На правах рукописи

Юманова Ирина Фарисовна

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИТЕРАЦИОННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Екатеринбург — 2017

Работа выполнена на кафедре вычислительной математики и компьютерных наук Института естественных наук и математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный руководитель:	кандидат физико-математических наук, профессор $\boxed{\text{Вержбицкий Валентин Михайлович}}$, доктор физико-математических наук, профессор Пименов Владимир Германович
Официальные оппоненты:	Копысов Сергей Петрович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН Институт механики УрО РАН (г. Ижевск), главный научный сотрудник лаборатории вычислительных технологий.
	Чернов Андрей Владимирович, кандидат физико-математических наук, доцент ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», доцент кафедры математической физики и оптимального управления.
Ведущая организация:	ФГБОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет»

Защита состоится «04» октября 2017 г. в 13.00 на заседании диссертационного совета Д 212.285.25 на базе ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по адресу: 620000, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51, комн. 248.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», http://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?d=51&rid=270416.

Автореферат разослан «__» __________ 2017 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук
профессор

Пименов В. Г.

Общая характеристика работы

Актуальность темы и степень ее разработанности. При решении многих прикладных задач на разных этапах появляется необходимость поиска корней нелинейных уравнений. В частности, необходимо решать нелинейные скалярные уравнений вида $f(x) = 0$ или $x = \varphi(x)$, а также системы нелинейных алгебраических или трансцендентных уравнений вида

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{1}$$

или

$$\mathbf{x} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}), \tag{2}$$

где $\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ (или $\mathbf{\Phi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ соответственно) — векторная функция векторного аргумента, возникающих, например, при моделировании задач баллистики, теплофизики, электростатики, биофизики. В общем случае рассматривается нелинейное операторное уравнение

$$F(x) = 0, \tag{3}$$

где F — нелинейный оператор, действующий из $Q_F \subseteq X$ банахова пространства X в банахово пространство Y, здесь Q_F — область определения F. Также может быть рассмотрена задача о неподвижной точке

$$x = \Phi(x), \tag{4}$$

где Φ — нелинейный оператор, действующий из $Q_\Phi \subseteq X$ банахова пространства X в X, здесь Q_Φ — область определения Φ. К уравнениям вида (3) и (4) относятся интегральные уравнения, которые возникают, например, в задачах геофизики, рентгеноспектрального анализа и других.

Примером задачи, где требуется решать системы нелинейных уравнений, является задача внутренней баллистики ракетных двигателей твердого топлива (РДТТ) с учетом химически равновесных процессов в камере сгорания двигателя[1,2]. Вопросы расчета химически равновесного состава продуктов сгорания актуальны и в задачах связанных с утилизацией РДТТ[3], так как позволяют установить наличие в продуктах переработки вредных и токсичных веществ.

[1] Алиев А. В. и др. Внутренняя баллистика РДТТ/РАРАН : практическое пособие. М.: Машиностроение, 2007. 504 с.

[2] Алемасов В. Е., Дрегалин А. Ф., Тишин А. П. Теория ракетных двигателей: Учебник для студентов высших технических учебных заведений. М.: Машиностроение, 1989. 464 с.

[3] Бурдюгов С. И., Корепанов М. А., Кузнецов Н. П. и др. Утилизация твердотопливных ракетных двигателей (РДТТ). М.; Ижевск: Ин-т компьютерных исследований, 2008. 512 с.

Существует большое количество программных продуктов[4,5], позволяющих выполнить расчет химически равновесного состава продуктов сгорания. Однако применение их в составе программ расчета нестационарных задач внутренней баллистики для РДТТ различных типов может оказаться затруднительным. Это объясняется тем, что при численном решении нестационарных задач внутренней баллистики расчет химически равновесного состава продуктов сгорания осуществляется многократно (на каждом шаге интегрирования по времени и для каждого рассматриваемого в камере сгорания элементарного объема, что может составлять миллион и более раз). В связи с этим надежность решения задачи внутренней баллистики в существенной степени определяется надежностью вычислительных алгоритмов расчета химически равновесного состава.

Для расчета равновесных параметров в гетерогенных продуктах сгорания твердых топлив наиболее распространенным является предложенный академиком В.Е. Алемасовым подход[2], который основан на решении соответствующей системы нелинейных уравнений методом Ньютона.

