

УДК 519.615

О РЕШЕНИИ СИСТЕМЫ ТРАНСЦЕНДЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ
С ПАРАМЕТРОМ МЕТОДОМ НЬЮТОНА

С.И. Фадеев

I. В в е д е н и е

К решению систем трансцендентных уравнений редуцируются многие задачи математической физики, описывающие нелинейные процессы. В данной работе метод Ньютона с параметризацией рассматривается в связи с проблемой численного исследования нелинейных краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с возможными ветвлениями решений.

Обычно среди параметров задачи известен параметр, обозначим его через Q , который потенциально ответствен за множественность решений. Если ветвление решений имеет место, то численное исследование поведения решения в зависимости от Q становится затруднительным. Например, может оказаться, что при выбранном значении Q решения вообще не существует.

Так, краевая задача, моделирующая "тепловой взрыв" в плоском сосуде [1]:

$$0 < x < 1, \quad \frac{d^2 y}{dx^2} + Qe^y = 0, \quad \frac{dy}{dx}(0) = y(1) = 0, \quad Q > 0, \quad (1)$$

как известно, имеет два решения при $Q < Q_*$, где $Q_* \approx 0,88$. Если же $Q > Q_*$, то стационарных решений нет. В этом случае соответствующая краевая задача для параболического уравнения:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + Qe^y, \quad \frac{\partial y}{\partial t}(t, 0) = y(t, 1) = 0$$

с достаточно гладкой функцией $y(0, x)$ будет описывать неограни -
ченное с ростом t решение.

Параметризация задачи состоит в том, что вместо Q указыва -
ется другой параметр, обозначим его через y_0 , из числа подлежа -
щих определению в исходной постановке задачи (например, $y_0 = y(0)$
в задаче (I)), так чтобы в некоторой области изменения y_0 реше -
ние задачи было либо единственным, либо точка ветвления, связанная
уже с y_0 , была бы достаточно удалена от выбранного значения y_0 .
При этом Q также подлежит определению из решения "параметризован -
ной" задачи.

Например, из формул точного решения (I):

$$y(x) = a(1-x) - 2\ln(b(1+e^{-ax})),$$

$$a = y_0 + 2\ln(1+\sqrt{1-e^{-y_0}}), \quad b = 1/(1-e^{-a}),$$

$$y_0 = y(0) = \max_{0 \leq x \leq 1} y(x),$$

следует, что зависимость Q от y_0 имеет вид:

$$Q(y_0) = a^2 e^{-y_0}/2, \quad y_0 > 0, \quad (2)$$

т.е. Q однозначно определяется заданием y_0 . Другими словами, па -
раметризованная задача (I) не содержит точек ветвления решений,
связанных с y_0 . В данном случае для численного исследования (I)
требуется указать алгоритм, при котором решение принимало бы за -
данное значение y_0 при $x = 0$.

Используя набор решений краевой задачи как в зависимости от
 Q , так и в зависимости от y_0 как параметра, можно построить гра -
фик функции $Q(y_0)$, по которому и устанавливается отсутствие или
существование ветвления решений. По этой причине мы будем назы -
вать $Q(y_0)$ бифуркационной кривой. Заметим, что построение бифур -
кационной кривой, вообще говоря, требует неоднократной параметри -
зации, связанной с привлечением множества параметров типа y_0 . Од -
нако, обладая набором решений, мы можем построить зависимость
 $Q(y_0)$, возможно, неоднозначную, взяв в качестве аргумента любой
параметр из упомянутого множества.

Существуют различные способы численного исследования нелиней -
ной дифференциальной краевой задачи при фиксированном Q . Часто
используются методы типа стрельбы. Их эффективность и примени -

мость могут быть ограничены либо жесткостью решаемых при этом задач Коши, либо числом "пристреливаемых" параметров. Ограничение на метод параболического спуска обусловлено тем, что при этом мы имеем возможность строить только устойчивые решения. Наконец, использование квазилинеаризации нелинейной краевой задачи затруднительно, если имеет место ветвление решений, связанное с параметром Q .

