$$

Здесь

$$y = (y^1, \ldots, y^M),$$
$$f(x, y) = \big(f^1(x, y^1, \ldots, y^M), \ldots, f^M(x, y^1, \ldots, y^M)\big)$$

для системы (1),

$$f(x, y, y') = \big(f^1(x, y^1, \ldots, y^M, y^{1'}, \ldots, y^{M'}), \ldots, f^M(x, y^1, \ldots, y^M, y^{1'}, \ldots, y^{M'})\big)$$

для системы (2).

Если предварительно преобразовать системы уравнений (1) и (2) к системе уравнений первого порядка, то полученную задачу можно решать любым из выше указанных в п. 3 методов. В библиотеке имеются подпрограммы, предназначенные для непосредственного интегрирования систем уравнений второго порядка (1) и (2), реализующие метод Штёрмера пятого порядка точности, который представляет собой перенесение метода Адамса на уравнения второго порядка [3, 4, 5].

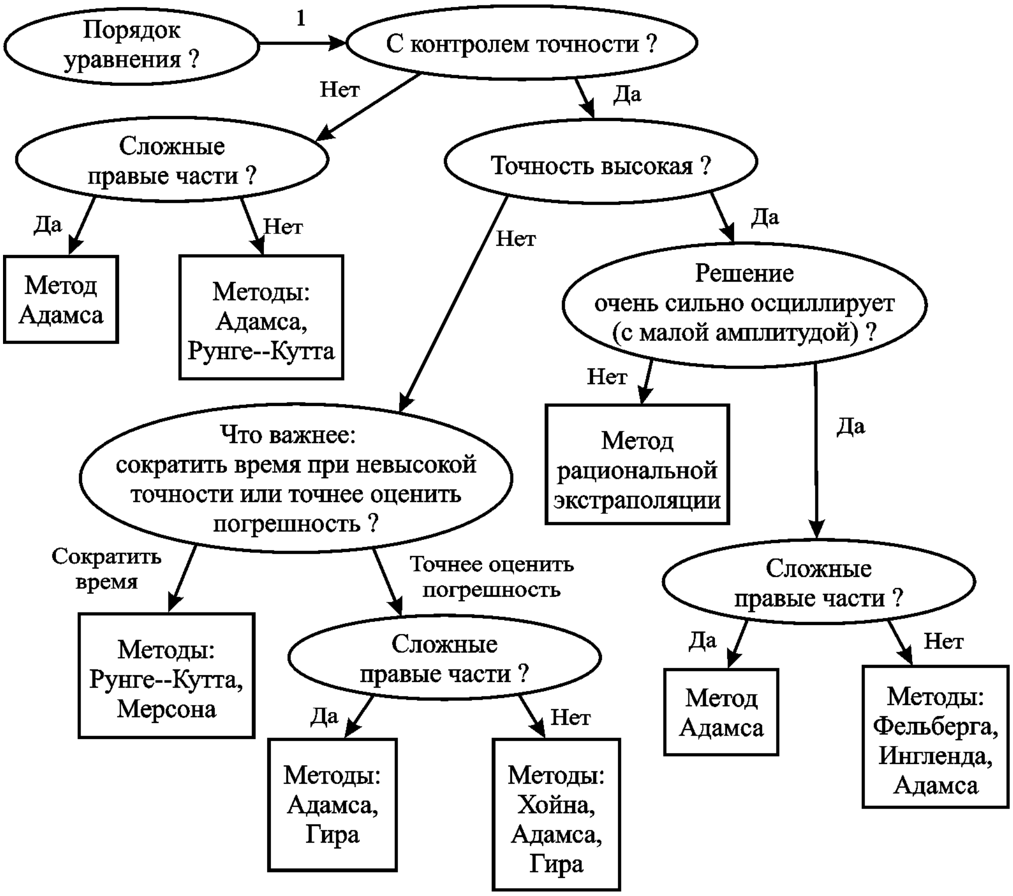

Рис. 1. Дерево решений для выбора метода интегрирования нежесткой задачи Коши

Как и в методе Адамса, в методе Штёрмера используется для контроля точности приближенного решения оценка главного члена погрешности на шаге, что позволяет довольно точно учитывать ошибку при малых размерах шага интегрирования. Небольшое число вычислений правой части системы на одном шаге повышает эффективность этого метода по сравнению с одношаговыми методами, перечисленными в п. 3.

