Лекция 9. Метод параллельной стрельбы решения краевой задачи для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

1. *Некоторые сведения из вычислительной математики*

Анализ прикладного программного обеспечения показывает, что в настоящее время существует множество пакетов для решения задачи Коши для систем ОДУ практически любой размерности. Реализованы различные численные методы как для нежестких, так и для жестких и дифференциально-алгебраических задач (системы с формально бесконечной жесткостью). А надежных пакетов для решения краевых задач произвольной размерности практически не встречается (здесь мы пока не принимаем в расчет наличие эффективных параллельных реализаций на той или иной платформе).

В «стандартных» учебных курсах вычислительной математики обычно мимоходом говориться, что краевая задача на порядки труднее задачи Коши, для решения краевой задачи большой размерности нужна не столько высокая наука, сколько искусство вычислителя. В качестве примера в курсах обычно рассматривается нелинейное уравнение второго порядка

$$y'' + f(x, y, y') = 0$$

с граничными условиями. Для простоты будем рассматривать условия первого рода

$$y(0) = \tilde{y}_0, \quad y(A) = \tilde{y}_1.$$

Рассмотрение граничных условий второго рода и смешанных (третьего рода) проводится по аналогии и затруднений не вызывает.

Обычно рассматривается два численных метода — стрельбы (пристрелки) и квазилинеаризации с последующими итерациями по нелинейности и реализацией того или иного алгоритма прогонки, дифференциальной или разностной.

Рассмотрим алгоритм пристрелки, сводящийся к замене краевой задачи к последовательности задач Коши. Для этого заменим краевые условия для рассматриваемой задачи начальными данными Коши

$$y(0) = \tilde{y}_0, \quad y'(0) = \eta.$$

Затем решаем данную задачу каким-либо численным методом для решения задачи Коши. На правом краю отрезка интегрирования мы получим численное значение $y_{num}(\tilde{y}_0, \eta)$. Тогда для определения значения пристрелочного параметра η необходимо решать нелинейное уравнение $y_{num}(\tilde{y}_0, \eta) - \tilde{y}_1 = 0$. При этом сама нелинейная функция задана практически реализацией ее вычисления с помощью того или иного сложного алгоритма. Как правило, такое уравнение решается итерационно, с помощью численных реализаций метода Ньютона (о его применении к численному решению задач такого рода смотри ниже) или метода деления пополам. С методами простой итерации встречаются затруднения, но для ряда задач и он тоже вполне применим.

Конечно, метод стрельбы сходится далеко не всегда. Давайте попробуем вспомнить, в чем тут дело. Для этого рассмотрим метод квазилинеаризации. Выберем какое-нибудь начальное приближение к решению нашей задачи, например, удовлетворяющее граничным условиям. При подстановке в уравнение самого этого начального приближения возникает невязка

$$\overset{0}{r} = \overset{0}{y}'' + f(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}').$$

Будем искать следующее приближение к решению в виде добавки к нулевому приближению, причем удовлетворяющей следующему линейному уравнению

$$\overset{0}{y}'' + \delta y'' + f(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}') + \frac{\partial f}{\partial y}(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}')\delta y + \frac{\partial f}{\partial y'}(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}')\delta y' = 0$$

или

$$\delta y'' + \frac{\partial f}{\partial y}(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}')\delta y + \frac{\partial f}{\partial y'}(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}')\delta y' = -\overset{0}{r}.$$

Для определения поправки получили линейное уравнение с переменными коэффициентами и граничными условиями

$$\delta y(0) = 0, \quad \delta y(A) = 0.$$

Из курса обыкновенных дифференциальных уравнений известно, что общее решение неоднородного уравнения суть сумма общего решения однородного уравнения и частного решения неоднородного. В качестве грубой оценки общего решения однородного уравнения рассмотрим общее решение уравнения с постоянными коэффициентами

$$\delta y'' + a\delta y' + b\delta y = 0$$

где в качестве постоянных коэффициентов берутся средние на отрезке интегрирования значения функций

$$a = \frac{1}{A}\int_0^A \frac{\partial f}{\partial y'}(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}')dx, \quad b = \frac{1}{A}\int_0^A \frac{\partial f}{\partial y}(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}')dx.$$

Найдем корни соответствующего характеристического уравнения

$$\lambda^2 + a\lambda + b = 0.$$

Очевидно, $\lambda_1 = \frac{1}{2}\left(-a + \sqrt{a^2 - 4b}\right)$ и $\lambda_2 = \frac{1}{2}\left(-a - \sqrt{a^2 - 4b}\right)$

В общем случае общее решение однородного уравнения с постоянными коэффициентами представляет собой сумму двух (вообще говоря, комплексных) экспонент. Самый плохой для поиска общего решения такой задачи численными методами случай, когда $b<0$ и $a^2 \gg |b|$. В этом случае решение представляет собой линейную комбинацию «быстро растущей» и «быстро убывающей» экспонент. При этом, если в методе стрельбы начальное значение параметра возмутить, то малые начальные возмущения умножаются на растущую экспоненту. А решение системы (или нелинейного уравнения для определения одного пристрелочного параметра) на противоположенном конце интервала интегрирования задачи необходимо определять с точностью, задающейся убывающей экспонентой! Подробности см. в [23].

