УДК 519.622.2 + 517.9

РЕШЕНИЕ ЖЁСТКОЙ НАЧАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ШЕФФЕРА НЕЯВНЫМИ МЕТОДАМИ

***Ф.С. Кузьмицкий**, 4 курс*
*Научный руководитель – **А.П. Худяков**, к.ф.–м.н.*
Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина

Химическая реакция HIRES с участием восьми реагентов была предложена Шеффером (1975) для объяснения «роста и дифференциации растительной ткани независимо от фотосинтеза при высоких уровнях светового облучения» [1, с. 168]. Соответствующие уравнения имеют вид:

$$
\begin{aligned}
&y_1' = -1.71\cdot y_1 + 0.43\cdot y_2 + 8.32\cdot y_3 + 0.0007,\\
&y_2' = 1.71\cdot y_1 - 8.75\cdot y_2,\\
&y_3' = -10.03\cdot y_3 + 0.43\cdot y_4 + 0.035\cdot y_5,\\
&y_4' = 8.32\cdot y_2 + 1.71\cdot y_3 - 1.12\cdot y_4,\\
&y_5' = -1.745\cdot y_5 + 0.43\cdot y_6 + 0.43\cdot y_7,\\
&y_6' = -280\cdot y_6 y_8 + 0.69\cdot y_4 + 1.71\cdot y_5 - 0.43\cdot y_6 + 0.69\cdot y_7,\\
&y_7' = 280\cdot y_6 y_8 - 1.81\cdot y_7,\\
&y_8' = -y_7'\\
&y_1(0) = 1,\ y_2(0) = y_3(0) = \ldots = y_7(0) = 0,\ y_8(0) = 0.0057
\end{aligned}
\tag{1}
$$

и для выдачи были выбраны значения $x_{out} = 321{,}8122$ и $x_{out} = 421{,}8122$.

При использовании неявных методов решения задачи Коши на каждом шаге вычислительного процесса приходится решать с высокой точностью системы нелинейных уравнений. В связи с этим особый интерес представляют итерационные процессы, имеющие не только широкую область сходимости, но и, по возможности, более высокую скорость сходимости. В этом случае мы не только ускоряем процедуру поиска решения, но и, как правило, уменьшаем вероятность «разболтки» итерационного процесса. Поэтому одной из важнейших задач является решение систем нелинейных уравнений.

Для решения нелинейных уравнений существует большое количество методов, каждый из которых имеет свои достоинства и недостатки. Наиболее известным является метод Ньютона. К достоинствам этого метода относят высокую локальную скорость сходимости. Однако он имеет очень узкую область сходимости. Для расширения области сходимости вводят регулятор длины шага β_n (демпфирующий множитель).

Одним из эффективных итерационных процессов для решения уравнений

$$f(x) = 0;\ f\left(D \subset R^n \to R^n\right) \tag{2}$$

при предположениях относительно нелинейного оператора f

$$f \in C_D^{(2)} \text{ è } \left\|\left[f'(x)\right]^{-1}\right\| \le B,\ \left\|f''(x)\right\| \le K,\ \forall x \in D \tag{3}$$

является следующий итерационный процесс, локально сходящийся с квадратичной скоростью [2]:

Шаг 1. Решается линейная система:

$$f'(x_n)(x_{n+1} - x_n) = f'(x_n)\Delta x_n = -f(x_n),\ n = 0,1,\ldots \tag{4}$$

Шаг 2. Вносится поправка в вектор x_n для определения вектора очередного приближения

$$x_{n+1} = x_n + \beta_n \Delta x_n,\ n = 0,1,\ldots \tag{5}$$

Шаг 3. Проверяется окончание итерационного процесса: если $\left\|f(x_{n+1})\right\| < \varepsilon$ – конец просчётов (ε – точность решения нелинейной системы), иначе переход на шаг 4.

