

ПАКЕТ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ NEWST1
РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ
ДЛЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ
ПЕРВОГО ПОРЯДКА, ЗАВИСЯЩИХ ОТ ПАРАМЕТРА

Р.Г. Лукьянова

§1. Общая характеристика ППП NEWST1

Рассматривается следующая краевая задача

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y(x), Q, \lambda, s), \quad a \leq x \leq b, \quad (1)$$

$$\left. \begin{aligned} l_i(y, Q, \lambda, s) &= 0, \quad i = 1, \dots, m_0, \quad \text{при } x = a, \\ \varepsilon_i(y, Q, \lambda, s) &= 0, \quad i = 1, \dots, m+1-m_0, \quad \text{при } x = b, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

где $y = (y_1, \dots, y_m)^T$, $f = (f_1, \dots, f_m)^T$, $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_1)^T$ - вектор констант, подлежащих определению, $s = (s_1, \dots, s_{m_s})^T$ - вектор заданных констант, $l, m_s \geq 0$, $1 \leq m_0 \leq m+1$, Q - скалярный параметр.

Пакет программ NEWST1 позволяет провести численное исследование краевой задачи (1)-(2), т.е. найти решения $y(x, Q)$ и $\lambda(Q)$ в предположении их существования и определить количество решений в заданной области изменения параметра Q .

Формально систему (1) можно дополнить уравнениями $\frac{d\lambda}{dx} = 0$ и воспользоваться для ее численного анализа комплексом программы BPR-Q, описанном в [1]. В настоящей работе излагается подход, позволяющий избежать излишних вычислительных затрат, связанных с дополнительными уравнениями.

Для краевой задачи (1)-(2) формулируется, как и в [1], дискретная модель, имеющая вид конечномерной системы трансцендентных уравнений, для решения которой применяется метод Ньютона с параметризацией и продолжением по параметру [1].

В пакете имеется возможность нахождения $\frac{dy}{ds_j}$ и $\frac{d\lambda}{ds_j}$, $j = 1, \dots, m_s$, которые могут быть полезными при отыскании оптимальных режимов конкретных процессов, описываемых уравнениями (1)-(2). Предусматривается также оптимизация расположения узлов сетки [2] и ее динамическая размерность, что позволяет преодолевать трудности, возникающие, когда решения имеют особенности типа пограничного слоя.

Пакет состоит из 7 программных модулей, один из которых является управляющим. Задание входных параметров пакета и начальных данных задачи, организация вывода и обработка результатов, описание правых частей f системы (1) и граничных условий (2), а также элементов матрицы Якоби от f и l_i и g_i , предоставляются пользователю.

Программы написаны на языке "Фортран" и доступны для компиляторов с языков "Фортран-IV" и "Фортран-77".

ППП NEWST1 передан в Институт неорганической химии СО РАН и используется там для расчетов математических моделей газотранспортного процесса осаждения кристаллической фазы [3].

§2. Описание алгоритма

2.1. Сведение исходной краевой задачи к конечномерной системе уравнений. Введем на отрезке $[a, b]$ сетку Δ : $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$ и представим (1) в виде системы интегральных уравнений [1]

$$y(x) = y(x_i) + \int_{x_i}^x f(t, y(t), Q, \lambda, s) dt, \quad x_i \leq x \leq x_{i+1}.$$

Введем обозначения

$$y_i = y(x_i), \quad f_i = f(x_i, y_i, Q, \lambda, s), \quad h_i = x_{i+1} - x_i,$$

$$\bar{y}_i = y(\bar{x}_i), \quad \bar{f}_i = f(\bar{x}_i, \bar{y}_i, Q, \lambda, s), \quad \bar{x}_i = (x_{i+1} + x_i)/2.$$

Воспользуемся теперь для аппроксимации интеграла квадратурной формулой Симпсона

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t, y(t), Q, \lambda, s) dt = \frac{h_i}{6} (f_i + 4\bar{f}_i + f_{i+1}).$$

