

УДК 519.688:519.615.2+519.624.2

ПАКЕТ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ NEWST
РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА С ПАРАМЕТРОМ

Р.Г. Лукьянова

§1. Общая характеристика пакета прикладных программ NEWST

Пакет прикладных программ NEWST предназначен для численного решения нелинейных краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка вида

$$Y''(x) + B(x)Y'(x) + C(x)Y(x) + D(x) + QEF(x, Y) = 0, x \in (a, b), (1)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} u_0 Y' + v_0 Y &= w_0 \quad \text{при} \quad x = a, \\ u_N Y' + v_N Y &= w_N \quad \text{при} \quad x = b, \end{aligned} (2)$$

где $B(x), C(x), E, u_0, v_0, u_N, v_N$ - диагональные матрицы размерности $M \times M$ с соответствующими элементами $B_i(x), C_i(x), E_i, u_{0i}, v_{0i}, u_{Ni}, v_{Ni}, i = 1, \dots, M$; $Y(x), D(x), F(x, Y), w_0, w_N$ - векторы-столбцы размерности M с компонентами $Y_i(x), D_i(x), F_i(x, Y), w_{0i}, w_{Ni}, i = 1, \dots, M$; Q - скалярный параметр.

Формулировка проблемы возникла в связи с описанием стационарных режимов каталитических процессов. При этом нелинейность системы уравнений объясняется нелинейностью выражений скоростей химических реакций, а в качестве параметра выступает множитель, характеризующий интенсивность одной из скоростей реакций.

Нелинейные краевые задачи с параметром характеризуются, как правило, множественностью решений. Пакет программ NEWST позволяет численно определять в заданной области изменения параметра и количество решений краевой задачи, и сами решения, естественно, в предположении их существования.

В ходе работы алгоритма осуществляется дискретизация задачи (1), (2) путем введения сетки на отрезке $[a, b]$ и использования сплайн-интерполяции нелинейных функций $F_i(x, Y)$ [1]. Возникающая при этом серия линейных краевых задач служит для определения коэффициентов системы трансцендентных уравнений, к решению которой в конечном итоге сводится процесс отыскания решения исходной краевой задачи. К системе трансцендентных уравнений применяется метод Ньютона с параметризацией [2]. Отметим, что в алгоритм решения задачи (1), (2) заложена процедура оптимизации расположения узлов сетки. Это позволяет успешно преодолевать трудности, связанные с поиском решений, имеющих особенности типа пограничного слоя.

Структурно NEWST является пакетом библиотечного типа. Он предназначен для ЭВМ серии ЕС и БЭСМ-6. Пакет написан на языке ФОРТРАН-IV, однако особенности, отличающие ФОРТРАН-IV от версии ФОРТРАН-Дубна, нигде не использовались. Средства операционной системы ЕС применялись лишь для создания рабочих наборов данных. Пакет NEWST используется для расчета математических моделей каталитических процессов в химических реакторах.

§2. Описание алгоритма

1. Сведение исходной краевой задачи к системе трансцендентных уравнений. Будем отыскивать решение задачи (1), (2) в виде

$$Y(x) = Y_0(x) + Y_1(x).$$

Здесь $Y_0(x)$ - решение линейной краевой задачи, получающейся из (1), (2) при $Q = 0$. Предполагается, что такая задача имеет единственное решение для любых $D(x)$, w_0, w_N .

Вектор-функция $Y_1(x)$ есть решение нелинейной краевой задачи

$$Y''(x) + B(x)Y'(x) + C(x)Y(x) = -QEF(x, Y + Y_0), \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} u_0 Y' + v_0 Y &= 0 \quad \text{при} \quad x = a, \\ u_N Y' + v_N Y &= 0 \quad \text{при} \quad x = b \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

с однородными граничными условиями.

Предположим, что $M = 1$, т.е. система (3) состоит из одного уравнения. Введем на отрезке $[a, b]$ сетку Δ : $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$ и будем аппроксимировать функцию $F(x, Y(x) + Y_0(x))$ интерполяционным кубическим сплайном

$$S(x) = \sum_{j=1}^N F_j \varphi_j(x), \quad (5)$$

где $F_j = F(x_j, Y(x_j) + Y_0(x_j))$, а $\varphi_j(x)$ - фундаментальные кубические сплайны дефекта 1, удовлетворяющие условиям интерполяции

$$\varphi_j(x_i) = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j; \end{cases} \quad i, j = 1, \dots, N,$$

и краевым условиям типа IV [4]:

$$\varphi_j'''(x_k + 0) = \varphi_j'''(x_k - 0), \quad k = 2, N-1.$$

Определение совокупности фундаментальных сплайнов φ_j , соответствующих сетке Δ , производится путем использования алгоритма построения кубического сплайна класса C^2 [4]. Для каждого $j = 1, \dots, N$ при $x \in [x_j, x_{j+1}]$ имеем

$$\varphi_j(x) = (1-t)\varphi_j(x_i) + t\varphi_j(x_{i+1}) - \\ - h_i^2 t(1-t)[(2-t)M_i + (1+t)M_{i+1}], \quad (6)$$

где

$$h_i = x_{i+1} - x_i, \quad t = (x - x_i)/h_i, \quad M_i = \varphi_j''(x_i)/6.$$

Параметры M_j вычисляются из трехдиагональной системы уравнений, после чего значения сплайна $\varphi_j(x)$ определяются по формуле (6).

Пусть $Y(x) \equiv A_j(x)$ - решение линейной краевой задачи

$$Y''(x) + B(x)Y'(x) + C(x)Y(x) = -\varphi_j(x), \quad (7)$$

$$\left. \begin{aligned} u_0 Y' + v_0 Y &= 0 \quad \text{при } x = a, \\ u_N Y' + v_N Y &= 0 \quad \text{при } x = b, \\ j &= 1, \dots, N. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

В силу однородности граничных условий имеет место принцип суперпозиции решений краевой задачи (7), (8), и поэтому с точностью до погрешности аппроксимации функции $F(x, Y)$ сплайном (5) решение задачи (3), (4) в узлах сетки удовлетворяет уравнениям

$$Y(x_i) = Q E \sum_{j=1}^N A_j(x_i) F_j, \quad i = 1, \dots, N.$$

Это и есть искомая система трансцендентных уравнений.