Учитывая значимость явных дифференциальных уравнений второго порядка, не содержащих первой производной, в библиотеку включены специальные подпрограммы интегрирования таких уравнений. Эти программы отличаются от программ интегрирования явных дифференциальных уравнений второго порядка общего вида тем, что в них реализованы алгоритмы, не связанные с вычислением первой производной.

На рис. 2 приводится дерево решений для выбора подпрограммы интегрирования уравнений второго порядка.

5. Решение жесткой задачи Коши для уравнений и систем уравнений первого порядка. Жесткие уравнения — это такие уравнения, которые моделируют процессы, обладающие явлением жесткости [5, 9]. Подобные процессы описываются функциями двух видов: функциями с большими по модулю производными и функциями с малыми по модулю производными, причем функции с большими производными быстро убывают. Такие задачи часто встречаются при исследовании динамических систем в химической и физической кинетике, электротехнике при исследовании переходных процессов в электрических цепях, в механике сплошной среды, при исследовании работы ядерного реактора, в теории управления и т.д. Для жестких систем, как правило, существуют два участка решения с существенно различным характером поведения его составляющих, причем длина первого участка, называемого пограничным слоем, значительно меньше длины второго. Необходимость выделения таких уравнений в отдельный класс вызвана трудностями, которые встречаются при их численном интегрировании традиционными методами, например, явными методами типа Рунге–Кутта, Адамса. Для численного воспроизведения быстропротекающих процессов в пограничном слое необходим малый шаг интегрирования; однако вне погранслоя,

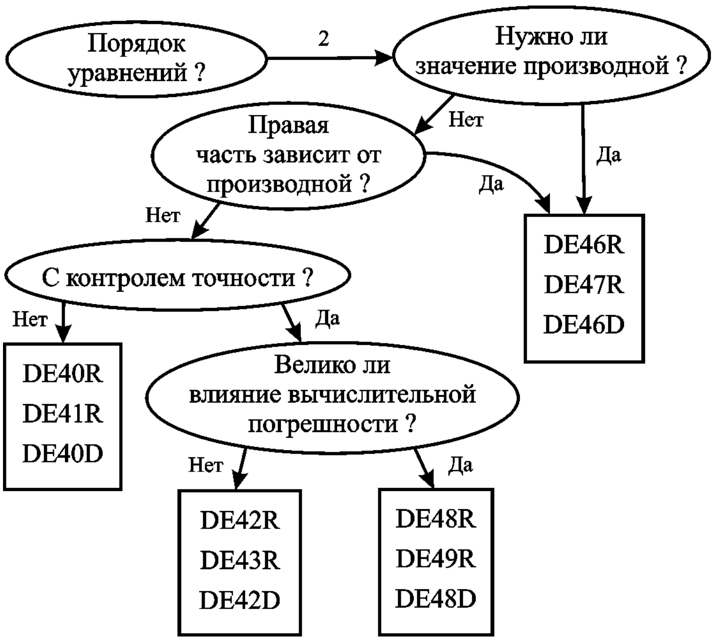

Рис. 2. Дерево решений для выбора подпрограммы интегрирования уравнений второго порядка

где существенны функции с малыми производными, увеличение шага приводит к резкому возрастанию погрешности, влекущему за собой качественное изменение поведения численного решения. Описанное явление происходит потому, что указанные методы обладают, как уже отмечалось выше, ограниченной областью устойчивости. Поэтому для решения жестких систем предложены методы с неограниченной областью устойчивости; некоторые из этих методов реализованы в подпрограммах библиотеки.