Записав (1)-(2) в узлах сетки, получаем приближенное дискретное представление исходной краевой задачи

$$\left. \begin{aligned} l_i(y_1, Q, \lambda, s) &= 0, \quad i = 1, \dots, m_0, \\ \Phi_i &\equiv y_i - y_{i+1} + \frac{h_i}{6} (f_i + 4\bar{f}_i + f_{i+1}) = 0, \\ & \quad i = 1, \dots, n-1, \\ g_i(y_n, Q, \lambda, s) &= 0, \quad i = 1, \dots, m+1-m_0. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Аппроксимируем $y(x)$ на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ интерполяционным эрмитовым кубическим сплайном

$$y(x) = (1-t)y_i + ty_{i+1} + t(1-t)[(1-t)a_i + tb_i], \quad (4)$$

где

$$a_i = y_i - y_{i+1} + h_i y'_i,$$

$$b_i = y_{i+1} - y_i - h_i y'_{i+1},$$

$$x = x_i + h_i t, \quad 0 \leq t \leq 1.$$

Из (1) видно, что $y'_i = f_i$, $y'_{i+1} = f_{i+1}$. Тогда из (4)

при $t = \frac{1}{2}$ получаем выражение $\bar{y}_i = \frac{1}{2}(y_i + y_{i+1}) + \frac{h_i}{8}(f_i - f_{i+1})$, которое используем для нахождения \bar{f}_i .

Введем обозначения

$$m_1 = m + 1 - m_0,$$

$$y_{ij} = y_i(x_j), \quad f_{ij} = f_i(x_j, \bar{y}(x_j), Q, \lambda, s),$$

$$\Phi_{ij} = \Phi_i(y_{ij}, f_{ij}),$$

$$Y = (y_{11}, \dots, y_{m_1}, y_{12}, \dots, y_{m_2}, \dots, y_{1n}, \dots, \dots, y_{mn}, \lambda_1, \dots, \lambda_1)^T,$$

$$\Phi = (1_1, \dots, 1_{m_0}, \Phi_{11}, \dots, \Phi_{m_1}, \dots,$$

$$\dots, \Phi_{1, n-1}, \dots, \Phi_{m, n-1}, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{m_1})^T,$$

$$t = Q.$$

(5)

Тогда (3) можно записать в виде

$$\Phi(Y, t) = 0. \quad (6)$$

Предполагается, что (6) определяет гладкую вектор-функцию $Y(t)$. Это система $m+1$ нелинейных уравнений относительно $m+1$ неизвестных. Будем решать ее методом Ньютона в соответствии с итерационным процессом

$$Y^{(k+1)} = Y^{(k)} + \Delta Y, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (7)$$

где ΔY является решением системы линейных алгебраических уравнений

$$\Phi'_Y(Y^{(k)}, t) \Delta Y = -\Phi(Y^{(k)}, t). \quad (8)$$

Кроме того, будем еще рассматривать систему

$$\Phi'_Y(Y, t) \frac{dY}{dt} = -\Phi'_t(Y, t). \quad (9)$$

Системы (8), (9) отличаются лишь правыми частями, поэтому для их решения достаточно одного обращения матрицы Φ'_Y , причем система (9) решается, когда итерационный процесс закончен. Точно так же при надобности решаются и системы

$$\Phi'_Y(Y, t) \frac{dY}{ds_k} = -\Phi'_{s_k}(Y, t), \quad k = 1, \dots, m_s. \quad (10)$$

Напомним, что S - вектор заданных констант.

Для определения Якобианов Φ'_Y , Φ'_t , Φ'_{s_k} используются следующие формулы

$$\frac{\partial \Phi_{kj}}{\partial y_{1j}} = \begin{cases} 1 + \frac{h_j}{6} \left[\frac{\partial f_{kj}}{\partial y_{kj}} + 4 \sum_{l=1}^m \frac{\partial \bar{f}_{kj}}{\partial \bar{y}_{lj}} \frac{\partial \bar{y}_{lj}}{\partial y_{kj}} \right], & k = i, \\ \frac{h_j}{6} \left[\frac{\partial f_{kj}}{\partial y_{1j}} + 4 \sum_{l=1}^m \frac{\partial \bar{f}_{kj}}{\partial \bar{y}_{lj}} \frac{\partial \bar{y}_{lj}}{\partial y_{1j}} \right], & k \neq i; \end{cases}$$