Другой подход[5,6] состоит в представлении задачи о химически равновесном составе продуктов горения органического топлива в виде задачи математического программирования.

Для решения задачи о химически равновесном составе продуктов горения применяются итерационные алгоритмы[4], при этом отмечается, что надежность алгоритма и время решения задачи существенным образом зависят от удачного выбора начального приближения. Так же в отдельных случаях, например, для рецептур с условной формулой вида $C_aH_bO_cN_dS_fK_jMg_hCl_gAl_kLi_lBe_mB_nNa_p$, чтобы избежать вычислительной неустойчивости (и, как следствие, аварийного завершения расчетов на вычислительной технике) алгоритмов, требуется тщательная подготовка исходных данных[4]. На практике (при решении задачи о выходе ракетного двигателя на режим, задачи о работе двигательной установки на переходных режимах и т. д.) с учетом многократного решения задачи о составе продуктов горения, практически невозможно исключить аварийное завершение расчетов задачи внутренней баллистики.

---

[4]Алиев А. В., Воеводина О. А., Пушина Е. С. Модели нестационарных термогазодинамических процессов в ракетных двигателях с учетом химического равновесия продуктов сгорания // Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015. №11. С. 253—266.

[5]Белов Г. В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. М.: Научный Мир, 2002. 184 с.

[6]Соркин Р. Е. Теория внутрикамерных процессов в ракетных системах на твердом топливе. М.: Наука, 1983. 288 с.

В связи с тем, что применение перечисленных методов не всегда оказывается успешным, актуальна разработка и программная реализация новых итерационных методов решения систем нелинейных уравнений, возникающих в задаче о химически равновесном составе продуктов горения органического топлива.

Другими примерами, где требуется решать системы нелинейных уравнений, являются модели электростатики и модели математической иммунологии и вирусологии. Эти примеры рассмотрены в диссертации.

Главное место среди методов приближенного решения систем нелинейных уравнений (1), (2) и уравнений (3), (4) принадлежит итерационным методам. Основные результаты в данной области отражены в монографиях Л.В. Канторовича, М.А. Красносельского, Л. Коллатца, Дж. Ортеги и В. Рейнболдта, А.М. Островского, Дж. Трауба, Дж. Дэнниса и Р. Шнабеля и других, а также в работах М.Я. Бартиша, Б.А. Бельтюкова, Г.М. Вайникко, В.В. Васина, С.С. Волокитина, И.И. Еремина, П.П. Забрейко, Д.К. Лика, А. Роозе, П.С. Сенью, С.Ю. Ульма, В.М. Чернышенко, Р.А. Шафиева, С.М. Шахно и других. С начала XXI в. данное направление активно развивают зарубежные ученые S. Amat, I.K. Argyros, S. Bisquer, C. Brezinski, J.A. Ezquerro, M. Frontini, M.A. Hernández-Verón, J.M. Gutiérrez, H.H.H. Homiez, F.A. Potra, V. Ptak, X. Shang, X. Shao, P. Wu, T. Yamamoto и другие.

Безусловный интерес представляет повышение эффективности итерационных методов. Под эффективностью в диссертационной работе понимается получение более точных результатов без дополнительных вычислений функций, их производных и обращений матриц (Якоби, разделенных разностей и других) посредством изменения итерационных процессов. Один из способов такого повышения — это ускорение сходимости итерационных последовательностей за счет построения на их базе более быстро сходящихся к тому же пределу последовательностей. Классическим примером тому служит, например, Δ^2–преобразование Эйткена (Δ^2–процесс Эйткена)[7], а также метод Вегстейна[8].

В данной работе ускорение сходимости итерационных последовательностей осуществляется за счет такого преобразования отображения φ, которое усиливало бы его сжимающие свойства. Этого можно добиться, построив итераци-

[7]Островский А. М. Решение уравнений и систем уравнений. М. : Издательство иностранной литературы, 1963. 220 с.

[8]Wegstein J. H. Accelerating convergence of iterative processes // Communications of the ACM, 1958. Vol. 1. Iss. 6. pp. 9—13.

онные процессы типа Манна[9]. Также можно строить итерационные процессы Красносельского, Ишикавы и других.

