УДК 517.958

Чисельне розв’язування нелінійних крайових задач на півосі, які моделюють перенесення протонів у системах із водневим зв’язком

Мирослав Кутнів[1], Оксана Паздрій[2]

[1] д. ф.-м. н., доцент, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013; e-mail: kutniv@yahoo.com
[2] Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013; e-mail: oksana.pazdriy@gmail.com

Крайову задачу на півосі для нелінійного звичайного диференціального рівняння другого порядку, яка описує процес перенесення протонів у системах із водневим зв’язком, розв’язано за допомогою триточкових різницевих схем високого порядку точності. Ці схеми побудовані на скінченній нерівномірній сітці, для них отримано оцінку точності. Наведено результати чисельного розв’язування задачі з заданою точністю й автоматичним вибором точок сітки.

Ключові слова: перенесення протонів, системи з водневим зв’язком, нелінійні звичайні диференціальні рівняння, крайова задача, триточкова різницева схема.

Вступ. Однокомпонентну математичну модель перенесення протонів у системах із водневим зв’язком, яка описується крайовою задачею на безмежному інтервалі для нелінійного рівняння Клейна-Гордона, побудовано у працях [1, 2]. Питання існування та єдиності розв’язку таких крайових задач, а також чисельні методи їх розв’язування розглядалися у роботах [3-5]. Особливістю застосування таких чисельних методів є те, що крайові умови на безмежності заміняються крайовими умовами у деяких скінченних точках, які підбираються методом проб, що не дозволяє отримати оцінку точності. Якщо розв’язок крайової задачі для нелінійного рівняння Клейна-Гордона шукати у вигляді біжучої хвилі, то ця задача зводиться до крайової задачі для нелінійного звичайного диференціального рівняння другого порядку на безмежному інтервалі. У [6] побудовані та обґрунтовані триточкові різницеві схеми порядку точності $\overline{n} = 2\left[(n+1)/2\right]$ (n — ціле додатне, $[\cdot]$ — ціла частина) розв’язування нелінійних звичайних диференціальних рівнянь другого порядку на півпрямій. У цій праці розроблені в [6] різницеві схеми застосовано для розв’язування нелінійної крайової задачі на півпрямій, яка моделює процес перенесення протонів у системах із водневим зв’язком.

1. Нелінійна крайова задача на півосі, яка моделює процес перенесення протонів у системах із водневим зв'язком

Розглянемо крайову задачу для нелінійного рівняння Клейна-Гордона

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial \xi^2}-\Phi'(U), \qquad \xi\in(-\infty,\infty), \tag{1}$$

$$U(\xi,0)=U_0(\xi), \qquad \frac{\partial U(\xi,0)}{\partial t}=\bar{U}_0(\xi), \tag{2}$$

$$\lim_{\xi\to-\infty}U(\xi,t)=U_1, \qquad \lim_{\xi\to\infty}U(\xi,t)=U_2, \tag{3}$$

де U_1, U_2 — локальні мінімуми функції $\Phi(U)$, причому $\Phi(U_1)=\Phi(U_2)=0$. Математичні моделі багатьох фізичних процесів, зокрема процесу перенесення протонів у системах із водневим зв'язком, зводяться до задачі (1)-(3) (див. [1, 2, 4, 5]). Для випадку однокомпонентної математичної моделі перенесення протонів у системах із водневим зв'язком потенціальна функція $\Phi(U)$ може мати вигляд

$$\Phi(u)=\left(1-u^2\right)^2\Big/4, \quad \Phi(u)=\left(1-|u|\right)^2, \quad \Phi(u)=1-\cos u,$$

$$\Phi(u)=2\left\{\frac{\cos\left(u/2\right)-\lambda}{1-\nu\left[\cos\left(u/2\right)-\lambda\right]}\right\}^2, \quad 0\le\lambda<1, \quad -\left(1+\lambda\right)^{-1}<\nu<\left(1-\lambda\right)^{-1}.$$

