Алгоритмы
и алгоритмические
языки

ПАКЕТЫ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ

Проблемы и перспективы

Издательство «Наука»

22. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я., Думова А. А.* и др. О многоцелевой проблемно-ориентированной системе обработки результатов экспериментов: Препринт № 142. М.: ИПМ АН СССР, 1976.
23. *Карначук В. И., Шустов Г. В.* Использование динамической памяти в языке ФОРТРАН (инструкция по системе SYDAK). Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1974.
24. *Maclead I. A.* MP/1 — a RORTRAN macroprocessor. — Comput. J., 1971, 14, N 3, p. 229—231.
25. Базисный РЕФАЛ и его реализация на вычислительных машинах (методические рекомендации). М.: ЦНИПИАСС, 1977, вып. V.
26. *Глушков В. М., Вельбицкий И. В.* Технология программирования и проблемы ее автоматизации. — Управляющие системы и машины, 1976, № 6, с. 75—92.
27. *Перчук В. Л., Березовский М. А., Каминский П. Г.* и др. Многоязыковая система программирования МУЛЬТИТРАНС. — В кн.: Машинная графика и ее приложения. Владивосток, 1975.
28. *Гололобов В. И., Чеблаков Б. Г., Чинин Г. Д.* Машинно-ориентированный язык высокого уровня для ЭВМ БЭСМ-6. — В кн.: Развитие программного обеспечения БЭСМ-6. М.: ВЦ АН СССР, 1975, с. 50—51.
29. *Степанов Г. Г.* Алгоритмический язык СИГМА. — В кн.: Системное и теоретическое программирование. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1973, с. 83—102.
30. *Левин Д. Я.* СЕТЛ — язык программирования весьма высокого уровня. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1975.
31. Мониторная система ДУБНА / Под ред. Веретенева В. Ю., Силина И. Н., Широкова В. П. Дубна: ОИЯИ, 1971.
32. *Лебедев В. И., Соколов А. П.* Введение в систему программирования ОС ЕС. М.: Статистика, 1978.
33. *Marchuk G. I., Yershov A. P.* Man-machine interaction in solving a certain class of differential equations. Inform. processing 1965. — In: Proc. of IFIP Congr. 65. L., 1965, vol. 2.
34. *Яненко Н. Н., Карначук В. И., Коновалов А. Н.* Проблемы математической технологии. — В кн.: Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск: ВЦ и Ин-т теорет. и прикл. мех. СО АН СССР, 1977, т. 8, № 3, с. 129—157.
35. *Шараев Д. Я.* Организация больших программ. Свердловск: Изд-во УГУ, 1977.

УДК 519.685

ПАКЕТ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ LTPBVP

А. А. Абрамов, Н. Г. Бураго, В. В. Диткин, А. Л. Дышко, А. Ф. Заболоцкая, Н. Б. Конюхова, Б. С. Парийский, В. И. Ульянова, И. Н. Чечель

В Вычислительном центре АН СССР создан пакет прикладных программ «Линейные обыкновенные краевые задачи», предназначенный для решения двухточечных краевых задач для линейных обыкновенных дифференциальных и разностных уравнений, а также систем таких уравнений. Пакет, включенный в вычислительный комплекс САФРА [1], является частью системы пакетов прикладных программ для реализации общих методов вычислительной математики. Пакет состоит из двух частей: систематизированной библиотеки процедур и программ с именем LTPBVP (Linear Two Point Boundary Value Problem) и пакета SPARSE.

Здесь речь пойдет о пакете LTPBVP, о пакете SPARSE см. [2—4]. Часть программ пакета LTPBVP написана на языке Фортран, часть — на языке Алгол. Реализация пакета предусмотрена на ЭВМ БЭСМ-6.

В пакет LTPBVP включены как методы решения краевых дифференциальных задач, т. е. задач, сформулированных в виде системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с коэффициентами, заданными какими-либо формулами, и соответствующих граничных условий, так и методы решения разностных краевых задач, сформулированных в виде системы линейных алгебраических уравнений специального типа. В пакете LTPBVP реализованы методы решения двухточечных краевых задач, задач с условием периодичности и общей двухточечной задачи с нераспадающимися краевыми условиями. Пакет содержит в виде отдельных процедур и подпрограмм почти все известные авторам варианты метода прогонки. Процедуры пакета LTPBVP (тексты процедур, комментарии к этим текстам и тестовые примеры) сданы в Государственный фонд алгоритмов и программ при ВЦ АН СССР.