Мы будем предполагать, что дифференциальная краевая задача достаточно эффективно сведена к системе трансцендентных уравнений. Не останавливаясь на обосновании возможности такого приближенного представления (для большинства практических задач это носит характер численного эксперимента), продемонстрируем его на задаче (I). Используя функцию Грина $G(x, s)$, $0 \leq x, s \leq 1$, представим (I) в виде нелинейного интегрального уравнения:

$$y(x) = Q \int_0^1 G(x, s) f[y(s)] ds, \quad f(y) = e^y, \quad (3)$$

$$G(x, s) = \begin{cases} 1-x, & x < s, \\ 1-s, & x \geq s. \end{cases}$$

Введем сетку по x : $0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1$, $h_1 = x_{i+1} - x_i$ и приближенно заменим подынтегральную функцию $f[y(x)]$ в (3) на интерполяционный кубический сплайн дефекта 1 [2]:

$$f[y(x)] \approx \sum_{k=1}^N f(y_k) \varphi_k(x), \quad y_k = y(x_k),$$

с погрешностью интерполяции порядка $\max_i h_i^4$. Здесь φ_k - k -й фундаментальный кубический сплайн, определяемый следующими условиями интерполяции:

$$\varphi_k(x_i) = \begin{cases} 1, & i=k, \\ 0, & i \neq k, \end{cases}$$

$$\frac{d\varphi_k}{dx}(0) = 0, \quad \frac{d^3\varphi_k}{dx^3}(x_{N-1}+0) = \frac{d^3\varphi_k}{dx^3}(x_{N-1}-0).$$

Левое условие интерполяции учитывает равенство нулю производной сплайна при $x = 0$. При этом под y_k мы будем понимать приближенные значения $y(x)$ в узлах сетки.

или

$$F(y; Q) = 0, \quad (5)$$

где y - вектор с элементами y_i , F - вектор с элементами $F_i(y; Q)$, $i = \overline{1, N}$. Пусть в некоторой окрестности $Q = Q_0$ существует решение (5) и пусть при этом пространственная кривая

$$y = y(Q), F[y(Q); Q] = 0 \quad (6)$$

не имеет особых точек.*) Приведем описание численного метода построения $y(Q)$, отличного от [3].

Предположим, что при $Q = Q_0$ нам известно приближение $y^1(Q_0)$, позволяющее найти $y(Q_0)$ по методу Ньютона [4]:

$$y^{k+1}(Q_0) = y^k(Q_0) - [F'(y^k; Q_0)]^{-1} F(y^k; Q_0),$$

$k = 1, 2, \dots$, и так далее, если не выполнено условие выхода из итерационного процесса. Здесь $F'(y; Q)$ - обозначение матрицы Якоби, $[F'(y; Q)]^{-1}$ - обратная матрица. В результате становится известным не только вектор $y(Q_0)$, но и матрица $[F'(y; Q_0)]^{-1}$, что дает возможность сразу же вычислить при $Q = Q_0$ элементы dy_i/dQ вектора производных dy/dQ по параметру:

$$\frac{dy}{dQ}(Q_0) = -[F'(y; Q_0)]^{-1} \frac{\partial F}{\partial Q}(y; Q_0).$$

Задав шаг H_Q по параметру Q , примем за начальное приближение $y^1(Q_0 + H_Q)$, например, вектор:

$$y^1(Q_0 + H_Q) = y(Q_0) + H_Q \frac{dy}{dQ}(Q_0),$$

чтобы затем обратиться к методу Ньютона применительно к системе $F(y; Q_0 + H_Q) = 0$ и так далее.

Однако типичен случай, когда (5) определяет неоднозначную функцию $y(Q)$. При этом найдется Q_* такое, что

$$\det[F'(y; Q_*)] = 0. \quad (7)$$

Следовательно, с приближением Q к Q_* неограниченно растут элементы вектора dy/dQ , и становится неправомерным применение метода Ньютона к системе (5). Чтобы избежать возникновения такой

*) Может оказаться, что (6) определяет не единственную пространственную кривую.