Слова «быстро растущая» и «быстро убывающая» экспоненты недаром взяты в кавычки — важна даже не сама по себе величина коэффициента *b*, сколько величина $L=\sqrt{b}A$. Если $L \gg 1$, то решение задачи вызывает трудности. Но при изменении длины отрезка интегрирования в несколько раз вычислительные трудности могут исчезнуть или значительно уменьшится.

Отметим, что при применении метода стрельбы затруднений не вызывает случай с чисто мнимыми экспонентами в общем решении. В этом случае прогонка становится неустойчивой! Стрельба и варианты прогонок (матричные для систем большой размерности, немонотонные и т.п.) на практике дополняют друг друга, расширяя сферу применения численных методов.

2. *Алгоритм параллельной стрельбы*

Теперь рассмотрим более сложный случай краевой задачи. Типичная постановка – система уравнений типа «реакция–диффузия» имеет стационарное решение (образуется диссипативная структура). В двухкомпонентной системе такая сформировавшаяся структура описывается системой уравнений второго порядка

$$u'' + \frac{1}{D_u} f(u,v) = 0,$$

$$v'' + \frac{1}{D_v} g(u,v) = 0.$$

Для этой системы уравнений также поставим граничные условия первого рода

$$u(0) = \tilde{u}_0, \quad u(A) = \tilde{u}_1,$$

$$v(0) = \tilde{v}_0, \quad v(A) = \tilde{v}_1,$$

Свойства такой системы исследуем в малой окрестности пространственно-однородного стационарного решения. Такое решение находится из условия $f(u,v)=0$, $g(u,v)=0$. Если решение этой алгебраической системы обозначить как $u*, v*$, то оно, очевидно, будет и решением системы дифференциальных уравнений с граничными условиями

$$u(0)=u*, \quad u(A)=u*,$$

$$v(0)=v*, \quad v(A)=v*,$$

При этом возможна ситуация, когда в линеаризованной системе для определения одной поправки будет неустойчива прогонка, а для определения другой поправки — стрельба. Какими численными методами тогда надлежит пользоваться?

Разобьем отрезок [0, A] на N частей. Для этого введем точки (не обязательно эквидистантные, зависит от конкретной задачи) $x_i : x_0 = 0 < x_1 < \ldots < x_N = A$ и рассмотрим на каждом отрезке длиной $\delta_i = x_{i+1} - x_i$ следующую задачу Коши

$$u' = y,$$

$$y' = -\frac{1}{D_u} f(u,v),$$

$$v' = z,$$

$$z' = -\frac{1}{D_v} g(u,v),$$

$$u(x_i) = \xi_{i,0}, \quad u'(x_i) = y(x_i) = \xi_{i,1},$$

$$v(x_i) = \eta_{i,0}, \quad v'(x_i) = z(x_i) = \eta_{i,1}.$$

Таким образом, в каждой точке разбиения определен вектор параметров $\boldsymbol{\eta}_i = (\xi_{i,0}, \xi_{i,1}, \eta_{i,0}, \eta_{i,1})$, определяющий данные Коши на каждом отрезке. С такими начальными данными задача может быть легко решена на каждом отрезке, решение таких задач может осуществляться независимо на отдельном исполнителе. В результате численного решения задачи Коши на каждом отрезке получается вектор

$$\mathbf{u}_h(x_i + \delta_i) = (u_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), y_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), v_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), z_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i))$$