Решается жесткая задача Коши для следующих видов уравнений:

$$y' = f(x, y), \tag{4}$$

$$y' = A(x)y + f(x), \qquad A(x) = \big(a_{ij}(x)\big), \tag{5}$$

$$y' = A(x)y, \tag{6}$$

$$y' = Ay, \qquad A = (a_{ij}), \qquad a_{ij} = \text{const}, \tag{7}$$

$$y' = Ay + \varphi(x), \quad \varphi(x) = \big(\alpha_1 e^{\beta_1 x}, \ldots, \alpha_M e^{\beta_M x}\big), \quad \alpha_i, \beta_i = \text{const}, \tag{8}$$

$$y' = Ay + u(x, y) \tag{9}$$

с начальными условиями

$$y(x_N) = y_N. \tag{10}$$

Здесь

$$y = (y^1, \ldots, y^M), \qquad f(x, y) = \big(f^1(x, y^1, \ldots, y^M), \ldots, f^M(x, y^1, \ldots, y^M)\big).$$

Для решения нелинейной задачи общего вида (4), (10) предлагаются многозначный жестко-устойчивый метод Гира переменного порядка [5, 6, 7] и A-устойчивый метод типа Розенброка четвертого порядка [10, 11], использующие, как, впрочем, и все другие методы решения жестких систем, матрицу Якоби $\dfrac{\partial f}{\partial y} = \left(\dfrac{\partial f_i}{\partial y_j}\right)$ системы (4). Для линейной системы (5) предлагается A-устойчивый неявный метод Рунге–Кутта шестого порядка точности [5, 6], а для сильно жестких систем (6), (7), (8) — экспоненциальный метод, основанный на представлении решения линейной однородной системы с постоянными коэффициентами в виде матричной экспоненты [5].

Предполагается, что система вида (9) является квазилинейной. Это означает, что константа Липшица функции $u(x, y)$ по переменной y, т.е. константа L из условия Липшица

$$\big|u^i(x, \bar{y}^1, \ldots, \bar{y}^M) - u^i(x, \bar{\bar{y}}^1, \ldots, \bar{\bar{y}}^M)\big| \leqslant L \sum_{j=1}^{M} |\bar{y}^j - \bar{\bar{y}}^j|,$$

не зависящая от i, x, $\bar{y}$, $\bar{\bar{y}}$, невелика по сравнению с характеристическими корнями матрицы A, и функция $u(x, y)$ является достаточно малой. Для квазилинейной системы (9), а также для квазилинейной системы, заданной в общем виде (4), предлагается метод Лоусона четвертого порядка точности [12].

Если в линейной системе (5) функция $f(x)$ является достаточно малой, то для решения этой системы также может быть предложен метод Лоусона; в частности, он может быть использован для решения задачи (6).

Метод Лоусона является одношаговым методом и заключается в следующем. На каждом частичном сегменте $x_n \leqslant x \leqslant x_n + h$, длина которого равна шагу интегрирования, исходная система уравнений $y' = g(x, y)$ с помощью замены искомой функции $y(x)$ по формуле

$$y(x) = e^{\mathring{A}(x-x_n)} z(x), \tag{11}$$

где $\mathring{A}$ — некоторая постоянная матрица, преобразуется в систему уравнений относительно новой неизвестной функции $z(x)$:

$$z'(x) = G(x, z). \tag{12}$$

Матрица Якоби $\dfrac{\partial G}{\partial z}$ системы (12) и матрица Якоби $\dfrac{\partial g}{\partial y}$ правой части $g(x, y)$ исходной системы связаны между собой соотношением

$$\frac{\partial G}{\partial z} = e^{-(x-x_n)\,\mathring{A}} \left(\frac{\partial g}{\partial y} - \mathring{A} \right) e^{(x-x_n)\,\mathring{A}}. \tag{13}$$

Для нелинейной системы (4)

$$\frac{\partial g}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial y},$$

для линейной системы (5), (6)

$$\frac{\partial g}{\partial y} = A(x),$$

для квазилинейной системы (9)

$$\frac{\partial g}{\partial y} = A + \frac{\partial u}{\partial y}.$$

Преобразование (11) позволяет уменьшить характеристические корни матрицы Якоби $\dfrac{\partial G}{\partial z}$ по сравнению с характеристическими корнями матрицы Якоби исходной системы. А это приводит к уменьшению константы Липшица системы (12) по сравнению с константой Липшица исходной системы (4) – (6), (9).

Для решения системы (12) применяется классический метод Рунге–Кутта четвертого порядка точности, причем одновременно с интегрированием производится обратное преобразование от функции $z(x)$ к функции $y(x)$.