При реализации пакета нами использованы работы разных авторов, содержащие описания и исследования методов дифференциальной или разностной прогонки. Мы не приводим здесь их список, соответствующие ссылки даны в работах [5—21].

1. Реализованные методы

Методы, использованные в пакете LTPBVP, можно условно разделить на две группы: а) классические прогонки, включающие классическую дифференциальную прогонку, потоковую прогонку и классическую прогонку с условием периодичности, а также их разностные аналоги; б) ортогональные прогонки.

Для решения самосопряженной краевой задачи в случае одного уравнения второго порядка вида

$$(p(x)y')' - q(x)y = f(x), \quad a \leqslant x \leqslant b, \tag{1}$$

$$\alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) = \gamma_1, \tag{2}$$

$$\alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) = \gamma_2, \tag{3}$$

где x — вещественная переменная; $p(x)$, $q(x)$, $f(x)$ — заданные на $[a, b]$ вещественные функции; α_i, β_i, γ_i — вещественные числа, $\alpha_i^2+\beta_i^2\neq 0$, предусмотрены классический вариант метода прогонки [5] и потоковый вариант для случая, когда $p(x)=1/\sigma(x)$ и $\sigma(x)\geqslant 0$ [6].

Для уравнения вида (1) и граничных условий периодичности предусмотрена циклическая прогонка [5].

Для решения общей двухточечной задачи с разделенными граничными условиями в случае одного уравнения второго порядка

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = f(x), \qquad a \leqslant x \leqslant b,$$

$$\alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) = \gamma_1, \qquad \alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) = \gamma_2,$$

где x — вещественная переменная; $p(x)$, $q(x)$, $f(x)$ — непрерывные на $[a, b]$ функции; α_i, β_i, γ_i — числа, $|\alpha_i|^2+|\beta_i|^2 \neq 0$, применяются два алгоритма ортогональной прогонки: вариант ортогонального переноса граничных условий для задачи с вещественными коэффициентами и его модификация для задачи с комплексными коэффициентами [7].

Для решения краевых задач в случае систем второго порядка вида

$$y'' - P(x)\,y = f(x), \qquad a \leqslant x \leqslant b,$$

$$A_1 y(a) + B_1 y'(a) = C_1, \qquad A_2 y(b) + B_2 y'(b) = C_2,$$

где x — вещественная переменная; $P(x)$ — заданная на $[a, b]$ функция — квадратная матрица порядка n; A_i, B_i — квадратные матрицы порядка n; $f(x)$ — заданная на $[a, b]$ функция-столбец высотой n; C_1, C_2 — столбцы высотой n, используются следующие методы: матричная классическая дифференциальная прогонка для задач с действительными коэффициентами при $B_1=B_2=E$ [8] и два метода ортогональной прогонки для самосопряженной задачи ($P=P^*$, $A_1B_1^*=B_1A_1^*$, $A_2B_2^*=B_2A_2^*$) с действительными [9] и комплексными коэффициентами [10].

Для решения вещественных краевых задач в случае систем первого порядка вида

$$y' - P(x)\,y = f(x), \qquad a \leqslant x \leqslant b, \qquad \psi_a y(a) = g_a, \qquad \psi_b y(b) = g_b,$$

где $P(x)$ — непрерывная на $[a, b]$ квадратная матрица порядка n; $f(x)$ — непрерывный на $[a, b]$ столбец высотой n; ψ_a — матрица размером $k \times n$; ψ_b — матрица размером $(n-k) \times n$; g_a, g_b — столбцы соответственно высотой k и $n-k$, применяются классический вариант метода прогонки [11], три различных метода ортогональной прогонки [12—14] и дифференциальная прогонка с промежуточной ортогонализацией и нормировкой базисных решений [15].

Для решения двухточечных краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с неразделенными граничными условиями, т. е. задач вида

$$y' - P(x)\,y = f(x), \qquad a \leqslant x \leqslant b,$$

$$Ay(a) + By(b) = C,$$

где $P(x)$, A, B — квадратные матрицы порядка n; $f(x)$, C — столбцы высотой n, применяется хорошо известный прием, который сводит эту задачу к задаче вдвое большей размерности с разделенными граничными условиями [16]. Для решения последней задачи в пакете используется метод ортогонального переноса граничных условий.