Рассуждая аналогичным образом, при $M > 1$ получаем систему

$$Y_{ki} = Q \sum_{j=1}^N A_{kij} F_{kj}, \quad k = 1, \dots, M; \quad i = 1, \dots, N, \quad (9)$$

где $Y_{ki} = Y_k(x_i)$, $A_{kij} = A_{kj}(x_i)E_k$, к решению которой сводится задача (3), (4).

Заметим, что (9) является сеточным аналогом интегрального представления нелинейной краевой задачи (3), (4), которое обычно получают, используя функцию Грина.

2. Решение линейных краевых задач. Для решения линейных краевых задач, возникающих в ходе приведения задачи (1), (2) к системе трансцендентных уравнений, будем использовать метод универсальной дифференциальной прогонки [3]. Рассмотрим реализацию этого метода для решения задачи (7), (8).

В линейном дифференциальном уравнении

$$u(x)Y'(x) + v(x)Y(x) = w(x) \quad (10)$$

функции $u(x)$, $v(x)$ и $w(x)$ подберем так, чтобы решение задачи (7), (8) принадлежало множеству решений (10). Проинтегрировав (10) и умножив (7) на $u(x)$, получаем

$$u(x)Y''(x) + (u'(x) + v(x))Y'(x) + v'(x)Y(x) = w'(x),$$

$$u(x)Y''(x) + B(x)u(x)Y'(x) + C(x)u(x)Y(x) = -u(x)\phi_j(x).$$

Отсюда следует система

$$\left. \begin{aligned} u'(x) + v(x) - B(x)u(x) &= 0, \\ v'(x) - C(x)u(x) &= 0, \\ w'(x) + u(x)\phi_j(x) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Для осуществления прогонки слева направо необходимо решить задачу Коши для системы (11) с начальными условиями при $x = a$:

$$u(a) = u_0, \quad v(a) = v_0, \quad w(a) = 0. \quad (12)$$

Для прогонки правого граничного условия решается задача Коши на промежутке $[a, b]$:

$$\left. \begin{aligned} \bar{u}'(x) + \bar{v}(x) - B(x)\bar{u}(x) &= 0, \\ \bar{v}'(x) - C(x)\bar{u}(x) &= 0, \\ \bar{w}'(x) + \bar{u}(x)\phi_k(x) &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

$$\bar{u}(b) = \bar{u}_N, \quad \bar{v}(b) = \bar{v}_N, \quad \bar{w}(b) = 0. \quad (14)$$

Определив прогоночные коэффициенты $u, v, w, \bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$, получаем в каждой точке $x \in [a, b]$ систему линейных алгебраических уравнений относительно $Y(x)$ и $Y'(x)$:

$$\left. \begin{aligned} u(x)Y'(x) + v(x)Y(x) &= w(x), \\ \bar{u}(x)Y'(x) + \bar{v}(x)Y(x) &= \bar{w}(x). \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Таким образом, решение задачи (7), (8) свелось к двум встречным прогонкам, которые реализуются в пакете NEWST методом Рунге-Кутты пятого порядка точности. В результате насчитываются значения прогоночных коэффициентов в узлах x_i . Обратный ход состоит в решении систем (15) для $x = x_i, i = 1, \dots, N$.

Аналогичным образом с помощью метода дифференциальной прогонки определяется $Y_0(x)$ (решение задачи (1), (2) при $Q = 0$). Нужно лишь в (11), (13) заменить $\phi_j(x)$ на $D(x)$ и в (12), (14) положить соответственно $w(a) = w_0, w(b) = w_N$.

3. Применение метода Ньютона для решения систем трансцендентных уравнений с параметром. Будем решать зависящую от параметра t систему трансцендентных уравнений вида

$$Y - t \Phi(Y) = 0, \quad (16)$$

где $Y = (Y_1, \dots, Y_N)^T, \Phi(Y) = (\Phi_1(Y), \dots, \Phi_N(Y))^T$. Предположим, что пространственная параметрическая кривая $Y(t)$, описываемая системой (16), является гладкой в области определения t . Кроме того, пусть в окрестности некоторого t_1 не имеется точек ветвления решений, и известно начальное приближение $Y^{(0)}(t_1)$, достаточно близкое к решению. Согласно методу Ньютона [5] построим итерационный процесс

$$Y^{(k+1)} = Y^{(k)} - (I - t_1 \Phi'(Y^{(k)}))^{-1} (Y^{(k)} - t_1 \Phi(Y^{(k)})), \quad (17)$$

$$k = 0, 1, \dots$$

Здесь $\Phi'(Y)$ - якобиан, I - единичная матрица. Обозначим $\Delta Y = Y^{(k+1)} - Y^{(k)}$. Решив систему линейных алгебраических уравнений относительно ΔY

$$(t_1 \Phi'(Y^{(k)}) - I) \Delta Y = Y^{(k)} - t_1 \Phi(Y^{(k)}), \quad (18)$$

находим $Y^{(k+1)} = Y^{(k)} + \Delta Y$. И так до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность решения.

В предположении гладкости $Y(t)$ естественно ожидать, что при значениях t , близких к t_1 , уравнение $Y = t \Phi(Y)$ будет иметь решение, близкое к $Y(t_1)$. Попробуем продолжить найденное в точке t_1 решение, строя начальное приближение по формулам

$$\begin{aligned} t_2 &= t_1 + h_t, \\ Y^{(0)}(t_2) &= Y(t_1) + h_y \frac{dY}{dt}, \end{aligned} \quad (19)$$

где $h_t > 0$, $h_y > 0$ - некоторые заданные величины. Для нахождения $\frac{dY}{dt}$ продифференцируем (16) по t и получим систему линейных алгебраических уравнений

$$(t_1 \Phi'(Y) - I) \frac{dY}{dt} = -t_1 \Phi(Y). \quad (20)$$

Системы (20) и (18) отличаются лишь правыми частями. Если окажется, что точка t_1 достаточно близка к точке ветвления, в которой $\det(t \Phi'(Y) - I) = 0$, то продолжение решения по данному параметру невозможно. Для дальнейшего продвижения предлагается параметризация системы (16), т.е. смена параметра.