Укажем свойства жестких линейных систем с постоянными коэффициентами. Матрица такой системы, как правило, обладает большим числом обусловленности

$$\mu = \frac{\max\limits_i |\lambda_i|}{\min\limits_i |\lambda_i|} \gg 1,$$

при этом большие по модулю собственные числа должны обладать большими по модулю отрицательными действительными частями. Наиболее типичен случай линейной жесткой системы, когда собственные числа матрицы отчетливо разделяются по величине их модулей на две группы. Собственные числа первой группы с большими модулями определяют поведение решения в пограничном слое и соответствующие им составляющие быстро убывают, а собственные значения второй группы с малыми модулями характеризуют поведение решения вне погранслоя. Однако возможны и другие случаи, когда собственные числа расположены на вещественной оси достаточно равномерно.

Судить о жесткости линейной системы с переменными коэффициентами по собственным числам $\lambda_i(x)$ ее матрицы $A(x)$ можно, если собственные векторы изменяются не слишком сильно [9].

Если нелинейную систему можно достаточно близко аппроксимировать линейными системами с постоянной матрицей на отрезках, значительно превышающих по длине пограничный слой (так называемые системы с кусочно-постоянной жесткостью), даже когда число таких отрезков велико, то выполнение указанных условий для собственных чисел матрицы Якоби нелинейной системы является также признаком ее жесткости [9].

На рис. 3 приводится дерево решений для выбора метода численного интегрирования жесткой задачи Коши.

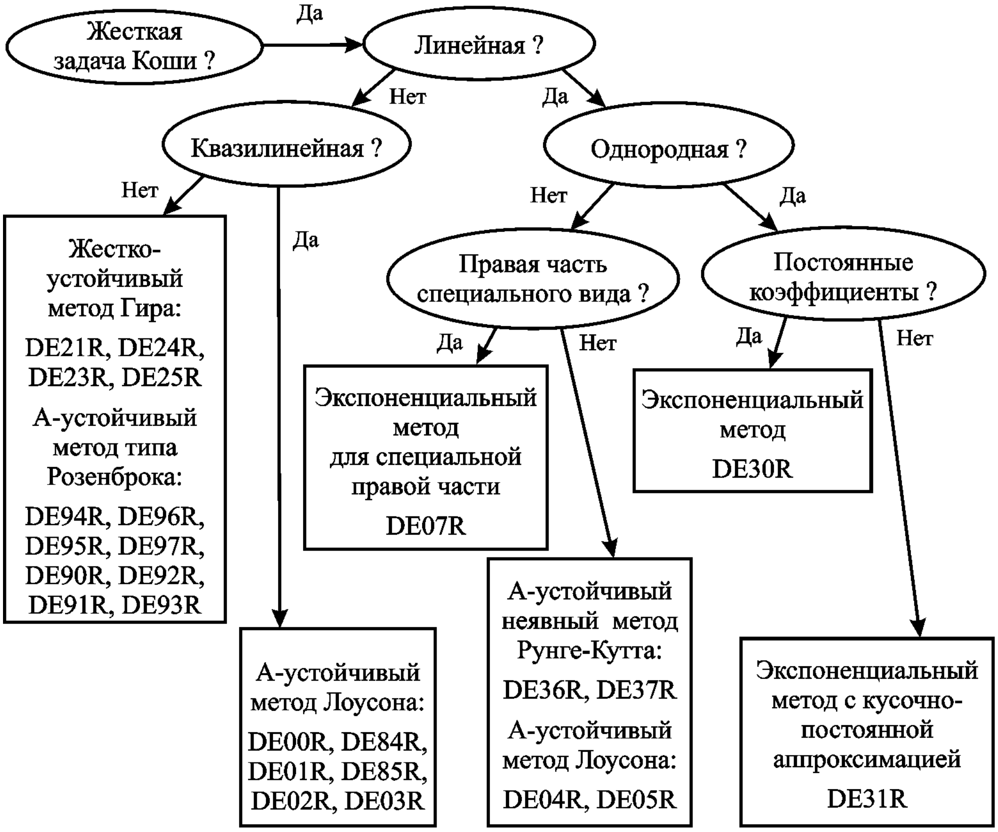

Рис. 3. Дерево решений для выбора метода интегрирования жесткой задачи Коши

6. Краевые задачи. Решаются следующие задачи:

— краевая задача для линейной системы M уравнений первого порядка

$$y' = A(x)y + f(x), \qquad x \in [x_N, x_K], \tag{14}$$

с линейными краевыми условиями

$$\begin{aligned} B\,y\,(x_N) &= b, \\ C\,y\,(x_K) &= c, \end{aligned} \tag{15}$$

где B и C — прямоугольные матрицы порядков $(M-k)\times M$ и $k \times M$ соответственно, а b и c — векторы длиной $M-k$ и k, A — квадратная матрица размера $M \times M$, f — вектор длиной M;

— краевая задача для линейного уравнения второго порядка с непрерывными коэффициентами

$$y'' + f(x)y' + g(x)y = r(x) \tag{16}$$

с линейными краевыми условиями

$$\begin{aligned} a_N y'(x_N) + b_N y\,(x_N) &= c_N, \qquad a_N^2 + b_N^2 \neq 0, \\ a_K y'(x_K) + b_K y\,(x_K) &= c_K, \qquad a_K^2 + b_K^2 \neq 0; \end{aligned} \tag{17}$$

— краевая задача для нелинейного уравнения второго порядка

$$y'' + f(x, y, y')\,y' + g(x, y, y')\,y = r(x, y, y') \tag{18}$$

с линейными краевыми условиями (17);

— линейная краевая задача для самосопряженного уравнения второго порядка

$$\big(k(x)y'\big)' - g(x)y = -r(x) \tag{19}$$

с разрывными коэффициентами $k(x)$, $g(x)$, $r(x) \in Q^2[x_N, x_K]$, имеющими кусочно-непрерывные производные до второго порядка включительно, с граничными условиями

$$\begin{aligned} ky' - (\sigma_1 y - \mu_1) &= 0 \qquad \text{при} \qquad x = x_N, \\ -ky' - (\sigma_2 y - \mu_2) &= 0 \qquad \text{при} \qquad x = x_K \end{aligned} \tag{20}$$

и дополнительным условием непрерывности решения и потока в точках разрыва коэффициентов.

Линейная задача для уравнения второго порядка (16), (17) может быть решена итерационным или неитерационным методом. В качестве итерационного используется метод конечных разностей, который реализован в подпрограмме DE50R [6, 13]. Начальное приближение к решению вычисляется по разностной схеме, построенной с использованием разностей первого и второго порядков искомой функции. Последующие приближения находятся как решения разностных схем, включающих разности третьего и четвертого порядков и, следовательно, имеющих более высокий порядок аппроксимации.

В качестве неитерационного метода используется метод прогонки А. А. Абрамова [14], реализованный в подпрограммах DE54R и DE56R. В данном варианте прогонки решение краевой задачи (16), (17) и его производная представляются в виде

$$\begin{aligned} y(x) &= u(x)\sin\theta(x) + v(x)\cos\theta(x), \\ y'(x) &= u(x)\cos\theta(x) - v(x)\sin\theta(x), \end{aligned}$$

где $\theta(x), u(x)$ являются решением задачи Коши на $[x_N, x_K]$ для некоторых вспомогательных дифференциальных уравнений первого порядка с начальными условиями, заданными в точке x_N, а $v(x)$ — решение задачи Коши для вспомогательного уравнения первого порядка с начальным условием в точке x_K. Таким образом, решение краевой задачи сводится к решению задач Коши для уравнений первого порядка.

Оба метода являются устойчивыми в том случае, когда устойчива исходная краевая задача.

В случае, когда исходное уравнение (18) нелинейное, используется метод линеаризации [6, 13], а получающиеся линейные уравнения решаются описанным выше конечно-разностным методом, причем линеаризации нелинейного уравнения происходят последовательно. Поскольку вывод о сходимости итерационного процесса делается по близости последовательных итераций, разности между которыми не всегда можно свести к нулю из-за ошибок округления, то вводится константа, которая ограничивает число этих итераций. Эта константа задается пользователем при обращении к подпрограмме DE51R решения данной краевой задачи.

Для решения линейной краевой задачи для системы уравнений первого порядка (14), (15) используется метод ортогональной прогонки С.К. Годунова [3, 15], сводящийся к решению задач Коши. Этот метод реализован в подпрограмме DE52R. Для обеспечения устойчивости прогонки периодически применяется ортогонализация векторов, являющихся решениями задач Коши для исходной системы и соответствующей однородной системы. Узлы, в которых требуется производить ортогонализацию этих векторов, задаются пользователем для каждой задачи при обращении к подпрограмме. При этом ортогонализация осуществляется разложением матрицы, составленной из компонент указанных векторов, в произведение ортогональной и треугольной матриц устойчивым методом отражений.