Во всех подпрограммах, как правило, для решения вспомогательных задач Коши применяется метод Рунге-Кутта с автоматическим выбором шага. Для решения разностных краевых задач используются следующие разностные прогонки: 1) трехточечная скалярная прогонка [17]; 2) трехточечная потоковая прогонка [19]; 3) трехточечная скалярная прогонка с условием периодичности [20]; 4) многоточечная скалярная прогонка [21]; 5) трехточечная матричная прогонка [17, 18]. Для решения возникающих вспомогательных систем линейных алгебраических уравнений применяется метод Гаусса с выбором главного элемента.

2. О работе процедур

При решении конкретных задач возникает вопрос: каким именно методом целесообразно воспользоваться? Для отдельных типов задач можно отдать предпочтение одним методам перед другими. Однако часто заранее трудно что-либо сказать о нужных свойствах задач. Хорошо обусловленная задача не всегда может быть решена классическими методами прогонки. Эти методы гарантируют положительный результат лишь при выполнении определенных условий, налагаемых на решаемую задачу. Хорошо известно, например, что такими достаточными условиями для классической прогонки в случае одного уравнения второго порядка (см. задачу (1)—(3)) являются условия $p(x) \geqslant p_0 > 0$, $q(x) \geqslant q_0 > 0$ и неотрицательность чисел $-\alpha_1$, β_1, α_2 и β_2. Поэтому в ряде процедур, которые реализуют «необщие» методы прогонки, предусматривается выход на метку, показывающую, что данный метод не подходит для решения задачи. В этом случае рекомендуется применять какой-либо вариант ортогональной прогонки. С другой стороны, решаемая задача может оказаться плохо обусловленной. Поэтому во всех подпрограммах пакета предусматривается выход на соответствующую метку, если решаемая задача оказывается с заданной точностью плохо обусловленной.

Поясним сказанное на примере. Поскольку классический вариант метода прогонки хорошо известен, то остановимся на решении этим методом одного уравнения второго порядка. Все остальные процедуры и подпрограммы пакета построены по тому же принципу.

Обращение к процедуре имеет вид

clod (a, b, m, $m1$, *ua*, *ub*, y, $y1$, *pqf*, *eps*, *lm*, *lp*).

Имя процедуры — *clod* — использует буквы слов: classical (классическая прогонка), one (для одного уравнения), differential (дифференциальный вариант).

Здесь

a, b — концы интервала интегрирования, не обязательно $a < b$;

m — целое число, на m частей разбивается интервал $[a, b]$, значения $y(x)$ и $y'(x)$ вычисляются в $m+1$ точках $x_i=a+i \times \times (b-a)/m$, $i=0, 1, \ldots, m$;

$m1=2^k$ ($0 \leqslant k$ — целое число) — целочисленный параметр, который задает начальный шаг интегрирования $h=(b-a)/m/m1$ для решения задачи Коши (значения m и $m1$ не влияют на конечный результат, но удачный выбор этих величин может существенно сократить время счета решаемой задачи);

ua [1 : 3], *ub* [1 : 3] — массивы, задающие граничные условия: $ua[1]=\alpha_1$, $ua[2]=\beta_1$, $ua[3]=\gamma_1$, $ub[1]=\alpha_2$, $ub[2]=\beta_2$, $ub[3]=\gamma_2$;

y [0 : *m*], *y*1 [0 : *m*] — массивы значений $y(x)$ и $y'(x)$ в точках x_i;

pqf — процедура, определяющая коэффициенты уравнения;

eps — заданная абсолютная точность вычислений для $y(x)$ и $y'(x)$, интегрирование задач Коши на один шаг производится с точностью

$$eps1 = \frac{eps}{m \times m1} = \frac{eps}{(b-a)/h};$$

lm — метка, на которую передается управление в случае, когда данный метод не подходит для решения исходной задачи, а именно, когда $(b-a)/h > 10^{10}$, где h — значение шага интегрирования, полученное к моменту выхода на метку *lm*;

lp — метка, на которую передается управление в случае, когда исходная задача плохо обусловлена, а именно, когда определитель алгебраической системы второго порядка, возникающий после прямой прогонки, меньше *eps*.