В точке t_1 известны

$$Y_i, \quad \frac{dY_i}{dt}, \quad i = 1, \dots, N.$$

$$\text{Пусть } \left| \frac{dY_L}{dt} \right| = \max_{1 \leq i \leq N} \left\{ \left| \frac{dY_i}{dt} \right| \right\}. \text{ Если } \left| \frac{dY_L}{dt} \right| \leq 1,$$

то параметром остается t и начальное приближение строится по

формулам (19). Если же $\left| \frac{dY_L}{dt} \right| > 1$, то в качестве параметра выбирается переменная Y_L . В силу теоремы о неявных функциях, решение можно теперь представить как $t = t(Y_L)$, $Y = Y(Y_L)$ в некоторой окрестности Y_L . Начальное приближение для следующего шага определяется следующим образом:

$$Y_L = Y_L(t_1) + h_y \frac{Y_L(t_1) - Y_L(t_0)}{|Y_L(t_1) - Y_L(t_0)|},$$

где t_0 - точка, предшествующая t_1 ,

$$Y_i^{(0)} = Y_i(t_1) + h_y \frac{dY_i(t_1)}{dt} \left(\frac{dY_L(t_1)}{dt} \right)^{-1}, \quad i \neq L,$$

$$t_2^{(0)} = t_1 + h_t \left(\frac{dY_L(t_1)}{dt} \right)^{-1}.$$

Рассмотрим процесс Ньютона с параметризацией применительно к системе (9), к которой свелось решение исходной нелинейной краевой задачи (1), (2):

$$Y(k, i) = Q \sum_{j=1}^N A(k, i, j) F(k, j), \quad k=1, \dots, M, \quad i=1, \dots, N.$$

Запишем ее в виде $Y(k, i) = t \Phi(k, i)$, где $\Phi(k, i) = \sum_{j=1}^N A(k, i, j) F(k, j)$, если в качестве параметра выбирается Q , и

$$\Phi(k,i) = \frac{\sum_{j=1}^N A(k,i,j)F(k,j)}{\sum_{j=1}^N A(L_1,L_0,j)F(L_1,j)},$$

если параметром является переменная $Y(L_1, L_0)$.

Пусть имеются некоторый выбор параметра и начальное приближение $Q^{(0)}$, $Y^{(0)}(k,i)$, $k=1, \dots, M$, $i=1, \dots, N$. Системы линейных алгебраических уравнений, соответствующие (18) и (20), имеют вид

$$T \Delta Y = w, \quad (21)$$

$$T \frac{dY}{dt} = w_1, \quad (22)$$

где

$$\Delta Y = \begin{bmatrix} \Delta Y(1,1) \\ \Delta Y(1,2) \\ \dots \\ \Delta Y(1,N) \\ \Delta Y(2,1) \\ \dots \\ \Delta Y(M,1) \\ \dots \\ \Delta Y(M,N) \end{bmatrix}, \quad \frac{dY}{dt} = \begin{bmatrix} \frac{dY(1,1)}{dt} \\ \dots \\ \frac{dY(1,N)}{dt} \\ \dots \\ \frac{dY(M,1)}{dt} \\ \dots \\ \frac{dY(M,N)}{dt} \end{bmatrix}, \quad w_1 = \begin{bmatrix} \Phi(1,1) \\ \dots \\ \Phi(1,N) \\ \dots \\ \Phi(M,1) \\ \dots \\ \Phi(M,N) \end{bmatrix},$$

$$w = Y - tw_1.$$

Матрица T размерности $MN \times MN$ представлена на рис. 1, причем

$$\frac{\partial \Phi(i,j)}{\partial Y(i_0, j_0)} =$$

$$\Pi = \begin{bmatrix}
 \frac{t \partial \Phi(1,1)}{\partial y(1,1)} - 1 & \frac{t \partial \Phi(1,1)}{\partial y(1,2)} & \dots & \frac{t \partial \Phi(1,1)}{\partial y(1,N)} & \frac{t \partial \Phi(1,1)}{\partial y(2,1)} & \dots & \frac{t \partial \Phi(1,1)}{\partial y(M,N)} \\
 \frac{t \partial \Phi(1,2)}{\partial y(1,1)} & \frac{t \partial \Phi(1,2)}{\partial y(1,2)} - 1 & \dots & \frac{t \partial \Phi(1,2)}{\partial y(1,N)} & \frac{t \partial \Phi(1,2)}{\partial y(2,1)} & \dots & \frac{t \partial \Phi(1,2)}{\partial y(M,N)} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \frac{t \partial \Phi(1,N)}{\partial y(1,1)} & \frac{t \partial \Phi(1,N)}{\partial y(1,2)} & \dots & \frac{t \partial \Phi(1,N)}{\partial y(1,N)} - 1 & \frac{t \partial \Phi(1,N)}{\partial y(2,1)} & \dots & \frac{t \partial \Phi(1,N)}{\partial y(M,N)} \\
 \frac{t \partial \Phi(2,1)}{\partial y(1,1)} & \frac{t \partial \Phi(2,1)}{\partial y(1,2)} & \dots & \frac{t \partial \Phi(2,1)}{\partial y(1,N)} & \frac{t \partial \Phi(2,1)}{\partial y(2,1)} - 1 & \dots & \frac{t \partial \Phi(2,1)}{\partial y(M,N)} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \frac{t \partial \Phi(M,N)}{\partial y(1,1)} & \frac{t \partial \Phi(M,N)}{\partial y(1,2)} & \dots & \frac{t \partial \Phi(M,N)}{\partial y(1,N)} & \frac{t \partial \Phi(M,N)}{\partial y(2,1)} & \dots & \frac{t \partial \Phi(M,N)}{\partial y(M,N)} - 1
 \end{bmatrix}$$

Рис. 1. Матрица коэффициентов для систем линейных алгебраических уравнений (21) и (22)

$$= \frac{A(i, j, j_0) \frac{\partial F(i, j_0)}{\partial Y(i_0, j_0)} - \Phi(i, j) A(L_1, L_0, j_0) \frac{\partial F(L_1, j_0)}{\partial Y(i_0, j_0)}}{\sum_{k=1}^N A(L_1, L_0, k) F(L_1, k)},$$

если параметром является $Y(L_1, L_0)$ и

$$\frac{\partial \Phi(i, j)}{\partial Y(i_0, j_0)} = A(i, j, j_0) \frac{\partial F(i, j_0)}{\partial Y(i_0, j_0)},$$

если параметром является Q ; $i, i_0 = 1, \dots, M$; $j, j_0 = 1, \dots, N$.