Обобщение Δ^2–процесса Эйткена на решение нелинейных функциональных уравнений в абстрактных пространствах называют методом Эйткена–Стеффенсена (или просто методом Стеффенсена). Различные модификации метода Стеффенсена рассмотрены в статьях В.А. Курчатова, А.В. Прокопченко, Б.А. Бельтюкова, S. Amat, J. Dzunic, Q. Zheng и других.

Обобщенные итерационные методы и результаты их изучения могут быть естественным образом применены к решению и исследованию конечномерных уравнений вида (1) и (2), а также операторных уравнений вида (3) и (4).

В диссертационной работе предлагаются более эффективные по сравнению с классическим методом Ньютона и известными модификациями метода Стеффенсена[10] итерационные методы решения нелинейных уравнений вида (1)—(4). Применение разработанных алгоритмов и программ в значительной мере повышает эффективность решения задач о химически равновесном составе продуктов сгорания органического топлива и модельных примеров, таких как модель электростатического пленочного реле и модель взаимодействия иммунной системы и ВИЧ.

Цели и задачи. Целью данной диссертации является обобщение Δ^2–процесса Эйткена в форме итераций Манна на системы нелинейных уравнений, на операторные уравнения в банаховых пространствах и применение полученных обобщений для задач математического моделирования, а именно, к модели электростатического пленочного реле, к модели взаимодействия иммунной системы и ВИЧ и к задаче о химически равновесном составе продуктов горения органического топлива. К задачам диссертационной работы относятся исследование сходимости рассматриваемых обобщений, указание требований, при которых они выигрывают по эффективности у классического метода Ньютона; демонстрация эффективности применения рассматриваемых обобщений в сравнении с классическим методом Ньютона и другими известными методами на конкретных прикладных задачах; программная реализация предложенных обобщений.

Научная новизна. Выполнено обобщение Δ^2–процесса Эйткена в форме

[9] Mann W. R. Mean value methods in iteration // Proc. Amer. Math. Soc., 1953. 44 (1953). pp. 506—510.

[10] S. Amat, S. Busquier (Eds.). Advances in Iterative Methods for Nonlinear Equations. Springer International Publishing, 2016. 286 p.

итераций Манна на системы нелинейных уравнений и на операторные уравнения в банаховых пространствах; исследованы вопросы сходимости предложенных обобщений. Разработан расширяемый программный комплекс, реализующий построенные алгоритмы для решения задачи о неподвижной точке. Показано эффективное применение программного комплекса к конкретным прикладным задачам.

Теоретическая и практическая значимость работы. Теоретическая и практическая ценность работы состоит в том, что ее основные результаты вносят вклад в теорию итерационных методов решения нелинейных уравнений. Разработанные обобщения Δ^2–процесса Эйткена и метода Вегстейна предоставляют принципиальные возможности улучшить сходимость и расширить границы применимости классических методов решения систем нелинейных уравнений и нелинейных операторных уравнений.

Необходимость решения нелинейных систем уравнений возникает при исследовании многих реальных задач. Интерес к численным методам решения таких задач обусловлен тем, что ввиду сложной внутренней структуры последних найти решение в явном виде удается лишь в исключительных случаях. Круг задач, описываемых нелинейными операторными уравнениями в функциональных пространствах и допускающих аналитическое решение, еще уже. К такого рода уравнениям относятся интегральные уравнения, которые возникают, например, в задачах геофизики, рентгеноспектрального анализа и других.

Представленные в диссертации численные методы и реализующий их программный комплекс позволяют при помощи современной вычислительной техники значительно расширить спектр задач, поддающихся моделированию и допускающих приближенное решение. Для демонстрации практической применимости разработанных методов в диссертации приводятся результаты численных экспериментов на модельных примерах (модель электростатического пленочного реле, модель взаимодействия иммунной системы и ВИЧ) и реальных задачах (задача о химически равновесном составе продуктов горения органического топлива).

Методология и методы исследования. В основе исследования лежат понятия и методы теории итерационных процессов для решения нелинейных уравнений и систем уравнений. Так, следуя этой теории, строится обобщение Δ^2–процесса Эйткена и метода Вегстейна, выводятся условия сходимости, доказывается единственность получаемого решения, доказываются теоремы о порядке сходимости новых методов.