ситуации, мы будем наряду с Q рассматривать y_1, y_2, \dots, y_N в качестве возможных параметров. Действительно, по предположению, ранг матрицы B

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial y_{k-1}} & \frac{\partial F_1}{\partial y_k} & \frac{\partial F_1}{\partial y_{k+1}} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial y_N} & \frac{\partial F_1}{\partial Q} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial F_N}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial F_N}{\partial y_{k-1}} & \frac{\partial F_N}{\partial y_k} & \frac{\partial F_N}{\partial y_{k+1}} & \dots & \frac{\partial F_N}{\partial y_N} & \frac{\partial F_N}{\partial Q} \end{bmatrix}$$

равен N . Поскольку имеет место (7), то найдется y_k такое, что после замены параметра системы Q на y_k и включения Q в число неизвестных, определитель матрицы \tilde{B} :

$$\tilde{B} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial y_{k-1}} & \frac{\partial F_1}{\partial Q} & \frac{\partial F_1}{\partial y_{k+1}} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial y_N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial F_N}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial F_N}{\partial y_{k-1}} & \frac{\partial F_N}{\partial Q} & \frac{\partial F_N}{\partial y_{k+1}} & \dots & \frac{\partial F_N}{\partial y_N} \end{bmatrix}$$

будет отличен от нуля при $Q = Q_*$. В силу теоремы о неявных функциях решение системы в некоторой окрестности значения параметра y_k , $y_k = y_k(Q_*)$ представимо в виде:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_1(y_k), \\ y_2 &= y_2(y_k), \\ &\dots \dots \dots \\ y_{k-1} &= y_{k-1}(y_k), \\ Q &= Q(y_k), \\ y_{k+1} &= y_{k+1}(y_k), \\ &\dots \dots \dots \\ y_N &= y_N(y_k). \end{aligned}$$

Таким образом, в этой окрестности метод Ньютона может быть использован при решении системы трансцендентных уравнений:

$$F(y_1, y_2, \dots, y_{k-1}, Q, y_{k+1}, \dots, y_N; y_k) = 0 \quad (8)$$

относительно неизвестных $y_1, 1 \neq k$, и Q , с параметром y_k . Нам осталось описать процедуру выбора параметра системы (процедуру параметризации), к которой мы будем обращаться на каждом шагу построения функции $y(Q)$.

Обозначим через y_{N+1} параметр Q . Условимся далее понимать под y вектор неизвестных, определяемый системой (8) с параметром y_k , или, что то же самое, системой

$$F(y; y_k) = 0. \quad (9)$$

При этом, если $k = N+1$, то элементы вектора y в (5) и (9) совпадают. В противном случае обозначения элементов вектора y показаны в (8), где $Q = y_{N+1}$. Использование обозначения y в новом качестве не вызовет в дальнейшем недоразумений.

Пусть при некотором значении параметра y_k системы (9) известно ее решение \bar{y} , а также матрица $[F'(\bar{y}; \bar{y}_k)]^{-1}$. Вычислим элементы вектора производных по y_k :

$$\frac{dy}{dy_k}(\bar{y}_k) = -[F'(\bar{y}; \bar{y}_k)]^{-1} \frac{dF}{dy_k}(\bar{y}; \bar{y}_k), \quad (10)$$

Напомним, что k -й элемент вектора производных по параметру y_k равен dQ/dy_k , если индекс параметра отличен от $N+1$. Для предупреждения возможного роста производных по параметру при построении функции $y(Q)$ мы будем нормировать производные, связав определение очередного параметра системы с поиском максимальной по абсолютной величине производной. Предварительно расположим элементы dy_i/dy_k , включая $dy_k/dy_k = 1$, в порядке монотонного возрастания индекса i . Пусть

$$\left| \frac{dy_n}{dy_k} \right| = \max_{1 \leq i \leq N+1} \left| \frac{dy_i}{dy_k} \right| \text{ при } y_k = \bar{y}_k.$$

В результате нормировки производных (10) получим:

$$\frac{dy_1}{dy_n} = \frac{dy_1}{dy_k} \bigg/ \frac{dy_n}{dy_k} \text{ при } y_n = \bar{y}_n.$$

Таким образом, выбрав y_n в качестве параметра системы (9), мы будем располагать решением \bar{y} при $y_n = \bar{y}_n$, а также вектором производных dy/dy_n , абсолютная величина элементов которого не превосходит 1.