Розв'язок задачі (1)-(3) будемо шукати у вигляді біжучої хвилі

$$U(\xi,t)=u(x),$$

де $x=\xi-vt$. Тоді отримаємо звичайне диференціальне рівняння

$$\left(1-v^2\right)u''=\Phi'(u), \qquad x\in(-\infty,\infty), \tag{4}$$

з граничними умовами

$$\lim_{x\to-\infty}u(x)=U_1, \qquad \lim_{x\to\infty}u(x)=U_2. \tag{5}$$

Після заміни $\tilde{x}=x\Big/\sqrt{2\left(1-v^2\right)}$ задача (4), (5) буде мати вигляд

$$u''=2\Phi'(u), \qquad x\in(-\infty,\infty), \tag{6}$$

$$\lim_{x\to-\infty}u(x)=U_1, \qquad \lim_{x\to\infty}u(x)=U_2. \tag{7}$$

Нехай $\Phi(u)=\left(1-u^2\right)^2\Big/4$, тоді

$$u''=-2u\left(1-u^2\right), \qquad x\in(-\infty,\infty),$$

$$\lim_{x\to-\infty}u(x)=-1, \qquad \lim_{x\to\infty}u(x)=1.$$

Зазначимо, що функція $u(x)$, яка є розв'язком цієї задачі, — непарна, а тому задачу можна розглядати на півосі

$$u'' = -2u\left(1-u^2\right), \qquad x \in (0,\infty),$$
$$u(0) = 0, \qquad \lim_{x\to\infty} u(x) = 1.$$

Після заміни змінних $\tilde{u}(x) = u(x) - 1$ отримаємо задачу

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 4u = 2u^3 + 6u^2, \qquad x \in (0,\infty), \tag{8}$$
$$u(0) = -1, \qquad \lim_{x\to\infty} u(x) = 0 \tag{9}$$

із відомим точним розв'язком $u(x) = \mathrm{th}(x) - 1$. Крайову задачу (8), (9) можна записати у вигляді

$$\frac{d^2u}{dx^2} - m^2 u = -f(x,u), \qquad x \in (0,\infty), \tag{10}$$
$$u(0) = \mu_1, \qquad \lim_{x\to\infty} u(x) = 0, \tag{11}$$

де $m = 2$, $f(x,u) = -2u^3 - 6u^2$, $\mu_1 = -1$.

Теорема 2.2 (див. [6]) дає достатні умови існування та єдиності розв'язку задачі (10), (11)

$$f_u(x) \equiv f(x,u) \in Q^0[0,\infty), \ \left|f(x,u)\right| \le K(x) \ \forall x \in [0,\infty), \ u \in \Omega\left([0,\infty), p(x), r(x)\right),$$

$$\lim_{x\to\infty} \exp(-mx)\int_0^x \exp\left(m\xi\right)K\left(\xi\right)d\xi = 0, \qquad \lim_{x\to\infty} \exp(mx)\int_x^\infty \exp\left(-m\xi\right)K\left(\xi\right)d\xi = 0,$$

$$p(x) \le \int_0^\infty G\left(x,\xi\right) f\left(\xi,u\left(\xi\right)\right)d\xi + u^{(0)}(x) \le r(x),$$

$$\left|f(x,u) - f(x,v)\right| \le L(x)\left|u-v\right|, \quad \int_0^\infty G\left(x,\xi\right)L\left(\xi\right)d\xi \le L_1 < 1 \quad \forall x \in [0,\infty).$$

Тут $Q^0[0,\infty)$ — клас кусково-неперервних функцій зі скінченною кількістю точок розриву першого роду, $u^{(0)}(x) = \mu_1 \exp(-mx)$, множина функцій

$$\Omega\left([0,\infty), p(x), r(x)\right) = \left\{u(x) : u(x) \in C[0,\infty), p(x) \le u(x) \le r(x)\right\},$$

$G\left(x,\xi\right)$ — функція Гріна задачі (10), (11)

$$G\left(x,\xi\right) = \begin{cases} \dfrac{\mathrm{sh}(mx)\exp\left(-m\xi\right)}{m}, & 0 \le x \le \xi, \\ \dfrac{\exp(-mx)\mathrm{sh}\left(m\xi\right)}{m}, & x \ge \xi. \end{cases}$$

Покажемо, що існує єдиний розв'язок задачі (8), (9). Дійсно, оскільки

$$p(x) = -1 + \operatorname{th}(x) \le -\exp(-2x) = r(x)\,, \quad L(x) = 6\left[1 - \left(\exp(-2x) - 1\right)^2\right],$$

$$\int_0^\infty G(x,\xi)L(\xi)d\xi = \frac{1}{2}\left(\exp(-4x) - \exp(-2x)\right) + 3x\exp(-2x) < 1\,,$$

то, згідно з цією теоремою задача (8), (9) має єдиний розв'язок.