Очень близки по записи также заголовки процедур, реализующих в работах [6, 7] решение той же задачи (1)—(3) другими методами. При этом для удобства использования порядок перечисления формальных параметров одинаков во всех процедурах. Небольшое отличие состоит в том, что в число формальных параметров процедур, соответствующих алгоритмам ортогональных прогонок, не входит метка *lm*, так как эти методы обеспечивают (по крайней мере теоретически) «безавостность» вычислительного процесса. В заголовках процедур, соответствующих алгоритмам решения системы уравнений, появляются формальные параметры, значения которых дают порядок системы и число граничных условий на каком-либо конце; в процедурах, реализующих решение задач с условием периодичности, отсутствуют параметры, связанные с граничными условиями. В ряде процедур ход вычислений зависит от некоторых числовых параметров, задаваемых пользователем и включенных в список формальных параметров процедуры; удачный выбор их значений может существенно сократить время вычислений.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Горбунов-Посадов М. М., Карпов В. Я., Корягин Д. А.* и др. Пакет прикладных программ САФРА. Системное наполнение: Препринт № 85. М.: ИПМ АН СССР, 1977.
2. *Еремин А. Ю., Марьяшкин Н. Я.* Пакет программ SPARSE для решения систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами. М.: ВЦ АН СССР, 1978.
3. *Еремин А. Ю., Марьяшкин Н. Я.* Пакетная обработка систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами. — Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1978, 18, № 6, с. 1561—1570.

4. *Еремин А. Ю., Марьяшкин Н. Я.* Пакет программ SOLVER. Системы нелинейных функциональных и обыкновенных дифференциальных уравнений с разреженными якобиевыми матрицами. М.: ВЦ АН СССР, 1980.
5. *Левшенко Е. В., Ульянова В. И.* Алгоритмы решения линейных самосопряженных краевых задач и задач с условиями периодичности для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка методами классической дифференциальной прогонки. — Алгоритмы и программы, 1979, № 2, П003413. (Информ. бюл.)
6. *Заболоцкая А. Ф.* Алгоритм решения самосопряженных двухточечных линейных краевых задач для одного дифференциального уравнения второго порядка (потоковая прогонка). — Там же, 1979, № 2, П003475.
7. *Конюхова Н. Б., Ульянова В. И.* Алгоритмы решения линейных краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с вещественными и комплексными коэффициентами методами ортогональной дифференциальной прогонки. — Там же, 1979, № 2, П003409.
8. *Конюхова Н. Б., Левшенко Е. В.* Алгоритм решения самосопряженной двухточечной краевой задачи для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с вещественными коэффициентами (матричная классическая дифференциальная прогонка). — Там же, 1979, № 2, П003442.
9. *Заболоцкая А. Ф.* Алгоритм решения самосопряженной двухточечной линейной краевой задачи для системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с вещественными коэффициентами. — Там же, 1979, № 5, П003853.
10. *Дышко А. Л.* Алгоритм метода прогонки в случае самосопряженной системы дифференциальных уравнений второго порядка с комплексными коэффициентами. — Там же, 1979, № 2, П003474.
11. *Воробьев В. Н.* Алгоритм решения двухточечных краевых задач методом классической прогонки для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка (CLS1D). — Там же, 1978, № 5, П003125.
12. *Абрамов А. А.* Алгоритм решения краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений методом ортогонального переноса граничных условий. — Там же, 1979, № 2, П003412.
13. *Парийский Б. С.* Алгоритм решения краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений методом дифференциальной ортогональной прогонки. — Там же, 1979, № 2, П003492.
14. *Абрамов А. А., Ульянова В. И.* Алгоритм решения краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений модифицированным методом ортогонального переноса граничных условий. — Там же, 1979, № 2, П003476.
15. *Бураго Н. Г., Любимов В. М.* Алгоритм дифференциальной прогонки с промежуточной ортогонализацией и нормировкой базисных решений для систем обыкновенных линейных дифференциальных уравнений. — Там же, 1979, № 4, П003713.
16. *Парийский Б. С.* Алгоритм решения двухточечных краевых задач для систем линейных дифференциальных уравнений с нераспадающимися краевыми условиями. — Там же, 1979, № 2, П003493.
17. *Диткин В. В.* Алгоритмы решения разностных краевых задач методами трехточечных прогонок. — Там же, 1979, № 3, П003554.
18. *Диткин В. В.* Алгоритм решения разностной краевой задачи методом трехточечной матричной прогонки. — Там же, 1980, № 6, П004609.
19. *Дышко А. Л.* Потоковый вариант метода прогонки для разностных задач с сильно меняющимися коэффициентами. — Там же, 1979, № 3, П003638.
20. *Чечель И. И.* Алгоритм метода прогонки к нахождению периодических решений разностных уравнений. — Там же, 1979, № 2, П003490.
21. *Чечель И. И.* Алгоритм метода прогонки для решения разностных краевых задач. — Там же, 1979, № 2, П003489.