Завершается этап выбором шага H_n по параметру y_n и заданием начального приближения в методе Ньютона для решения системы:

$$F(y; \bar{y}_n + H_n) = 0. \quad (11)$$

При этом, наряду с \bar{y} и $d\bar{y}/dy_n = dy/dy_n(\bar{y}_n)$, нам потребуется решение \hat{y} , предшествующее \bar{y} . При помощи \hat{y} определяется знак шага по параметру:

$$\text{SGN}(H_n) = \text{SGN}(\hat{H}_n), \quad \hat{H}_n = \bar{y}_n - \hat{y}_n.$$

Кроме того, естественно использовать \hat{y} и $d\hat{y}/dy_n = dy/dy_n(\hat{y}_n)$ в начальном приближении решения (II):

$$y^1(\bar{y}_n + H_n) = \bar{y} + H_n \left[\frac{d\bar{y}}{dy_n} + \frac{H_n}{\hat{H}_n} (c_2 + \frac{H_n}{\hat{H}_n} c_1) \right], \quad (12)$$

где

$$c_1 = \frac{d\bar{y}}{dy_n} + \frac{d\hat{y}}{dy_n} - 2 \frac{\bar{y} - \hat{y}}{\hat{H}_n}, \quad c_2 = c_1 + \frac{d\bar{y}}{dy_n} - \frac{\bar{y} - \hat{y}}{\hat{H}_n}.$$

Исключение составляет вид начального приближения при вычислении второй точки кривой $y(Q)$:

$$y^1(\bar{y}_n + H_n) = \bar{y} + H_n \frac{d\bar{y}}{dy_n}. \quad (13)$$

Обоснованная формализация выбора шага по параметру является достаточно трудной проблемой. Однако во многих случаях построение $y(Q)$ методом Ньютона в сочетании с параметризацией оказывается не слишком к этому критичным. Например, абсолютную величину шага по каждому из параметров можно задать постоянной, равной H_n^* , наложив ограничение на число итераций, необходимых для достижения требуемой малости нормы $\|y^{k+1} - y^k\|$. Если ограничение не выполняется, то вычисление начального приближения по формулам (12) или (13) возобновляется с шагом H_n , где, например, $H_n = H_n^* / 2$. Выполнив достаточное количество делений H_n пополам, мы получим решение (II) за требуемое число итераций n_0 , $n_0 > 1$, так как с

уменьшением H_n улучшается "предсказание" решения (II). Кроме того, полезно через определенное число шагов n_1 построения $y(Q)$ возвращаться к "эталонному" значению H_n^* . Конкретный вариант "автоматизации" выбора шага по параметру приведен в описании программы **SYSTEM** на языке BASIC, реализующей описанную процедуру решения системы трансцендентных уравнений с параметром [5].

В качестве тестов были построены решения ряда примеров. Первый пример, рассмотренный в [3], представляет собой систему из четырех уравнений:

$$\begin{aligned} F_1 &= y_5(1-y_3)G(y_1)-y_3 = 0, \\ F_2 &= 22y_5(1-y_3)G(y_1)-3y_1 = 0, \\ F_3 &= y_5(1-y_4)G(y_2)+y_3-y_4 = 0, \\ F_4 &= 22y_5(1-y_4)G(y_2)+y_1-3y_2 = 0, \end{aligned}$$

где $y_5 = Q$, $G(z) = \exp\left(\frac{z}{1 + z/100}\right)$.