2. Триточкові різницеві схеми високого порядку точності

На інтервалі $[0,\infty)$ введемо нерівномірну сітку $\hat{\bar{\omega}}_N = \{x_j \in [0,\infty),\ j = \overline{0,N}, x_0 = 0\,,$ $h_j = x_j - x_{j-1} > 0,\ h_1 + h_2 + ... + h_N = x_N\}$. На кроки h_j сітки $\hat{\bar{\omega}}_N$ накладемо такі обмеження $c_1 \le h_{\max} / h_{\min} \le c_2$, де c_1, c_2 — дійсні сталі. Для досягнення максимального порядку збіжності різницевої схеми треба, щоб $1/h_{\max} \le x_N \le 1/h_{\min}$. Звідси випливають нерівності $h_{\max} \le c_2/\sqrt{N}, h_{\min} \ge 1/c_2\sqrt{N}, \sqrt{N}/c_2 \le h_{\min}N \le x_N \le h_{\max}N \le c_2\sqrt{N}$. Отже, $h_{\max} \to 0$, $x_N \to \infty$ у разі $N \to \infty$.

Для чисельного розв'язування задачі (10), (11) у [6] побудовано триточкову різницеву схему вигляду

$$\left(ay_{\bar{x}}^{(\bar{n})}\right)_{\hat{x},j} - d\left(x_j\right)y_j^{(\bar{n})} = -\phi^{(\bar{n})}\left(x_j, y^{(\bar{n})}\right), \quad j = \overline{1, N-1} \tag{12}$$

$$y_0^{(\bar{n})} = \mu_1, \qquad -a\left(x_N\right)y_{\bar{x},N}^{(\bar{n})} = \beta_2 y_N^{(\bar{n})} - \mu_2^{(\bar{n})}\left(x_N, y^{(\bar{n})}\right), \tag{13}$$

де

$$y_{\bar{x},j} = \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j}, \qquad y_{\hat{x},j} = \frac{y_{j+1} - y_j}{\hbar_j}, \qquad \hbar_j = \frac{h_j + h_{j+1}}{2}\,,$$

$$a\left(x_j\right) = \frac{mh_j}{\operatorname{sh}\left(mh_j\right)}, \quad j = \overline{1,N}, \qquad \beta_2 = m\frac{\exp\left(mh_N\right) - 1}{\operatorname{sh}\left(mh_N\right)} \tag{14}$$

$$d\left(x_j\right) = \frac{m}{\hbar_j}\left\{\frac{\operatorname{ch}\left(mh_j\right) - 1}{\operatorname{sh}\left(mh_j\right)} + \frac{\operatorname{ch}\left(mh_{j+1}\right) - 1}{\operatorname{sh}\left(mh_{j+1}\right)}\right\}, \quad j = \overline{1, N-1}\,, \tag{15}$$

$$\phi^{(\bar{n})}\left(x_j, u\right) = \hbar_j^{-1}\Bigg[Z_2^{(n)j}\left(x_j, u\right) - Z_1^{(n)j}\left(x_j, u\right) + \\ + \frac{m\left(\operatorname{ch}\left(mh_j\right)Y_1^{(\bar{n})j}\left(x_j, u\right) - u_{j-1}\right)}{\operatorname{sh}\left(mh_j\right)} + \frac{m\left(\operatorname{ch}\left(mh_{j+1}\right)Y_2^{(\bar{n})j}\left(x_j, u\right) - u_{j+1}\right)}{\operatorname{sh}\left(mh_{j+1}\right)}\Bigg], \tag{16}$$

$$\mu_2^{(\bar{n})}\left(x_N, u\right) = \frac{mA_1}{x_N} + \frac{mA_2 - A_1}{x_N^2} + \ldots + \frac{mA_{\bar{n}-1} - (\bar{n}-2)A_{\bar{n}-2}}{x_N^{\bar{n}-1}} - \\ - Z_1^{(n)N}\left(x_N, u\right) + \frac{m\left(\operatorname{ch}\left(mh_N\right)Y_1^{(\bar{n})N}\left(x_N, u\right) - u_{N-1}\right)}{\operatorname{sh}\left(mh_N\right)}, \tag{17}$$