$$\frac{\partial \Phi_{kj}}{\partial y_{i,j+1}} = \begin{cases} -1 + \frac{h_j}{6} \left[\frac{\partial f_{k,j+1}}{\partial y_{k,j+1}} + 4 \sum_{l=1}^m \frac{\partial \bar{f}_{kj}}{\partial \bar{y}_{lj}} \frac{\partial \bar{y}_{lj}}{\partial y_{k,j+1}} \right], & k = i, \\ \frac{h_j}{6} \left[\frac{\partial f_{k,j+1}}{\partial y_{i,j+1}} + 4 \sum_{l=1}^m \frac{\partial \bar{f}_{kj}}{\partial \bar{y}_{lj}} \frac{\partial \bar{y}_{lj}}{\partial y_{i,j+1}} \right], & k \neq i; \end{cases}$$

$$\frac{\partial \bar{y}_{lj}}{\partial y_{1j}} = \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{h_j}{8} \frac{\partial f_{1j}}{\partial y_{1j}}, & l = i, \\ \frac{h_j}{8} \frac{\partial f_{1j}}{\partial y_{1j}}, & l \neq i; \end{cases}$$

$$\frac{\partial \bar{y}_{lj}}{\partial y_{i,j+1}} = \begin{cases} \frac{1}{2} - \frac{h_j}{8} \frac{\partial f_{1,j+1}}{\partial y_{1,j+1}}, & l = i, \\ -\frac{h_j}{8} \frac{\partial f_{1,j+1}}{\partial y_{1,j+1}}, & l \neq i; \end{cases}$$

$$\frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \xi} = \frac{h_j}{6} \left[\frac{\partial f_{ij}}{\partial \xi} + 4 \frac{\partial \bar{f}_{ij}}{\partial \xi} + 4 \sum_{k=1}^m \frac{\partial \bar{f}_{ij}}{\partial \bar{y}_{kj}} \frac{\partial \bar{y}_{kj}}{\partial \xi} + \frac{\partial f_{i,j+1}}{\partial \xi} \right],$$

$$\frac{\partial \bar{y}_{kj}}{\partial \xi} = \frac{h_j}{8} \left[\frac{\partial f_{kj}}{\partial \xi} - \frac{\partial f_{k,j+1}}{\partial \xi} \right], \quad k, i = 1, \dots, m, \\ j = 1, \dots, n-1,$$

где ξ означает либо Q , либо λ_k , $k = 1, \dots, l$, либо s_k , $k = 1, \dots, m$.

2.2. Параметризация и продолжение по параметру. Численное исследование краевой задачи (1), (2) начинается со стартовой точки, в которой заданы Q_0 , $Y^{(0)}(Q_0)$ и предполагается, что решения краевой задачи, а также системы (6) существуют и единственны. Решив (6) и (9), найдем $Y(Q_0)$ и $\frac{dY}{dQ}$. Далее можно организовать продолжение решения по параметру Q , строя начальное приближение для следующей точки по формулам

$$\left. \begin{aligned} t_2 &= t_1 + h_t, \\ Y^{(0)}(t_2) &= Y(t_1) + h_Y \frac{dY}{dt}, \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

где $t_1 = Q$, $\frac{dY}{dt} = \frac{dY}{dQ}$, $h_t = h_Q$, h_Q и h_Y - заданные величины, причем $h_Y > 0$, а знак при h_Q указывает направление движения по параметру Q .

Но весь процесс окажется некорректным, если мы попадем в окрестность точки ветвления типа "поворот", где $\det |\Phi_Y'(t)| = 0$. Избегать подобных ситуаций позволяет параметризация [1], означающая смену параметра. При этом прежний параметр включается в число неизвестных и определяется в результате решения преобразованной системы (6).