Начальной точкой пространственной кривой являлась:

$$y_1 = y_2 = y_3 = y_4 = 0 \quad \text{при} \quad Q = 0.$$

Приведем значения других параметров, управлявших вычислительным процессом: $n_0 = 2$, $n_1 = 5$, $H_1^* = H_2^* = H_3^* = H_4^* = 0.5$, $H_5^* = 0.2$. Выход из итераций по методу Ньютона определялся условием $\|y^{k+1} - y^k\| < E_0$, $E_0 = 10^{-4}$.

На рис. 1 изображена зависимость $y_1(Q)$ и $y_4(Q)$. Здесь стрелками отмечено направление, соответствующее последовательности вычислений точек пространственной кривой. При построении графика $y_1(Q)$ потребовалось дополнительно отметить стрелками участки кривой, проходимые трижды.

Второй пример был взят из [6] по предложению автора этой работы:

$$\begin{aligned} F_1 &= 2a_1y_1^2y_2e^{-b_1y_2} - c_1(1-y_1-y_2)^2 + r_1y_1^2 = 0, \\ F_2 &= a_1y_1^2y_2e^{-b_1y_2} - c_2(1-y_1-y_2)^2 + r_2y_2e^{-b_2y_2-b_3y_3} = 0, \end{aligned}$$

$$0 < y_3 < 1, \quad 1 - y_1 - y_2 > 0,$$

$$a_1 = 100, \quad b_1 = 30, \quad c_1 = 0.2, \quad r_1 = 0.01,$$

$$c_2 = 15, \quad r_2 = 2, \quad b_2 = 12, \quad b_3 = -10.$$

Систему можно рассматривать как параметрическое задание кривой $y = y(y_2)$, явное выражение которой легко устанавливалось и в дальнейшем использовалось для сравнения с расчетами:

$$y_1(y_2) = (1 - y_2)/(1 + \sqrt{a}),$$

$$y_3(y_2) = -(b_2 y_2 + \ln(b y_1^2 / y_2)) / b_3,$$

где

$$a = (2a_1 y_2 e^{-b_1 y_2} + r_1) / c_1,$$

$$b = ((2c_2 - c_1)a + r_1) / 2r_2.$$

Кроме того, система определяет еще одно представление $y(y_2)$, где $y_1(y_2) = (1 - y_2)/(1 - \sqrt{a})$, но условие $1 - y_1 - y_2 > 0$ не выполняется. На рис.2 дана зависимость $y_1(q)$ и $y_2(q)$, $q = y_3$. За начальное приближение первой точки пространственной кривой взяты следующие значения: $y_1 = 0,001$, $y_2 = 0,994$, $y_3 = 0,01$. "Эталонный" шаг равен 0,02; $n_0 = 2$, $n_1 = 5$, $E_0 = 10^{-5}$.

Более подробно результаты решения рассмотренных примеров приведены в [5].

3. Об эффективности применения параметризации к решению нелинейных краевых задач

Метод Ньютона с параметризацией был успешно опробован на решении систем типа (4). К такому виду приводятся многие краевые задачи, связанные с математическим моделированием в макрокатализе, описание нелинейных колебаний и так далее. Автором идея параметризации была реализована впервые при решении краевой задачи, связанной с моделированием в пленочной электромеханике [7]:

$$D \frac{d^4 y}{dx^4} = \frac{d^2 y}{dx^2} + Qf(y), \quad f(y) = 1/(1-y)^2,$$

$$0 \leq x \leq 1,$$

$$\frac{dy}{dx}(0) = \frac{d^3y}{dx^3}(0) = y(1) = \frac{dy}{dx}(1) = 0,$$

$$D = \text{const} > 0.$$

Как оказалось, для решения соответствующей системы трансцендентных уравнений (4), преобразованной путем исключения параметра Q к виду:

$$y = y_0 \frac{Af(y)}{(A_1, f(y))}, \quad y_0 = y(0),$$

достаточно использовать простую итерацию. Здесь A_1 - первая вектор-строка матрицы A .

Процедура Ньютона предполагает на каждой итерации решение системы линейных алгебраических уравнений, и здесь мы можем столкнуться с проблемой размерности системы. Например, в тех случаях, когда решение дифференциальной краевой задачи характеризуется областями больших градиентов, достаточно хорошая аппроксимация задачи системой трансцендентных уравнений достигается за счет увеличения числа разбиений отрезка по x и, следовательно, размерности системы.