Решив системы (21), (22) (в пакете NEWST с этой целью используется метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцам), в точке t_1 находим $Y, Q, \frac{dY}{dt}, \frac{dQ}{dt}$.

Рассмотрим величину

$$\max_{\substack{1 \leq i \leq M \\ 1 \leq j \leq N}} \left\{ \left| \frac{dQ}{dt} \right|, \left| \frac{dY(i, j)}{dt} \right| \right\}. \quad (23)$$

Пусть максимум достигается при $i = L_1, j = L_0$. Тогда в качестве параметра выбирается переменная $Y(L_1, L_0)$, и если t_1 - текущая точка, то при заданных h_Q, h_Y начальное приближение для следующей точки t_2 на параметрической кривой $Y(t)$ находится по формуле

$$t = Y(L_1, L_0) + h_t,$$

где $h_t = h_Y \text{sign}\{Y(L_1, L_0) - Y_1(L_1, L_0)\}$, причем $Y_1(L_1, L_0)$ - значение переменной $Y(L_1, L_0)$ в точке, предшествующей t_1 .

Если t_1 - стартовая точка, то

$$h_t = h_Q \text{sign} \left\{ z \left(\frac{dQ}{dt} \right)^{-1} \right\},$$

$$Y^{(0)}(i,j) = Y(i,j) + h_t \frac{dY(i,j)}{dt} z^{-1},$$

$$Q^{(0)} = Q + h_t \frac{dQ}{dt} z^{-1}, \quad z = \frac{dY(L_1, L_0)}{dt},$$

$$i = 1, \dots, M, \quad i \neq L_1; \quad j = 1, \dots, N, \quad j \neq L_0.$$

Если максимум в (23) равен $\left| \frac{dQ}{dt} \right|$, то параметром становится Q и для вычисления начального приближения имеем формулы

$$Q^{(0)} = Q + h_t, \quad h_t = h_Q \text{sign}(Q - Q_1)$$

(Q_1 - значение Q в точке, предшествующей t_1),

$$Y^{(0)}(i,j) = Y(i,j) + h_t \frac{dY(i,j)}{dt} \left(\frac{dQ}{dt} \right)^{-1},$$

$$i = 1, \dots, M; \quad j = 1, \dots, N.$$

Может оказаться, что предсказанное начальное приближение даст при выполнении метода Ньютона чрезмерно большое число итераций (это означает либо очень медленную сходимость итераций, либо их расходимость). В этом случае в программе, реализующей метод Ньютона, предусмотрен возврат в точку t_1 и пересчет начального приближения с шагом $h_t/2$.

4. Алгоритм построения сетки. Точность решения краевой задачи существенным образом зависит от расположения узлов x_1 сетки Δ . При рассмотрении вопроса об оптимальном размещении узлов сетки мы будем исходить из предположения, что точность численного решения определяется в основном точностью сплайн-интерполяции нелинейных функций $F_1(x, Y)$. В самом деле, процесс решения методом универсальной дифференциальной прогонки линейных краевых задач при реализации рассмотренного алгоритма всегда можно организовать так, чтобы вклад, возникаю-

щих при этом погрешностей, в окончательную погрешность численного решения нелинейной краевой задачи не был бы определяющим. Например, линейные задачи можно решать на более густой по сравнению с Δ сетке. Далее, свойства функций $F_1(x, Y)$ тесно связаны с поведением вектор-функции $Y(x)$. Поэтому, на наш взгляд, целесообразно выбирать узлы сетки Δ из условия минимизации погрешности приближения кубическим сплайном компонент $Y(x)$.

Пусть для функции $y(x) \in C^4[a, b]$ на сетке Δ построен интерполирующий ее кубический эрмитов сплайн $H(x)$ [4]. Тогда имеет место оценка

$$|H(x) - y(x)| \leq \text{const } h_i^4 \|y^{(4)}\|_{C[x_i, x_{i+1}]}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}],$$

где $h_i = x_{i+1} - x_i$, $i = 1, \dots, N-1$.

Распределение узлов x_i , при котором

$$h_i^4 \|y^{(4)}\|_{C[x_i, x_{i+1}]} = \varepsilon = \text{const}, \quad i = 1, \dots, N-1,$$

является оптимальным при фиксированной размерности N [6]. В асимптотическом приближении (при $N \rightarrow \infty$) оптимальное распределение узлов сетки удовлетворяет уравнениям

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} |y^{(4)}(x)|^{1/4} dx = \frac{1}{N-1} \int_a^b |y^{(4)}(x)|^{1/4} dx, \quad (24)$$

$$i = 1, \dots, N-1.$$

Если различие между соседними шагами h_{i-1}, h_i сетки мало, например, $h_i = h_{i-1} + O(h_{i-1}^2)$, $h_{i-1} = h_i + O(h_i^2)$, то, как показано в [4], для кубического сплайна класса C^2 с точностью до малых более высокого порядка будет иметь место такая

же оценка погрешности, как и для эрмитова сплайна. Это условие на шаги сетки обычно выполняется при построении сеток на основе уравнений (24), и, следовательно, такие сетки могут быть использованы в качестве оптимальных для сплайнов класса C^2 .

Для построения оптимальной сетки необходима информация о производной $y^{IV}(x)$ при $x \in [a, b]$. Не нарушая свойства асимптотической оптимальности сетки, можно вместо $y^{IV}(x)$ использовать ее кусочно-постоянную аппроксимацию, т.е., по существу, предполагать известными только сеточные значения $y^{IV}(x_i)$. Это к тому же существенно упрощает решение системы (24). Однако в практических задачах значения $y^{IV}(x_i)$ обычно тоже неизвестны, и их приходится аппроксимировать, используя сеточные значения функции $y(x)$.

Предположим, что в узлах сетки $\bar{\Delta} : a = \bar{x}_1 < \bar{x}_2 < \dots < \bar{x}_N = b$ известны значения $y(\bar{x}_i)$. Опишем алгоритм построения сетки Δ с узлами $x_i, i = 1, \dots, N; x_1 = a, x_N = b$, удовлетворяющими условиям (24) (вообще говоря, $N \neq \bar{N}$).