Пусть мы находимся в точке, где уже выбран параметр, и найдены $Y(t)$, Q , $\frac{dY}{dt}$, $\frac{dQ}{dt}$. Пусть

$$z = \max_{\substack{1 \leq i \leq m \\ 1 \leq j \leq l \\ 1 \leq k \leq l}} \left\{ \left| \frac{dy_{i,j}}{dt} \right|, \left| \frac{d\lambda_k}{dt} \right|, \left| \frac{dQ}{dt} \right| \right\}.$$

В качестве нового текущего параметра для следующей точки выбирается либо Q , если $\left| \frac{dQ}{dt} \right| = z$, либо y_{pq} , если $\left| \frac{dy_{pq}}{dt} \right| = z$, либо λ_r , если $\left| \frac{d\lambda_r}{dt} \right| = z$. Обратимся к

системе линейных алгебраических уравнений (8). Ее матрица Φ'_Y имеет блочно-двухдиагональную структуру с последними l заполненными столбцами (см. приложение).

Укажем, как меняется структура этой матрицы при параметризации. Если текущим параметром является Q , то вид матрицы, как в приложении, а $\Phi'_t = \Phi'_Q$ и вектор Y имеет вид (5). Если параметром выбирается переменная y_{pq} , то из матрицы Φ'_Y вычеркиваются столбцы, содержащие производные по y_{pq} и к числу l заполненных столбцов добавляется вектор-столбец Φ'_Q . При этом $\Phi'_t = \Phi'_{y_{pq}}$, а вектор Y принимает вид

$$Y = (y_{11}, \dots, y_{m1}, \dots, y_{1q}, \dots, y_{p-1,q}, y_{p+1,q}, \dots, y_{1n}, \dots, y_{mn}, \lambda_1, \dots, \lambda_1, Q)^T.$$

Если параметром выбирается λ_r , то из числа последних l заполненных столбцов вычеркивается столбец, содержащий производные по λ_r и на его место ставится вектор-столбец Φ'_Q . При этом $\Phi'_t = \Phi'_{\lambda_r}$, а

$$Y = (y_{11}, \dots, y_{m1}, \dots, y_{1n}, \dots, y_{mn}, \lambda_1, \dots, \dots, \lambda_{r-1}, Q, \lambda_{r+1}, \dots, \lambda_1)^T.$$

После параметризации строится начальное приближение для продолжения решения по выбранному параметру. Если это была стартовая точка, то используются формулы (11) с учетом того,

что роль t может уже не принадлежать Q . Если точка текущая, то начальное приближение экстраполируется квадратичной параболой, которая определяется по значениям $Y(t_1)$, $Y(t_2)$, $\frac{dY}{dt} \Big|_{t=t_2}$, где t_2 - текущая точка, а t_1 - точка, ей предшествующая.

Для полученного начального приближения повторяется процесс (7)-(8). Соответствующая линейная алгебраическая система (8) решается методом исключения Гаусса с выбором главного элемента по столбцам с учетом параметризации и блочно-двухдиагональной структуры матрицы. При этом заполнению и обработке подвергаются $(m+1) \times (2m+1)$ ненулевых элементов. Полученная в результате прямого хода метода Гаусса верхняя треугольная матрица и преобразующие элементы запоминаются и используются для решения систем (9) и (10).

При продолжении по параметру может оказаться, что предсказанное начальное приближение дает слишком большое число итераций в процессе (7)-(8), тогда предусмотрен возврат в прежнюю точку и пересчет начального приближения с шагом $h_t/2$.

2.3. Адаптация узлов сетки. Точность аппроксимации исходной краевой задачи конечномерной системой существенно зависит от расположения узлов сетки. Алгоритм нахождения оптимального расположения узлов сетки в рамках заданной размерности N подробно изложен в [2]. Он основан на приближенном решении уравнения [4]

$$\int_{x_1}^{x_{i+1}} |y^{IV}(x)|^{1/4} dx = \frac{1}{N} \int_a^b |y^{IV}(x)|^{1/4} dx.$$

В пакете NEWST1 для нахождения $y^{IV}(x_i)$ используются $y''(x_i)$, которые, как видно из (1), удовлетворяют условиям $y''(x_i) = f'_x + f'_{yy}$. После оптимизации расположения узлов, ана-

лизируются шаги $h_i = x_{i+1} - x_i$. Если встретился шаг $h_i > h_{\max}$, где h_{\max} - заданный максимальный шаг, то на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ добавляются новые узлы, и размерность сетки увеличивается. При перерасчете $y(x)$ на новую сетку используется локальный интерполяционный кубический эрмитов сплайн [5].