Приведем пример, когда матрица якобиана системы имеет специальный вид, что позволяет для решения алгебраической задачи использовать экономичные методы типа прогонки. Рассмотрим вновь краевую задачу типа (I):

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{M}{x} \frac{dy}{dx} + Qf(y) = 0, \quad f(y) = e^y, \\ 0 \leq x \leq 1,$$

$$\frac{dy}{dx}(0) = y(1) = 0,$$

где $M = 0, 1, 2$ для решения с плоской, цилиндрической и сферической симметриями соответственно. Формальное привлечение сплайн-коллокации с использованием кубических В-сплайнов приводит к следующей системе трансцендентных уравнений [2]:

$$F_1 = A_{1,2}u_1 + A_{1,3}u_2 + QA_{1,4}f(y_1) = 0,$$

$$F_i = A_{i,1}u_{i-1} + A_{i,2}u_i + A_{i,3}u_{i+1} + QA_{i,4}f(y_i) = 0, \\ i = 2, 3, \dots, N-1, \\ F_N = A_{N,1}u_{N-1} + A_{N,2}u_N + QA_{N,4}f(y_N) = 0.$$

Здесь

$$y_1 = A_{1,6}u_1 + A_{1,7}u_2, \quad y_N = 0, \\ y_i = A_{i,5}u_{i-1} + A_{i,6}u_i + A_{i,7}u_{i+1}, \\ i = 2, 3, \dots, N-1, \\ A_{1,2} = 1, \quad A_{1,3} = -1, \quad A_{1,4} = h_1^2/2(M+1), \quad A_{1,6} = 2/3, \quad A_{1,7} = 1/3, \\ A_{i,1} = 1 - \frac{h_i M}{2x_i}, \quad A_{i,3} = \left(1 + \frac{h_{i-1} M}{2x_i}\right) \frac{x_{i+1} - x_{i-2}}{x_{i+2} - x_{i-1}}, \\ A_{i,2} = -A_{i,1} - A_{i,3}, \\ A_{i,4} = (x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-2})/6, \\ A_{i,5} = h_i^2/(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-2}), \quad A_{i,7} = h_{i-1}^2/(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+2} - x_{i-1}), \\ A_{i,6} = 1 - A_{i,5} - A_{i,7}, \\ A_{N,1} = -h_{N-1}M, \quad A_{N,2} = -(6 + 2h_{N-1}M), \quad A_{N,4} = h_{N-1}^2.$$

Для удобства на формирование сетки по x наложены ограничения: $h_1 = h_2$, $h_{N-2} = h_{N-1}$. Легко видеть, что матрица якобиана $\partial F_i / \partial u_j$, $i, j = 1, 2, \dots, N$, является трехдиагональной. Следовательно, и у матрицы B лишь элементы трех диагоналей не обязаны быть нулевыми, и, кроме того, заполненным является только последний вектор-столбец:

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial u_1} & \frac{\partial F_1}{\partial u_2} & & & 0 & \frac{\partial F_1}{\partial Q} \\ \frac{\partial F_2}{\partial u_1} & \frac{\partial F_2}{\partial u_2} & \frac{\partial F_2}{\partial u_3} & & & \frac{\partial F_2}{\partial Q} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_{N-2}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_N} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial Q} \\ & & & & \frac{\partial F_N}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial F_N}{\partial u_N} & \frac{\partial F_N}{\partial Q} \end{bmatrix}$$