Шаг 4. Определяется новая шаговая длина: если $\left\|f(x_{n+1})\right\| < \left\|f(x_n)\right\|$, то $\beta_{n+1}=1$, иначе β_n пересчитывается, например, по одной из следующих формул:

$$\beta_{n+1} = \min\left(1, \frac{\gamma_n \left\|f(x_n)\right\|}{\left\|f(x_{n+1})\right\| \beta_n}\right),\ \gamma_{n+1} = \frac{\gamma_n \left\|f(x_n)\right\|}{\left\|f(x_{n+2})\right\|},\quad \gamma_0 = \beta_0^2. \tag{6}$$

Как правило, линейная система, решаемая на каждом шаге вычислительного процесса при решении уравнения (2), является плохо обусловленной, поэтому возможно использование регуляризованного варианта этого процесса [2], в котором на шаге 1 вместо системы (4) решается система

$$\left(\alpha\|f(x_n)\|^2+\bar{f}'(x_n)f'(x_n)\right)\Delta x_n=-\bar{f}'(x_n)f(x_n),\ n=0,1,\ldots \qquad (7)$$

Решение жёсткой задачи (1) было проведено неявным методом средней точки, трапеций и неявными методами Адамса 3–го и 4–го порядков. Задача решалась на всём отрезке [0;421.8122], причем шаг h был согласован со значениями корней полинома Чебышева, т.к. для восстановления полученного решения использовался отрезок ряда Фурье по этим полиномам. Разбиение отрезка производилось следующим образом: весь отрезок интегрирования разбивался на M равных частичных отрезков. Затем на каждом частичном отрезке задавалась чебышевская сетка и задача решалась предложенными выше методами. По полученным наборам точек восстанавливались функции y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6, y_7, y_8 при помощи полиномов Чебышева. Восстановленные функции подставлялись в исходную задачу, для того, чтобы узнать локальные невязки на каждом отрезке [x_{ik}, x_{ik+1}], $i=\overline{1,M},\ k=\overline{0,N-1}$, где N – число узлов на каждом частичном отрезке.

Для контроля решения на каждом шаге вычислительного процесса использовался принцип Рунге–Ромберга с точностью 10^{-13}. Нелинейная система на каждом шаге решалась с точностью 10^{-15}. Точность решения проверялась по значению $\|R_i\|_{L_2},\ i=\overline{1,8}$:

$$\|R_i\|_{L_2}=\sqrt{\int_0^{x_{out}}R_i^2(x)dx},\ i=\overline{1,8},$$

где $R_i(x)$ – невязка на i–ом уравнении системы (1):

$$R_i(x)=y_i'-f_i(x,y_i).$$

Интеграл вычислялся с применением большой формулы средних прямоугольников.

Результаты эксперимента для метода средней точки, метода трапеций и неявных методов Адамса 3–го и 4–го порядков приведены в таблице, в ячейках которой записаны вариации нормы невязки в зависимости от компоненты решения. Для восстановления функций $y_i,\ i=\overline{1,8}$ использовался полином Чебышева 100–ой степени.

Таблица – Точность решения задачи Шеффера

Метод решения	Количество точек разбиения отрезка		
	1500	3000	7500
Неявный метод средней точки	$8.2\cdot10^{-12}\div3.2\cdot10^{-10}$	$8.2\cdot10^{-12}\div3.2\cdot10^{-10}$	$8.2\cdot10^{-12}\div3.2\cdot10^{-10}$
Неявный метод трапеций	$8.2\cdot10^{-12}\div3.2\cdot10^{-10}$	$8.2\cdot10^{-12}\div3.2\cdot10^{-10}$	$8.2\cdot10^{-12}\div3.2\cdot10^{-10}$
Неявный метод Адамса 3–го порядка	$1.1\cdot10^{-12}\div3.2\cdot10^{-10}$	$1.1\cdot10^{-12}\div3.2\cdot10^{-10}$	$1.1\cdot10^{-12}\div3.1\cdot10^{-10}$
Неявный метод Адамса 4–го порядка	$1.1\cdot10^{-12}\div3.1\cdot10^{-10}$	$1.1\cdot10^{-12}\div3.1\cdot10^{-10}$	$1.1\cdot10^{-12}\div3.1\cdot10^{-10}$

Как видно из приведенной таблицы неявные методы Адамса являются более точными, но результат практически не меняется с увеличением порядка. Обычно это связано с ростом вычислительных погрешностей при увеличении порядка метода. Поэтому лучшим методом решения данной задачи из рассмотренных является неявный метод Адамса 3–го порядка, так как он обладает наименьшей погрешностью и требует разумных вычислительных затрат.

Список использованных источников

1. Хайрер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально–алгебраические задачи / Э. Хайрер, Г. Ваннер. – Пер. с англ. – М. : Мир, 1999. – 685 с.

2. Мадорский, В.М. Квазиньютоновские методы решения нелинейных уравнений / В.М. Мадорский. – Брест : изд–во БрГУ, 2005. – 186 с.