Обобщение методов на многомерный и бесконечномерный (функциональный) случаи потребовало для построения и исследования разрабатываемых численных методов использования также аппарата функционального анализа, особенно обобщения понятий разделенных разностей на случай абстрактных банаховых пространств[11].

Программная реализация численных методов выполнена с применением языков программирования интерпретируемого типа, что, в частности, позволило принимать в качестве входных аргументов не только числовые и строковые параметры, но и код функций (например, функций правой части решаемых уравнений), и, используя встроенные функции типа eval и feval, производить вычисления без изменения основной программы. Также при расчетах была использована длинная арифметика, что позволило выполнить численные эксперименты по оценке вычислительного порядка сходимости[12].

Степень достоверности результатов, апробация результатов. Достоверность полученных в диссертационной работе результатов подтверждается соответствующими математическими доказательствами и проведенными вычислительными экспериментами на тестовых примерах.

Основные результаты, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались ранее на следующих научных мероприятиях: семинарах кафедры вычислительной математики и компьютерных наук Института естественных наук и математики УрФУ, семинаре отдела некорректных задач анализа и приложений ИММ УрО РАН, всероссийской научной конференции с международным участием «Теория управления и математическое моделирование» (Россия, Ижевск, 2012 г.), международной научной конференции «Пятая конференция по численному анализу и приложениям» (Болгария, Лозенец, 2012 г.), международной (44–ой, 45–ой, 47–ой, 48–ой всероссийской) молодежной школе–конференции «Современные проблемы математики» (Россия, Екатеринбург, 2013 г., 2014 г., 2016 г., 2017 г.), международной конференции «8–ая конференция по прикладной математике и вычислениям в науке» (Хорватия, Шибеник, 2013 г.), международной конференции «Объединенный иммунологический форум — 2013» (Россия, Нижний Новгород, 2013 г.), международной научной конференции «Колмого-

[11]Ульм С. Ю. Об обобщенных разделенных разностях, I // Изв. АН ЭстССР, Сер. физ-матем. н., 1967. Т. 16, № 1. С. 13—26.

[12]Weerakoon S., Fernando T. G. I. A variant of Newton's method with accelerated third–order convergence // Applied Mathematics Letters, 2000. Volume 13(2000). pp. 87—93.

ровские чтения–VI. Общие проблемы управления и их приложения» (Россия, Тамбов, 2013 г.), XX всероссийской конференции, посвященной памяти К.И. Бабенко (Россия, Новороссийск, 2014 г.), всероссийской конференции с международным участием, посвященная памяти В.К. Иванова «Алгоритмический анализ неустойчивых задач» (Россия, Челябинск, 2014 г.), международной научной конференции «13–ая международная конференция по вычислительным методам в науке и технике» (Греция, Салоники, 2017 г.).

По результатам диссертации лично автором и в соавторстве опубликовано 19 работ: 6 работ в российских рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК [1–6]; 12 работ в других журналах и материалах всероссийских и международных конференций [8–19], получено 1 свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ в Роспатенте [7]. В совместных работах [1, 2, 17] научному руководителю принадлежат постановки задач и общее руководство проводимыми исследованиями, а диссертанту — разработка численных методов, доказательства теорем и компьютерное тестирование алгоритмов на примерах. В совместных работах [3, 5, 8, 14, 18] соавторами предложена модель, а диссертанту принадлежит разработка численных методов, доказательства теорем и численные эксперименты с моделями.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, объединяющих 21 параграф, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации 134 страницы, библиографический список включает 114 наименований. Диссертация содержит 9 рисунков и 17 таблиц. Нумерация параграфов сквозная. Нумерация утверждений, лемм, теорем в автореферате такая же, как в диссертации.

Основное содержание работы

Во ВВЕДЕНИИ обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор литературы по изучаемой проблеме, ставятся цели и задачи работы, изложена ее научная и практическая значимость.

В ПЕРВОЙ ГЛАВЕ конструируется Δ^2–процесс Эйткена и метод Вегстейна в форме итераций Манна применительно к решению нелинейных скалярных уравнений. Приводится необходимое условие сходимости рассматриваемых методов, а также утверждение об условиях глобальной сходимости и квадратичной сходимости Δ^2–процесса Эйткена в форме итераций Манна. Эти конструкции и утверждения (утверждение 2.1, лемма 2.1, теоремы 2.1 и 2.2) приводятся в тексте диссертации.