На сетке $\bar{\Delta}$ построим интерполирующую функцию $y(x)$ кубический сплайн $S(x)$ класса C^2 с граничными условиями типа 1: $S'(a) = y'(a), S'(b) = y'(b)$. Значения производной $y'(x)$ на концах отрезка $[a, b]$ можно либо извлечь из граничных условий краевой задачи, либо заменить их достаточно хорошими разностными аппроксимациями, например, пятиточечными.

Используя аппроксимацию

$$y^{IV}(\bar{x}_i) \approx \bar{y}_i^{IV}, \quad i = 1, \dots, \bar{N},$$

где

$$\bar{y}_i^{IV} = \frac{2}{\bar{h}_{i-1} + \bar{h}_i} \cdot \left(\frac{M_{i+1} - M_i}{\bar{h}_i} - \frac{M_i - M_{i-1}}{\bar{h}_{i-1}} \right),$$

$$i = 2, \dots, \bar{N}-1;$$

$$\bar{y}_1^{IV} = \bar{y}_2^{IV}, \quad \bar{y}_{\bar{N}}^{IV} = \bar{y}_{\bar{N}-1}^{IV};$$

$$\bar{h}_j = \bar{x}_{j+1} - \bar{x}_j, \quad M_j = S''(x_j),$$

заменяем $y^{IV}(x)$ в (24) кусочно-постоянной функцией $\bar{y}^{IV}(x)$: $\bar{y}^{IV}(x) = \bar{y}_i^{IV}$, $x \in [\bar{x}_i, \bar{x}_{i+1})$, $i = 1, \dots, \bar{N}-1$.

Тогда уравнение (24) приводится к виду:

$$\int_{\bar{x}_i}^{\bar{x}_{i+1}} |\bar{y}^{IV}(x)|^{1/4} dx = \epsilon =$$

$$= \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{\bar{N}-1} |\bar{y}_j^{IV}|^{1/4} \bar{h}_j, \quad (25)$$

$$i = 1, \dots, N-1.$$

Алгоритм решения уравнения (25) состоит в следующем. Пусть узел x_i найден, примем $x_i \in [\bar{x}_k, \bar{x}_{k+1}]$. Будем вычислять величины

$$\epsilon_k = (\bar{x}_{k+1} - x_i) |\bar{y}_k^{IV}|^{1/4},$$

$$\epsilon_j = \epsilon_{j-1} + \bar{h}_j |\bar{y}_j^{IV}|^{1/4}, \quad j = k+1, \dots,$$

и сравнивать их с ϵ . Пусть m — минимальное число, такое что $\epsilon_m > \epsilon$. Тогда полагаем

$$x_{i+1} = \begin{cases} x_i + \epsilon / |\bar{y}_k^{1V}|^{1/4}, & \text{если } m = k, \\ \bar{x}_m + (\epsilon - \epsilon_{m-1}) / |\bar{y}_m^{1V}|^{1/4}, & \text{если } m > k. \end{cases}$$

Этот процесс повторяем для $i = 1, \dots, N-2$. В результате имеем узлы x_2, \dots, x_{N-1} , которые являются "точным" решением уравнений (25) и приближенным для уравнений (24).

Если требуется построить сетку для вектор-функции $Y(x)$, с компонентами $Y_1(x), \dots, Y_M(x)$, то в описанном выше алгоритме следует всюду заменить $|y^{1V}(x)|^{1/4}$ на $\sum_{k=1}^M |Y_k^{1V}(x)|^{1/4}$. В этом случае, вообще говоря, в любой части отрезка $[a, b]$ сетка выбирается из условия хорошей аппроксимации на ней "наихудших" компонент вектор-функции.

Заметим, что в предлагаемой версии пакета программ в качестве функции $Y(x)$, на основании которой переформируется сетка, задается начальное приближение для системы трансцендентных уравнений.

§3. Описание программ пакета NEWST

Пакет прикладных программ NEWST состоит из 12 программ: STAND3, DIFFRG, RUNDIF, NORM, MATR3, GAUS4, SOLVE, SPLN3, СЕТКА, ABL4, NEWSTF, PARAM. Все они оформлены как стандартные фортрановские подпрограммы. На пользователя возлагается написание нестандартных программ FUNK, PRIN и головной программы.

Программа FUNK служит для описания нелинейной функции $F(x, Y)$ и якобиана $F_Y'(x, Y)$. В программе PRIN организуется вывод на внешние устройства нужной пользователю информации.

Головная программа предусматривает описание переменных и массивов, ввод данных, а также обращение к программе STAND3.

Программа STAND3 является управляющей программой. Она осуществляет подготовку и включение остальных программных единиц. Отметим основные этапы работы программы STAND3.

1. Если исходная задача (1), (2) имеет неоднородные краевые условия, то путем обращения к программе DIFPRG вычисляется $Y_0(x)$ - решение задачи (1), (2) при $Q = 0$.

Программа DIFPRG реализует метод универсальной дифференциальной прогонки для решения линейных краевых задач. При расчете прогоночных коэффициентов DIFPRG обращается к программе RUNDIF, предназначенной для решения задачи Коши типа (11), (12) методом Рунге-Кутты четвертого порядка точности, дополненной процедурой нормировки [3], которая реализуется программой NORM.

2. Вычисление коэффициентов системы трансцендентных уравнений (9) путем решения линейных краевых задач (7), (8). Здесь работает программа MATR3, в которой вызываются программы RUNDIF, NORM, SPLN3. Программа SPLN3 служит для построения интерполяционного кубического сплайна класса C^2 с различными типами граничных условий.

С этим этапом совмещено также вычисление $Y_0(x)$ в случае, когда краевые условия (2) однородны.

3. Решение системы трансцендентных уравнений (9) методом Ньютона с помощью программы NEWSTF. Для решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при реализации метода Ньютона, вызываются программы GAUS4 и SOLVE.

Программа GAUS4 реализует треугольное разложение матрицы A системы линейных уравнений $AX = B$ методом исключения Гаусса с выбором главного элемента по столбцам. Это разложение используется затем программой SOLVE для вычисления решения X .

4. Выбор параметра и построение начального приближения для следующего шага по параметрической кривой. Здесь работает программа PARAM.