Здесь индекс h подчеркивает, что решение задачи Коши в этом случае сеточная функция, получаемая численным методом! Если теперь потребовать выполнения равенств $\mathbf{u}_h(x_i + \delta_i) = (u_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), y_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), v_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), z_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)) = \boldsymbol{\eta}_{i+1}$ во всех внутренних точках x_i и ввести векторы η на границах отрезка интегрирования задачи

$$u(0) = \xi_{0,0} = \tilde{u}_0,$$

$$u'(0) = y(0) = \xi_{0,1},$$

$$v(0) = \eta_{0,0} = \tilde{v}_0,$$

$$v'(0) = z(0) = \eta_{0,1},$$

$$u(A) = \xi_{N,0} = \tilde{u}_1,$$

$$u'(A) = y(A) = \xi_{N,1},$$

$$v(A) = \eta_{N,0} = \tilde{v}_1,$$

$$v'(A) = z(A) = \eta_{N,1},$$

где параметры $\xi_{0,1}$ и $\eta_{0,1}$ — «пристрелочные», они определяются в ходе решения задачи, а параметры $\xi_{0,1}$ и $\eta_{0,1}$ — произвольные. Для определения всех векторов $\boldsymbol{\eta}_i = (\xi_{i,0}, \xi_{i,1}, \eta_{i,0}, \eta_{i,1})$ получаем систему уравнений с $4(N-1)+2$ неизвестными (склейка функции во всех внутренних точках границ вместе с первыми производными, на первом отрезке функции зависят лишь от двух пристрелочных параметров, на последнем отрезке выполнены только два граничных условия).

В результате для решения задачи получаем систему нелинейных уравнений вида

$$(u_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), y_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), v_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), z_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)) - \boldsymbol{\eta}_{i+1} = \mathbf{0},$$

где функции заданы процедурами их вычисления на каждом отрезке. Для решения системы нелинейных уравнений используем метод Ньютона. При этом для реализации метода Ньютона необходимо знать элементы матрицы Якоби системы нелинейных уравнений, то есть все частные производные

$$\left.\frac{\partial \mathbf{u}_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \boldsymbol{\eta}_i}\right|_{x = x_i + \delta_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}} & \frac{\partial u_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,1}} & \frac{\partial u_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \eta_{i,0}} & \frac{\partial u_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \eta_{i,1}} \\ \frac{\partial y_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}} & \frac{\partial y_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,1}} & \frac{\partial y_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \eta_{i,0}} & \frac{\partial y_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \eta_{i,1}} \\ \frac{\partial v_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}} & \frac{\partial v_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,1}} & \frac{\partial v_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \eta_{i,0}} & \frac{\partial v_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \eta_{i,1}} \\ \frac{\partial z_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}} & \frac{\partial z_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,1}} & \frac{\partial z_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \eta_{i,0}} & \frac{\partial z_h(x_i, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \eta_{i,1}} \end{pmatrix}$$

3. *Вычисление элементов матрицы Якоби*

Подставим тождество

$$\mathbf{u}(x) = (u(x, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), y(x, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), v(x, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i), z(x, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)),$$

означающее, что на каждом элементарном отрезке $\delta_i = x_{i+1} - x_i$ ТОЧНОЕ решение системы будет представлять собой функцию, непрерывно зависящую от параметров Коши в точке склейки (начале рассматриваемого интервала), в исходную систему ОДУ

$$u'' + \frac{1}{D_u} f(u,v) = 0,$$

$$v'' + \frac{1}{D_v} g(u,v) = 0.$$

Получаем

$$u''(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i) + \frac{1}{D_u} f(u(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i), v(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i)) = 0,$$

$$v''(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i) + \frac{1}{D_v} g(u(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i), v(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i)) = 0.$$

Продифференцируем каждое из приведенных выше уравнений (а это на нашем отрезке дифференциальные тождества!) по параметру $\xi_{i,0}$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_{i,0}} u''(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i) + \frac{1}{D_u}\left(\frac{\partial f}{\partial u}\frac{\partial u(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}} + \frac{\partial f}{\partial v}\frac{\partial v(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}}\right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_{i,0}} v''(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i) + \frac{1}{D_v}\left(\frac{\partial g}{\partial u}\frac{\partial u(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}} + \frac{\partial g}{\partial v}\frac{\partial v(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}}\right) = 0.$$

Пусть решения нашей системы уравнений обладают достаточной гладкостью, и в первых слагаемых можно поменять местами порядок дифференцирования. Введем новые обозначения $p_{i\xi 0} = \dfrac{\partial u(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}}$ и $q_{i\xi 0} = \dfrac{\partial v(x,\delta_i,\boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,0}}$. Тогда для введенных функций получим на рассматриваемом отрезке систему ЛИНЕЙНЫХ обыкновенных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами

$$p''_{i\xi 0} + \frac{1}{D_u}\left(\frac{\partial f}{\partial u} p_{i\xi 0} + \frac{\partial f}{\partial v} q_{i\xi 0}\right) = 0,$$

$$q''_{i\xi 0} + \frac{1}{D_v}\left(\frac{\partial g}{\partial u} p_{i\xi 0} + \frac{\partial g}{\partial v} q_{i\xi 0}\right) = 0.$$

Для получения начальных условий продифференцируем вектор начальных данных $\boldsymbol{\eta}_i = (\xi_{i,0}, \xi_{i,1}, \eta_{i,0}, \eta_{i,1})$ по переменной $\xi_{i,0}$ Тогда для решения задачи Коши имеем вектор начальных данных $(p_{i\xi 0}, p'_{i\xi 0}, q_{i\xi 0}, q'_{i\xi 0}) = (1,0,0,0)$.