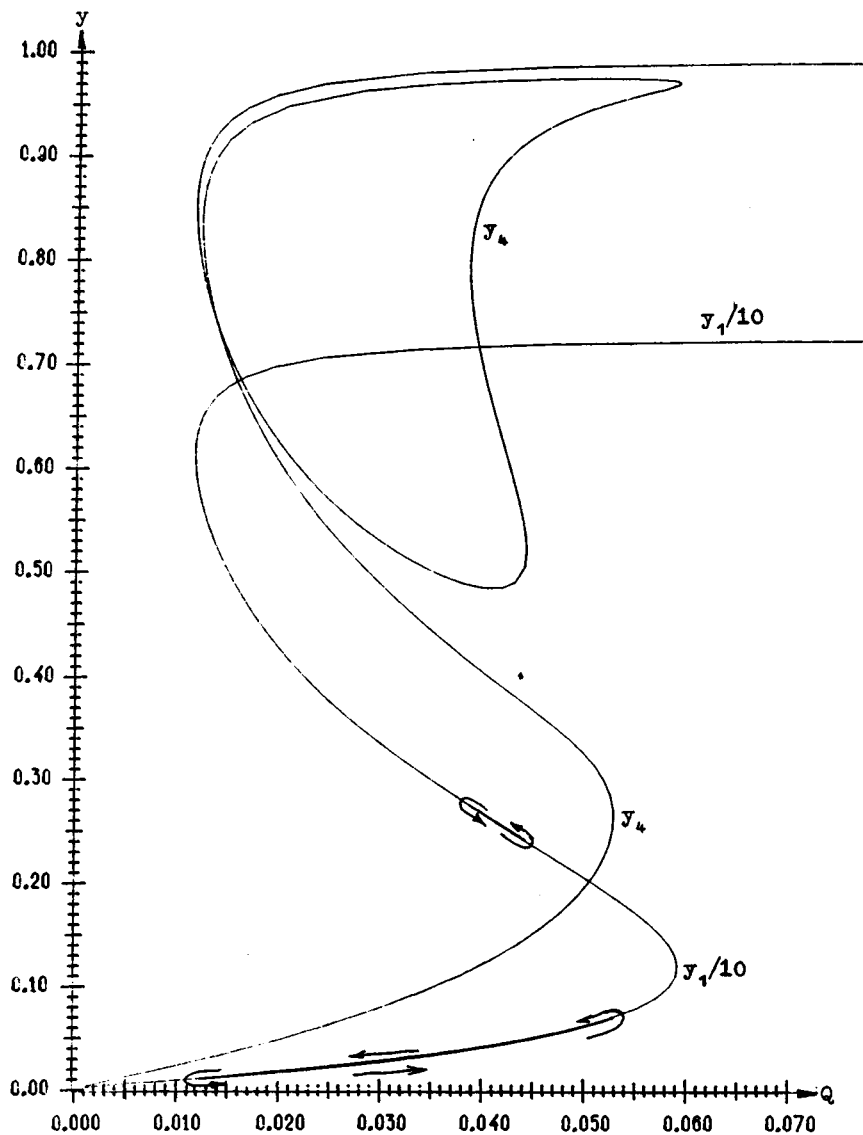


Рис. I. Численное решение примера I. При фиксированном Q число решений доходит до семи.