5. Обработка результатов программой PRIN.

6. Оптимизация сетки при фиксированном числе узлов. Эта задача решается программой СЕТКА. При этом вызывается программа ABL4, в которой с помощью программы SPLN3 насчитываются приближенные сеточные значения четвертой производной.

7. Пересчет данных в узлах новой сетки с помощью программы SPLN3.

Все программы пакета NEWST рассчитаны на работу в режиме простой точности. Программы DIFPRG, GAUSS4, SOLVE, ABL4, СЕТКА, SPLN3 могут использоваться вне пакета для решения других задач. Автор располагает подробными описаниями программ пакета и инструкциями по их использованию.

§4. Примеры

ПРИМЕР 1. Рассмотрим решение краевой задачи, моделирующей установившуюся реакцию первого порядка на зерне катализатора:

$$\begin{aligned}c''(x) + \frac{m}{x} c'(x) &= Qc(x) \exp\left\{\frac{T(x)}{1+T(x)/\gamma}\right\}, \\T''(x) + \frac{m}{x} T'(x) &= -\theta_0 Qc(x) \exp\left\{\frac{T(x)}{1+T(x)/\gamma}\right\}, \\c'(0) &= T'(0) = 0, \\c'(1) &= \text{sh}(1-c(1)), \\T'(1) &= -Nu T(1).\end{aligned}$$

Здесь c - концентрация вещества, T - температура, x - расстояние от центра симметрии зерна, γ - коэффициент энергии активации, β - коэффициент тепловыделения, $\theta_0 = \beta\gamma$, Sh - число Шервуда, m - число, характеризующее тип симметрии в задаче ($m = 0, 1, 2$ для плоской, цилиндрической и сферической симметрии соответственно), Nu - число Нуссельта.

Система трансцендентных уравнений (9) для этой задачи имеет вид $Y(x) = QAF(x, Y)$, где

$$Y(x) = \begin{bmatrix} c(x) \\ T(x) \end{bmatrix}, \quad F(x, Y) = \begin{bmatrix} c(x) & f(T) \\ c(x) & f(T) \end{bmatrix},$$

$$f(T) = \exp \left\{ \frac{T(x)}{1+T(x)/\gamma} \right\}.$$

Матрица A имеет размерность $2 \times N \times N$. Ее элементы находятся путем решения линейных краевых задач:

$$Y''(x) + B(x)Y'(x) + C(x)Y(x) = -\varphi_k(x), \quad (26)$$

$$k = 1, \dots, N,$$

$$u_0 Y' + v_0 Y = 0, \quad u_N Y' + v_N Y = 0,$$

где

$$B(x) = \begin{bmatrix} m/x & 0 \\ 0 & m/x \end{bmatrix}, \quad C(x) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Система (26) имеет особенность при $x = 0$. Раскрывая ее, при $x = 0$ имеем

$$Y''(0) = \varphi_k(0)/(1+m), \quad k = 1, \dots, N.$$

Поэтому применительно к данному примеру вместо программы RUNDIF использовался ее вариант, специально приспособленный для работы в этой ситуации.

Значения параметров, при которых проводился счет: $M = 2$, $N = 21$ в стартовой точке, далее N увеличивалось по мере роста градиентов решения; $m = 1$, $\beta = 1/3$, $\gamma = 27$, $\theta_0 = 9$. $sh = 60$, $Nu = 10$. Стартовой точкой является точка $Q = 0$. В ней параметром назначается Q , а в качестве начального приближения берется нулевое решение.

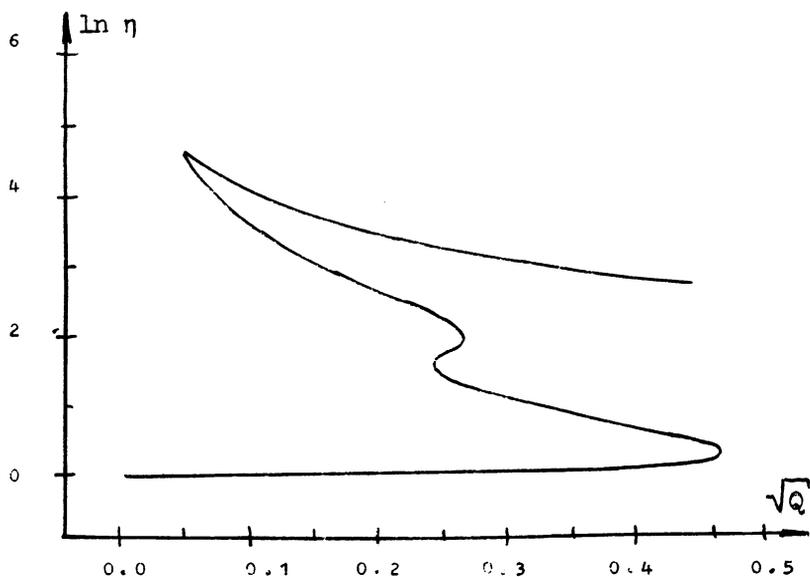


Рис. 2

На рис.2, где $\eta = \frac{m+1}{Q\theta_0} T(1)Nu$ - фактор эффективности, иллюстрируются полученные результаты. По графику легко определяются области изменения параметра Q , в которых рассматриваемая краевая задача имеет соответственно одно, три или пять решений.

ПРИМЕР 2. Краевая задача, описанная в примере 1, при условии $sh = Nu$ может быть преобразована к следующей задаче:

$$Y''(x) + \frac{m}{x} Y'(x) = -Q(c - Y(x)) \exp \left\{ \frac{Y(x)}{1 + Y(x)/\gamma} \right\},$$

$$Y'(0) = 0, \quad Y'(1) = -sY(1).$$

Здесь $Y(x)$ - "безразмерная" температура; c, s, γ - заданные константы.

Соответствующая система трансцендентных уравнений $Y = QAF(Y)$, где

$$F(Y) = (c-Y) \exp \left\{ \frac{Y}{1+Y/\gamma} \right\}.$$

Матрица A размерности $N \times N$ находится из решения линейных краевых задач

$$Y''(x) + B(x)Y'(x) = -\varphi_k(x), \quad k=1, \dots, N, \quad (27)$$

$$Y'(0) = 0, \quad Y'(1) + sY(1) = 0,$$

где $B(x) = m/x$ при $x \neq 0$ и $B(0) = 0$.