ISSN 1816-1545 Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології
2011, вип. 13, 95-102

якщо хоча б один із коефіцієнтів $A_i, i=\overline{1,\bar{n}-1}$ відмінний від нуля,

$$\mu_2^{(\bar{n})}\left(x_N,u\right)=-Z_1^{(n)N}\left(x_N,u\right)+\frac{m\left(\operatorname{ch}\left(mh_N\right)Y_1^{(\bar{n})N}\left(x_N,u\right)-u_{N-1}\right)}{\operatorname{sh}\left(mh_N\right)}, \tag{18}$$

якщо $A_i=0, i=\overline{1,\bar{n}-1}$. Значення $Z_\alpha^{(n)j}, Y_\alpha^{(\bar{n})j}, \alpha=1,2$ — чисельні розв'язки задач Коші

$$\frac{dY_\alpha^j(x,u)}{dx}=Z_\alpha^j(x,u), \qquad \frac{dZ_\alpha^j(x,u)}{dx}-m^2Y_\alpha^j(x,u)=-f\left(x,Y_\alpha^j(x,u)\right), \tag{19}$$

$$x_{j-2+\alpha}<x<x_{j-1+\alpha},$$

$$Y_\alpha^j\left(x_{j+(-1)^\alpha},u\right)=u_{j+(-1)^\alpha}, \qquad Z_\alpha^j\left(x_{j+(-1)^\alpha},u\right)=\left.\frac{du}{dx}\right|_{x=x_{j+(-1)^\alpha}}, \tag{20}$$

$$j=2-\alpha, 3-\alpha,\ldots,N+1-\alpha; \qquad \alpha=1,2,$$

отримані будь-яким однокроковим методом порядку точності $\bar{n}$, а коефіцієнти $A_i, i=\overline{1,\bar{n}-1}$ знаходяться з системи рекурентних рівнянь

$$F\left(x,\{A\}\right)=\sum_{i=1}^{\infty}\frac{i(i+1)A_i}{x^{i+2}}-m^2\sum_{i=1}^{\infty}\frac{A_i}{x^i}+f\left(x,\sum_{i=1}^{\infty}\frac{A_i}{x^i}+r(x)\right)+r''(x)-m^2r(x)=0,$$

$$r(x)\in C^\infty[x_N,\infty), \qquad \lim_{x\to\infty}x^kr(x)=0, \quad k=1,2,\ldots$$

У роботі [6] доведено, що існує стала $N_0>0$ така, що для всіх $N\ge N_0$ для похибки різницевої схеми (12)-(18) справджується оцінка

$$\left\|y^{(\bar{n})}-u\right\|_{1,\infty,\hat{\omega}_N^+}^*=\max\left\{\left\|y^{(\bar{n})}-u\right\|_{0,\infty,\hat{\omega}_N^+},\left\|\frac{dy^{(\bar{n})}}{dx}-\frac{du}{dx}\right\|_{0,\infty,\hat{\hat{\omega}}_N}\right\}\le$$

$$\le M\max\left\{|h|^{\bar{n}},\left(\frac{1}{x_N}\right)^{\bar{n}}\right\}\le M|h|^{\bar{n}}\le MN^{-\bar{n}/2},$$

де

$$|h|=\max_{j=1,N}h_j, \qquad \|u\|_{0,\infty,\hat{\omega}_N^+}=\max_{i=1,N}|u_i|, \qquad \|u\|_{0,\infty,\hat{\hat{\omega}}_N}=\max_{i=0,N}|u_i|,$$

$$\frac{dy^{(\bar{n})}\left(x_0\right)}{dx}=Z_2^{(n)0}\left(x_0,y^{(\bar{n})}\right)+\frac{m\cdot\operatorname{ch}\left(mh_1\right)\left(Y_2^{(\bar{n})0}(x_0,y^{(\bar{n})})-y_0^{(\bar{n})}\right)}{\operatorname{sh}\left(mh_1\right)},$$

$$\frac{dy^{(\bar{n})}\left(x_j\right)}{dx}=Z_1^{(n)j}\left(x_j,y^{(\bar{n})}\right)+\frac{m\cdot\operatorname{ch}\left(mh_j\right)\left(y_j^{(\bar{n})}-Y_1^{(\bar{n})j}\left(x_j,y^{(\bar{n})}\right)\right)}{\operatorname{sh}\left(mh_j\right)}, \quad j=\overline{1,N},$$

сталі M не залежать від $|h|, 1/x_N$. Із цієї оцінки випливає, що різницева схема (12)-(18) має порядок точності $\bar{n}$, як відносно розв’язку, так і відносно похідної від розв’язку.