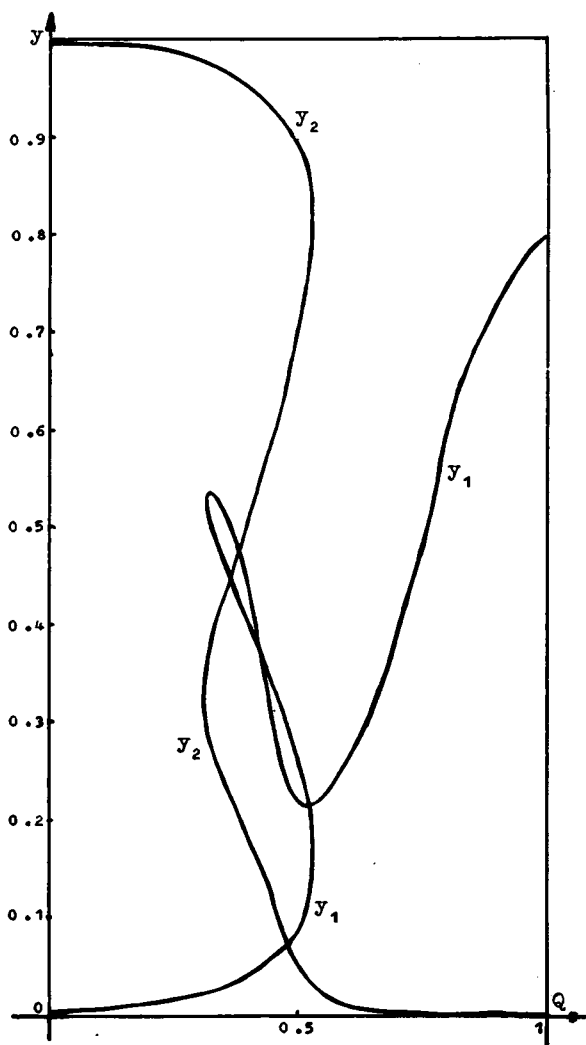


Рис. 2. Численное решение примера 2.
Число решений доходит до трех.

Важным является то обстоятельство, что использование для параметризации нормировки производных по параметру сохраняет разреженность матрицы алгебраической системы. В зависимости от задания функции $f(y)$ и величины Q эта матрица размерности $N \times N$ может быть либо трехдиагональной, либо три диагонали будут пересекаться заполненным k -м вектором-столбцом, соответствующим Q .

Для сохранения приемлемой аппроксимации (есть основание считать, что аппроксимация имеет порядок $\max h_i^2$) в процессе построения бифуркационной кривой $Q(y_0)$, $y_0 = y^i(0)$ было предусмотрено сгущение сетки в областях роста градиента решения. Сопоставление с точными решениями, которые имеют место при $M = 0$ и $M = 1$ [1], показало, что совпадение численного решения с точным в четвертом знаке потребовало формирования сетки с числом разбиений порядка 100 и более с увеличением y_0 . При этом численный эксперимент обнаружил достаточно хорошую обусловленность матриц алгебраических систем с размерностью порядка 100.

Таким образом, в том случае, когда матрица якобиана имеет ленточную структуру, предлагаемый вариант метода Ньютона с параметризацией позволяет находить решение на одной итерации за число арифметических операций порядка N (без учета затрат на вычисление вектора $f(y)$), в отличие от трудоемкости порядка N^3 , если ленточная структура не учитывается.

Автор выражает благодарность С.К.Годунову за внимание к работе и организацию ее обсуждения, а также участникам семинара под руководством Ю.С.Завьялова в Институте математики и семинара под руководством В.С.Шеплева в Институте катализа СО АН СССР, где работа докладывалась.

Л и т е р а т у р а

1. Математическая теория горения и взрыва /Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. - М.: Наука, 1980. - 478 с.
2. ЗАВЬЯЛОВ Ю.С., КВАСОВ Б.И., МИРОШНИЧЕНКО В.Л. Методы сплайн-функций.-М.: Наука, 1980. - 352 с.
3. KUBICEK M. Dependence of Solution of Nonlinear System on Parameter. - ACM Transactions on Mathematical Software, 1976, v.2, N 1, March, p.98-107.
4. БЕРЕЗИН И.С., ЖИДКОВ Н.П. Методы вычислений.Т.2. - М.:Физматгиз, 1962. - 640 с.

5. ФАДЕЕВ С.И. О решении системы трансцендентных уравнений с параметром методом Ньютона. - Новосибирск, Б.и., 1984. - 25 с. (Препринт /Институт математики СО АН СССР: № 72).
6. ЧУМАКОВ Г.А. Математические вопросы сложных измерений скорости гетерогенной каталитической реакции. - Новосибирск, Б.и. 1980. - 19 с. (Препринт /ВЦ СО АН СССР: № 233).
7. ЛУКЬЯНОВА Р.Г., ФАДЕЕВ С.И., ШВЕДОВА К.В. Расчет статистических параметров механической модели пленочного электростатического реле. - В кн.: Вычислительные системы. Вып. 40. Новосибирск, 1970, с. 3-50.

Поступила в ред.-изд.отд.
19 июля 1985 года