После раскрытия особенности уравнение (27) при $x = 0$ приводится к виду

$$Y''(0) = -\varphi_k(0)/(1+m), \quad k=1, \dots, N.$$

При реализации алгоритма использовался такой же вариант программы RUNDIF, как в примере 1.

Значения параметров: $M = 1$, $m = 2$, $c = 30$, $\gamma = 60$, $s = 10^{10}$; в стартовой точке $N = 21$, $Q = 0$.

На рис.3 приведена параметрическая кривая, аналогичная кривой на рис.2, дающая представление об областях неединственности решения. При $\sqrt{Q} = 0.257$ существует семь решений, которые приведены на рис.4. Цифры в поле рисунка указывают номер решения. Рис.5 дает более подробное представление о поведении решений $Y_4(x)$, $Y_5(x)$, $Y_6(x)$ в окрестности $x = 0$, а рис.6 показывает поведение решения $Y_7(x)$ в окрестности $x = 1$.

Заметим, что приведенные примеры показательны наличием больших градиентов, область которых смещается с изменением параметра Q . Связанные с этим трудности сче-

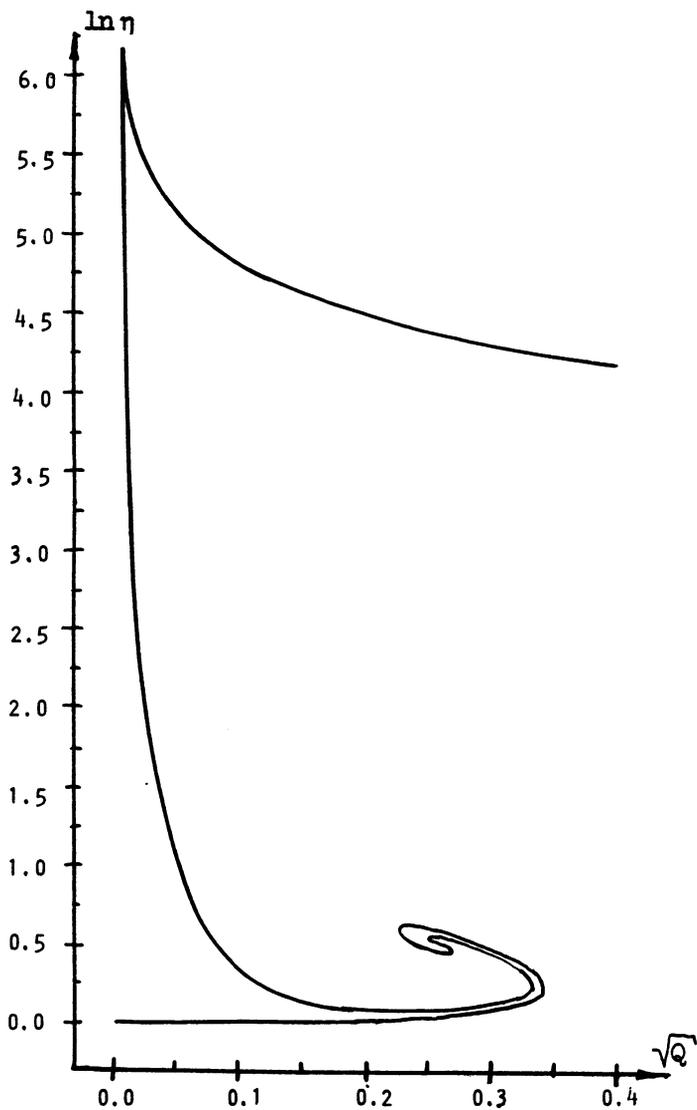


Рис.3. Зависимость фактора эффективности от параметра Q в примере 2

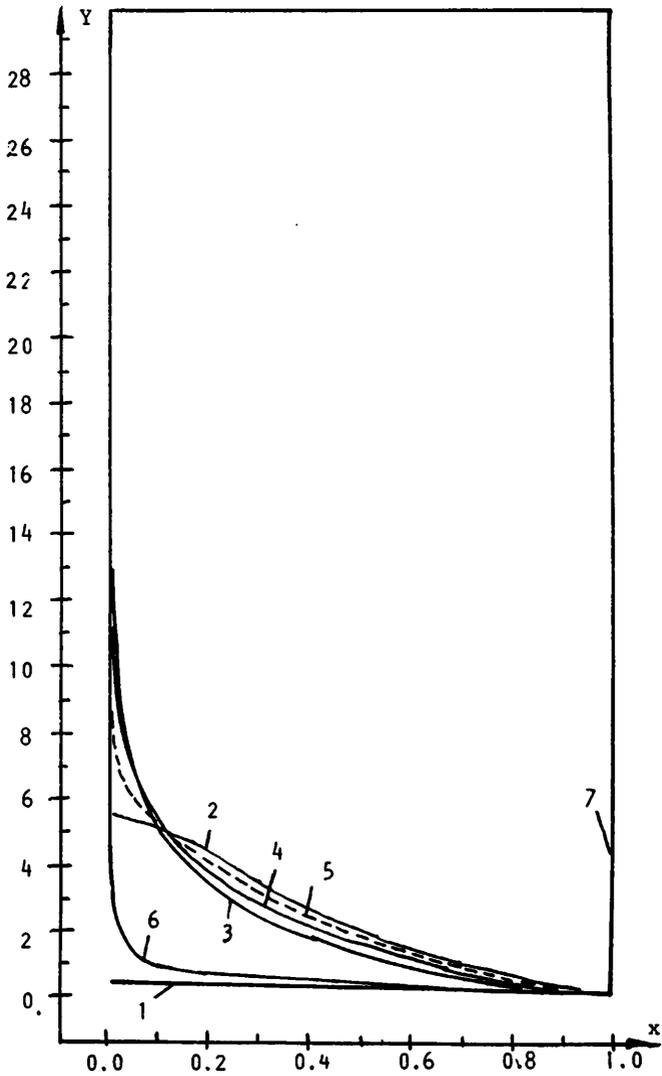


Рис. 4. Решения примера 2 при $\sqrt{Q} = 0.257$

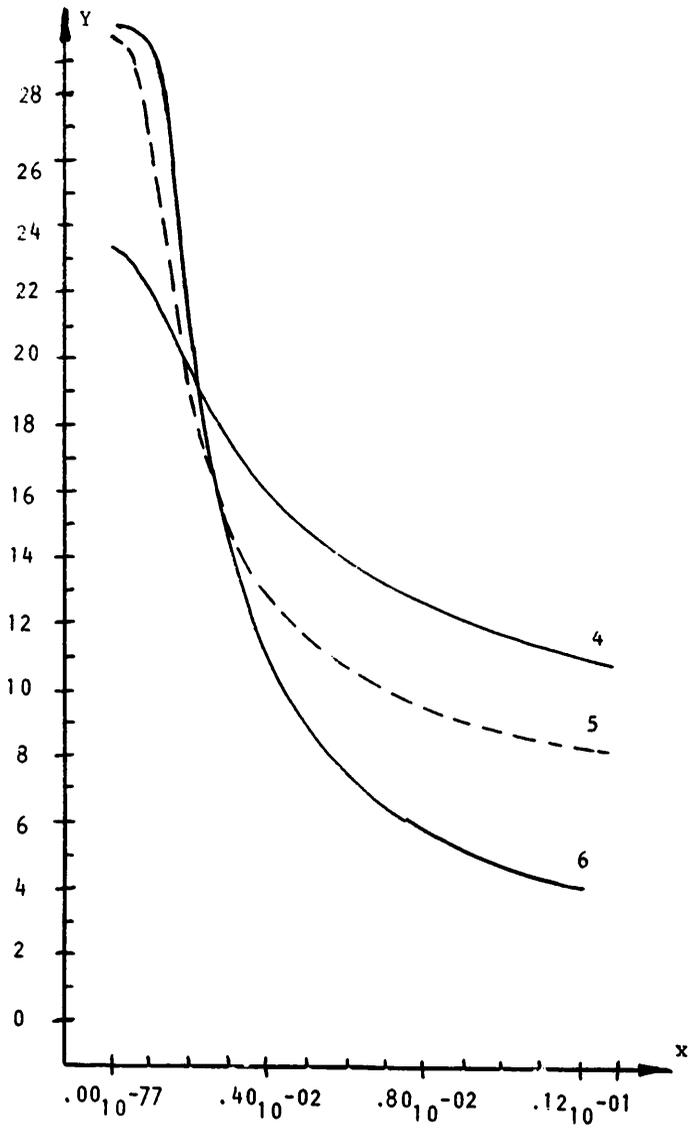