В пакете предусмотрены следующие возможности работы с сеткой:

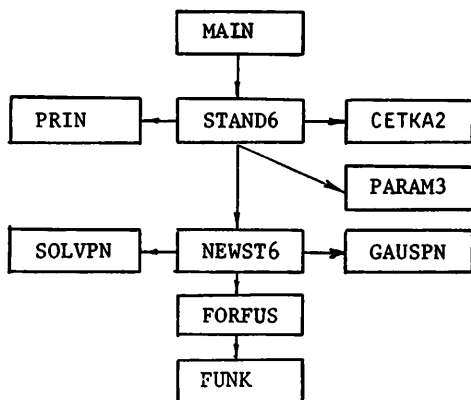
- неподвижная сетка фиксированной размерности;
- переменная сетка фиксированной размерности;
- динамическая сетка.

§3. Описание программных модулей и их применение

Пакет прикладных программ NEWST1 состоит из 7 программ: STAND6, NEWST6, PARAM3, СЕТКА2, FORFUS, GAUSPN, SOLVFN. Кроме того, требуются программы FUNK, PRIN и головная программа MAIN, написание которых предоставляется пользователю.

Программа FUNK служит для вычисления функций $f(x, y, Q, \lambda, s)$, $f'_y(x, y, Q, \lambda, s)$, $f'_Q(x, y, Q, \lambda, s)$, $f'_\lambda(x, y, Q, \lambda, s)$, $f'_s(x, y, Q, \lambda, s)$ в точке x . Здесь должны быть вычислены граничные условия l_i и g_i и якобиан граничных условий. Программа PRIN осуществляет обработку результатов. Имена FUNK и PRIN передаются пакету, как формальные параметры.

В головной программе дается описание переменных и массивов, задается начальное приближение для стартовой точки, определяются входные параметры пакета, а также осуществляется обращение к программе STAND6, которая является управляющей программой пакета. Взаимосвязь пакетных модулей приведена на рисунке.



Программа NEWST6 реализует итерационный процесс решения систем (6)-(8), а также решение систем (9) и (10).

Программа CETKA2 выполняет оптимизацию узлов сетки. В программе PARAM3 организуется выбор текущего параметра и построение начального приближения. Программы GAUSPN и SOLVFN осуществляют решение линейных алгебраических систем (8)-(10). FORFUS является вспомогательной программой.

Для практического использования имеются версии пакета для вычислений с простой и с двойной точностью. ППП NEWST1 был опробован на различных тестовых примерах. Сейчас он используется для расчета математических моделей газотранспортного процесса роста кристаллической фазы в непроточной системы с учетом многокомпонентной диффузии и перекрестных эффектов [3]. Эти модели разработаны в Институте неорганической химии СО РАН Я.М.Бужданом.

Л и т е р а т у р а

1. ДЯТЛОВ В.Л., КОНЯШКИН В.В., ПОТАПОВ Б.С., ФАДЕЕВ С.И. Пленочная электромеханика. - Новосибирск: Наука, 1991. - 243 с.

2. ЛУКЬЯНОВА Р.Г. Пакет прикладных программ NEWST решения нелинейных краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с параметром //Аппроксимация сплайнами. - Новосибирск, 1988. - Вып. 128: Вычислительные системы. - С. 117-142.

3. БУЖДАН Я.М., САВЧЕНКО С.О., ЛУКЬЯНОВА Р.Г., ФАДЕЕВ С.И. Математическое моделирование и оптимизация процесса роста кристаллической фазы карбида кремния в непроточной газотранспортной ячейке //Тез.докл. конф. по электронным материалам. - Новосибирск, - 1992. - С. 37-38.

4. Де БОР К. Практическое руководство по сплайнам. - М.: Радио и связь, 1985. - 304 с.

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

Поступила в ред.-изд.отд.

10 декабря 1992 года