3. Чисельне розв’язування крайової задачі на півпрямій

Для чисельного розв’язування задачі (8), (9) із заданою точністю ε та автоматичним вибором точок сітки застосовувався запропонований у [7] алгоритм, який використовує триточкові різницеві схеми 4-го $\left(n=\bar{n}=4\right)$ і 6-го $\left(n=\bar{n}=6\right)$ порядку точності. Оскільки диференціальне рівняння (8) автономне, то $A_i=0, i=1,2,...$ і вираз для $\mu_2^{(\bar{n})}$ матиме вигляд (18).

Задачі Коші (19), (20) розв’язувалися за допомогою вкладених методів Рунге-Кутта-Ньюстрьома 4-го та 6-го порядків точності (див. [8], табл. 5).

Для знаходження розв’язку $y_j^{(\bar{n})}, j=\overline{1,N-1}$, різницевої схеми (12)-(16), (18) використовувався метод послідовних наближень (див. [6])

$$\left(a y_{\bar{x}}^{(\bar{n},k)}\right)_{\hat{x},j} - d\left(x_j\right) y_j^{(\bar{n},k)} = -\phi^{(\bar{n})}\left(x_j, y^{(\bar{n},k-1)}\right), \quad j=\overline{1,N-1}, \tag{21}$$

$$y_0^{(\bar{n},k)}=\mu_1, \quad -a\left(x_N\right) y_{\bar{x},N}^{(\bar{n},k)} = \beta_2 y_N^{(\bar{n},k)} - \mu_2^{(\bar{n})}\left(x_N, y^{(\bar{n},k-1)}\right), \quad k=1,2,..., \tag{22}$$

$$y^{(\bar{n},0)}\left(x_j\right)=\mu_1 \exp\left(-m x_j\right), \quad \frac{d y^{(\bar{n},0)}\left(x_j\right)}{dx} = -m\mu_1 \exp\left(-m x_j\right), \quad j=\overline{0,N}.$$

Наближене значення похідної від розв’язку в точках сітки обчислювалося за формулами

$$\frac{d y^{(\bar{n},k)}\left(x_0\right)}{dx} = Z_2^{(\bar{n})0}\left(x_0, y^{(\bar{n},k)}\right) + \frac{m \operatorname{ch}\left(m h_1\right)\left(Y_2^{(\bar{n})0}\left(x_0, y^{(\bar{n},k)}\right) - y_0^{(\bar{n},k)}\right)}{\operatorname{sh}\left(m h_1\right)},$$

$$\frac{d y^{(\bar{n},k)}\left(x_j\right)}{dx} = Z_1^{(\bar{n})j}\left(x_j, y^{(\bar{n},k)}\right) + \frac{m \operatorname{ch}\left(m h_j\right)\left(y_j^{(\bar{n},k)} - Y_1^{(\bar{n})j}\left(x_j, y^{(\bar{n},k)}\right)\right)}{\operatorname{sh}\left(m h_j\right)},$$

$$j=\overline{1,N}; \qquad k=1,2,\ldots$$

При цьому розв’язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь (21), (22) з тридіагональною матрицею знаходився методом прогонки. Результати розрахунків задачі наведені в таблиці, де $er=\left\|y^{(4)}-u\right\|^*_{1,\infty,\hat{\omega}_N^+}$, $NFUN$ — кількість обчислень правих частин диференціального рівняння (8), а ε — задана точність. Як видно з таблиці, фактична похибка er не перевищує заданої точності ε, що говорить про надійність такого підходу до розв’язання цієї задачі.