Рис. 5. Решения примера 2 в окрестности $x = 0$

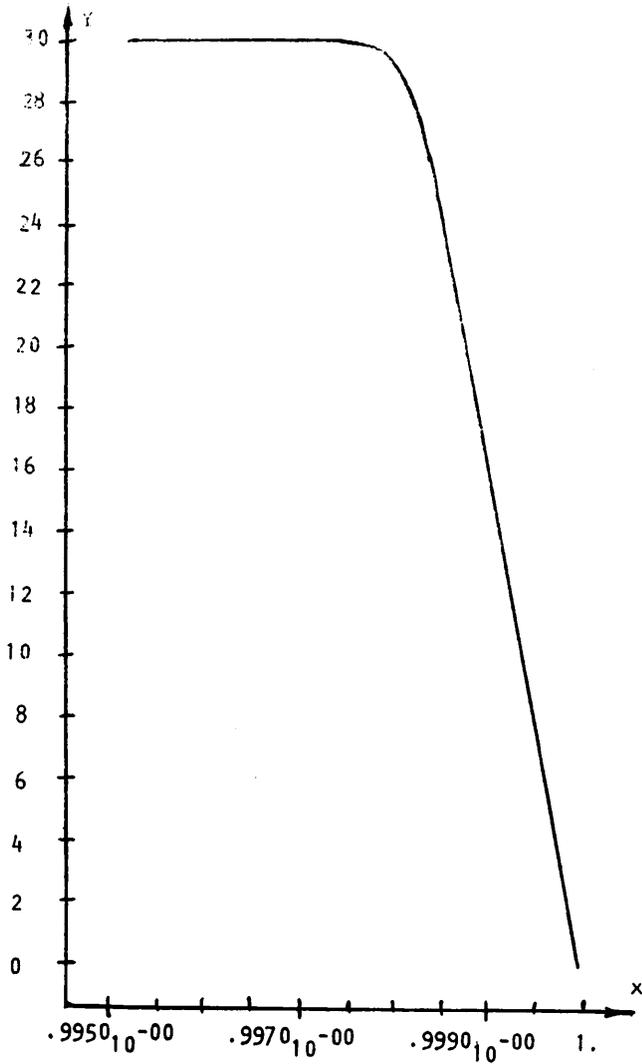


Рис. 6. Решение $Y_7(x)$ примера 2 в окрестности $x = 1$

та были успешно преодолены благодаря использованию алгоритма переменной сетки.

Л и т е р а т у р а

1. ФАДЕЕВ С.И. Расчет многослойной пленочной емкостной структуры //Моделирование в пленочной электромеханике. - Новосибирск. - 1982. - Вып. 96: Вычислительные системы. -С.66-78.

2. ФАДЕЕВ С.И. О решении системы трансцендентных уравнений с параметром методом Ньютона. - Новосибирск, 1984, - 25 с. (Препринт/ АН СССР. Сиб. отд-ние Ин-т математики; № 72).

3. ФАДЕЕВ С.И. О численном решении линейной краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения методом дифференциальной прогонки //Методы сплайн-функций. - Новосибирск. - 1978. - Вып. 75: Вычислительные системы. - С. 80-95.

4. ЗАВЬЯЛОВ Ю.С., КВАСОВ Б.И., МИРОШНИЧЕНКО В.Л. Методы сплайн-функций. - М.: Наука, 1980. - 352 с.

5. КАНТОРОВИЧ Л.В., АКИЛОВ Г.П. Функциональный анализ в нормированных пространствах. - М.: Наука, 1959.

6. Де БОР К. Практическое руководство по сплайнам: Пер. с англ. - М.: Радио и связь, 1985.

Поступила в ред.-изд.отд.

22 июля 1988 года