Линейную краевую задачу для уравнения второго порядка (16), (17) можно также решать методом ортогональной прогонки С.К. Годунова, предварительно преобразовав уравнение второго порядка к системе уравнений первого порядка.

Данное преобразование можно выполнить следующим образом. Пусть $z_1 = y$, $z_2 = y'$. Тогда уравнение (16) приводится к системе двух уравнений первого порядка

$$\begin{aligned} z_1' &= z_2, \\ z_2' &= -g(x)z_1 - f(x)z_2 + r(x), \end{aligned}$$

которая в векторно-матричной форме имеет вид

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -g(x) & -f(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ r(x) \end{pmatrix},$$

краевые условия (17) запишутся в форме (15), где B и C являются строчными матрицами:

$$B = (b_N \quad a_N), \qquad C = (b_K \quad a_K), \qquad b = (c_N), \qquad c = (c_K).$$

Для решения самосопряженного уравнения второго порядка с разрывными коэффициентами (19), (20), которым описываются, например, стационарные процессы теплопроводности и диффузии, используется однородная консервативная разностная схема второго порядка точности [16]. При использовании этой схемы точки разрывов коэффициентов уравнения должны совпадать с узлами сетки, на которой находится решение. Данный конечно-разностный метод реализован в подпрограммах DE57R, DE58R, DE59R, DE60R.

Как и для задач Коши, все подпрограммы решения краевых задач имеют версии, выполняющие промежуточные вычисления с удвоенным числом значащих цифр, когда мантисса числа занимает не одно, а два машинных слова. Эти версии рекомендуется использовать в том случае, когда при счете по основным версиям вычислительная погрешность превышает допустимую предельную погрешность приближенного решения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Воеводин В.В., Арушанян О.Б.* Структура и организация Библиотеки численного анализа НИВЦ МГУ // Численный анализ на ФОРТРАНе. Вычислительные методы и инструментальные системы. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1979. 73–83.
2. *Арушанян О.Б., Волченскова Н.И.* Библиотека программ НИВЦ МГУ для решения типовых задач численного анализа // Вычислительные методы и программирование. 2002. **3**, № 2. 158–163.
3. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. М.: Наука, 1987.
4. *Березин И.С., Жидков Н.П.* Методы вычислений. Т. 2. М.: Физматгиз, 1962.
5. *Арушанян О.Б., Залёткин С.Ф.* Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений на Фортране. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1990.
6. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла, Дж. Уатта. М.: Мир, 1979.
7. *Gear C.W.* The automatic integration of ordinary differential equations // CACM. 1971. **14**, N 3. 176–179.
8. *Bulirsch R., Stoer J.* Numerical treatment of ordinary differential equations by extrapolation methods // Numerishe Mathematic. 1966. **8**, N 1. 1–13.
9. *Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноруцкий И.Г.* Численные методы решения жестких систем. М.: Наука, 1979.
10. *Артемьев С.С., Демидов Г.В.* A-устойчивый метод типа Розенброка четвертого порядка точности решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Некоторые проблемы вычислительной и прикладной математики. Новосибирск: Наука, 1975. 214–220.
11. *Залёткин С.Ф.* Численное интегрирование жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений методами Розенброка // Пакеты прикладных программ. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1991. 57–69.
12. *Lawson J.D.* Generelized Runge–Kutta processes for stable systems with large Lipschitz constants // SIAM J. Numer. Anal. 1967. **4**, N 1–4. 372–380.
13. *На Ц.* Вычислительные методы решения прикладных граничных задач. М.: Мир, 1982.
14. *Абрамов А.А.* Вариант метода прогонки // ЖВМ и МФ. 1961. **1**, № 2. 349–351.
15. *Арушанян О.Б., Залёткин С. Ф.* Решение линейной краевой задачи для систем обыкновенных дифференциальных уравнений методом ортогональной прогонки С.К. Годунова // Вычислительные методы и программирование. 2001. **2**, № 2. 159–166.
16. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.

Поступила в редакцию
19.02.2003