Решив задачу Коши для линейной системы В ВАРИАЦИЯХ с приведенными начальными данными, на правом конце отрезка $\delta_i = x_{i+1} - x_i$ получим значения ДВУХ производных, входящих в матрицу Якоби. Решение системы в вариациях обычно выполняется одновременно с решением исходной нелинейной системы.

Дальнейшее заполнение элементов матрицы Якоби затруднений уже не вызывает. При дифференцировании по параметру $\xi_{i,1}$ аналогично получается задача Коши для функций $p_{i\xi 1} = \dfrac{\partial u(x, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,1}}$ и $q_{i\xi 1} = \dfrac{\partial v(x, \delta_i, \boldsymbol{\eta}_i)}{\partial \xi_{i,1}}$.

При этом необходимо решить такую же систему в вариациях

$$p''_{i\xi 1} + \frac{1}{D_u}\left(\frac{\partial f}{\partial u} p_{i\xi 1} + \frac{\partial f}{\partial v} q_{i\xi 1}\right) = 0,$$

$$q''_{i\xi 1} + \frac{1}{D_v}\left(\frac{\partial g}{\partial u} p_{i\xi 1} + \frac{\partial g}{\partial v} q_{i\xi 1}\right) = 0$$

с граничными условиями $(p_{i\xi 1}, p'_{i\xi 1}, q_{i\xi 1}, q'_{i\xi 1}) = (0,1,0,0)$.

Заключительные замечания

Зачем нужен описанный выше алгоритм? При обычной стрельбе надо на каждой итерации по нелинейности (по пристрелочным параметрам) решать одну задачу Коши. Если есть желание получившуюся систему для пристрелочных параметров решать с помощью уравнений в вариациях, то число задач Коши вырастает до трех. В параллельной пристрелке число решаемых задач Коши вырастает до 5. Число арифметических действий на этом этапе увеличивается, алгоритм получается заведомо неэкономичным. Кроме того, при решении уравнений методом Ньютона необходимо обращать матрицу более высокого порядка. Конечно, обычная стрельба не содержит заведомо параллельных фрагментов. А что можно сказать о преимуществах?

Во-первых, при прочих равных условиях алгоритм параллельной пристрелки все-таки должен выполняться быстрее обычного алгоритма стрельбы при разбиении отрезка более, чем на 4 фрагмента. Отметим, что число обменов также достаточно невелико. Процессоры должны обмениваться только начальными значениями пристрелочных параметров на каждом отрезке, финальными значениями вычисленных функций и элементами матрицы Якоби.

Второе обстоятельство. Обусловленность матрицы системы уравнений. Как отмечалось в замечаниях выше, на число обусловленности матрицы Якоби метода Ньютона влияет главным образом величина $L = \sqrt{b}A$. При решении методом параллельной пристрелки будут влиять величины $L_i = \sqrt{b_i}\delta_i$ (точнее, соотношение на отрезках коэффициентов *a* и *b*). Здесь $a_i = \frac{1}{\delta_i}\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial f}{\partial y'}(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}')dx, \quad b = \frac{1}{\delta_i}\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial f}{\partial y}(x, \overset{0}{y}, \overset{0}{y}')dx.$

За счет удачного выбора узлов разбиения можно добиться хорошей обусловленности матрицы и, следовательно, быстрой сходимости метода! При этом существенную роль играют и выбор начальных значений пристрелочных параметров, и выбор точек разбиения (деления по зонам ответственности исполнителей). А это уже вопросы не алгоритмизируемые до конца, их решение зависит от искусства вычислителей!

Третье замечание. Устойчивость краевых задач часто зависит от выбора устойчивого направления интегрирования. В методе параллельной пристрелки можно на разных отрезках менять направление интегрирования.

Именно эти обстоятельства послужили причиной того, что метод сначала был релизован на компьютерах с SISD архитектурой для расширения класса решаемых нелинейных краевых задач (см [24, 25]). Подробное описание метода содержится в [26, 27].