Таблиця

Результати розв'язання прикладу

ε	*N*	*NFUN*	*er*
10^{-3}	4	1320	$0{,}552\cdot10^{-3}$
10^{-5}	19	5280	$0{,}704\cdot10^{-6}$
10^{-7}	75	46164	$0{,}352\cdot10^{-8}$
10^{-9}	417	225948	$0{,}398\cdot10^{-10}$

Висновки. За допомогою заміни змінних крайову задачу для рівняння з частинними похідними (1), (2) зведено до крайової задачі для звичайних диференціальних рівнянь (6), (7). Виразити розв'язок крайової задачі (6), (7) через елементарні функції вдається далеко не завжди, але знайти її розв'язок за допомогою чисельних методів значно простіше, ніж чисельно розв'язати крайову задачу (1), (2). Особливістю крайової задачі (6), (7) є безмежність інтервалу, на якому вона розглядається, а тому для чисельного розв'язування необхідно використовувати такі різницеві схеми, які для крайових задач на безмежному інтервалі записуються на скінченній сітці та для яких отримано оцінку точності. У статті для чисельного розв'язування крайової задачі на півпрямій (8), (9) використані триточкові різницеві схеми, побудовані в роботі [6]. Наведено результати розрахунку (див. таблицю), які підтверджують теоретичні висновки, про високу точність чисельного розв'язку задачі за невеликих обчислювальних затрат і надійність запропонованого підходу до розв'язування.

Література

[1] *Antonchenko, V. Ya.* Solutions and proton motion in ice-like structures / *V. Ya. Antonchenko, A. S. Davydov, A. V. Zolotaryuk* // Phys. Stat. Sol. (b). — 1983. — Vol. 115, No 2. — P. 631-640.

[2] *Zolotaryuk, A. V.* One-component model for proton transport in hydrogen-bonded chains / *A. V. Zolotaryuk, S. Pnevmatikos* // Physics Letters A. — 1990. — Vol. 143, No 4, 5. — P. 233-238.

[3] *Strauss, W. A.* Nonlinear wave equations: Exposit Lect. CBMS Reg. Conf. George Mason Univ., Jan. 16-20, 1989. Providence (R. I.): Amer. Math. Soc., 1989. — X., 91 p. — (Reg. Conf. Math. — No 73).

[4] *Бєлов, Ю. А.* Дослідження нелінійних математичних моделей перенесення протонів у системах з водневим зв'язком / *Ю. А. Бєлов, Л. Д. Гординський, М. В. Кутнів* // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. науки. — 2003. — Вип. 1. —С. 59-68.

[5] *Бєлов, Ю. А.* Про існування розв'язків нелінійної моделі переносу протонів у системах з водневим зв'язком / *Ю. А. Бєлов, Л. Д. Гординський, М. В. Кутнів* // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. науки. — 2003. — Вип. 3. — С. 91-95.

[6] Difference schemes for nonlinear BVPs on the semiaxis / *I. P. Gavrilyuk, M. Hermann, M. V. Kutniv, V. L. Makarov* // Computational Methods in Applied Mathematics (CMAM). — 2007. — Vol. 7, No 1. —P. 25-47.

[7] Adaptive algorithms based on exact difference schemes for nonlinear BVPs on the half-axis / *I. P. Gavrilyuk, M. Hermann, M. V. Kutniv, V. L. Makarov* // Applied Numerical Mathematics. — 2009. — Vol. 59, No 7. — P. 1529-1536.

[8] *Dormand, J. R.* Families of Runge-Kutta-Nystrom formulae / *J. R. Dormand, E. A. El-Mikkawy, P. J. Prince* // IMA Journal of Numerical Analysis. — 1987. — Vol. 7, No 3. — P. 235-250.

Numerical solution of nonlinear boundary value problems on the semiaxis, which simulate proton transfer in hydrogen-bonded systems

Myroslav Kutniv, Oksana Pazdriy

Boundary value problems on a semi-axles for the nonlinear ordinary differential equation of second order, which describes the process of transfer of protons in hydrogen-bonded systems, has been solved using three-point difference schemes of high order accuracy. These schemes are constructed on a finite non-uniform grid, for which the estimation accuracy has been obtained. The results of numerical solution of the problem with given accuracy and automatic selection of grid points are presented.

Численное решение нелинейных краевых задач на полуоси, моделирующих перенос протонов в системах с водородной связью

Мирослав Кутнив, Оксана Паздрий

Краевая задача на полуоси для нелинейного обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка, описывающаю процесс переноса протонов в системах с водородной связью, решена с помощью трехточечных разностных схем высокого порядка точности. Эти схемы построены на конечной неравномерной сетке, для них получена оценка точности. Приведены результаты численного решения задачи с заданной точностью и автоматическим выбором точек сетки.

Отримано 26.11.10