Разрабатывается адаптивный алгоритм решения скалярной задачи о неподвижной точке, в котором попадание в условия квадратичной сходимости проверяется и корректируется в процессе его выполнения. Проводится сравнение предложенных методов с методом Ньютона. Описывается возможность определения вычислительного порядка сходимости новых методов в ходе проведения вычислительных экспериментов.

Во ВТОРОЙ ГЛАВЕ рассматривается обобщение Δ^2–процесса Эйткена и метода Вегстейна в форме итераций Манна на n–мерный случай:

$$\begin{aligned} &\tilde{\mathbf{x}}^{(k+1)} = \Lambda^{(k)}\bar{\Lambda}^{(k)}\tilde{\mathbf{x}}^{(k)} + \bar{\Lambda}^{(k)}\mathbf{x}^{(k+1)}, \\ &\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{\Phi}\left(\tilde{\mathbf{x}}^{(k)}\right) \quad (k = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots), \end{aligned} \tag{5}$$

здесь

$\bar{\Lambda}^{(k)} = diag\left\{\dfrac{1}{1+\lambda_1^{(k)}},\, \ldots,\, \dfrac{1}{1+\lambda_n^{(k)}}\right\}$, $\Lambda^{(k)} = diag\left\{\lambda_1^{(k)},\, \ldots,\, \lambda_n^{(k)}\right\}$ — диагональные матрицы. Указываются способы выбора параметров:

1) при $i = 1,\, \ldots,\, n$ полагаем

$$\lambda_i^{(k)} = \left[\begin{array}{l} \beta^{(k)}, \text{если} \quad \operatorname{sgn}\left(\tilde{x}_i^{(k)} - x_i^{(k+1)}\right) = \operatorname{sgn}\left(\bar{x}_i^{(k+1)} - x_i^{(k+1)}\right), \\ -\beta^{(k)}, \text{если} \quad \operatorname{sgn}\left(\tilde{x}_i^{(k)} - x_i^{(k+1)}\right) = \operatorname{sgn}\left(x_i^{(k+1)} - \bar{x}_i^{(k+1)}\right), \end{array}\right. \tag{6}$$

где

$$\beta^{(k)} = \frac{\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \bar{\mathbf{x}}^{(k+1)}\|}{\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \tilde{\mathbf{x}}^{(k)}\|}, \tag{7}$$

компоненты вектора $\bar{\mathbf{x}}^{(k+1)} = \left(\bar{x}_i^{(k+1)}\right)$ находятся по формуле

$$\bar{x}_i^{(k+1)} = \varphi_i\left(x_1^{(k+1)},\, x_2^{(k+1)},\, \ldots,\, x_n^{(k+1)}\right); \tag{8}$$

2) вычисляем каждую компоненту вектора $\lambda^{(k)}$:

$$\lambda_i^{(k)} = \frac{x_i^{(k+1)} - \bar{x}_i^{(k+1)}}{x_i^{(k+1)} - \tilde{x}_i^{(k)}} \quad (i = 1,\, \ldots,\, n)$$

с $\bar{x}_i^{(k+1)}$, получаемыми по формуле (8);

3) вычисляем каждую компоненту вектора $\lambda^{(k)}$:

$$\lambda_i^{(k)} = \frac{x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}}{\tilde{x}_i^{(k-1)} - \tilde{x}_i^{(k)}} \quad (i = 1,\, \ldots,\, n).$$

Получены достаточные условия сходимости предложенных методов в форме итераций Манна в теоремах 6.1, 6.2 и 6.3, которые приведены в тексте диссертации.

Разрабатываются алгоритмы решения n–мерной задачи о неподвижной точке методом на базе метода Вегстейна и Δ^2–процесса Эйткена. Проводится сравнение рассматриваемых методов с классическим методом Ньютона и модифицированным методом Ньютона. Описывается возможность определения вычислительного порядка сходимости новых методов в ходе проведения вычислительных экспериментов.

В ТРЕТЬЕЙ ГЛАВЕ Δ^2–процесс Эйткена обобщается на нелинейные операторные уравнения с гладкими операторами в банаховых пространствах:

$$\begin{aligned} \tilde{x}^{(k+1)} &= \tilde{x}^{(k)} - \mu \left[F\left(\tilde{x}^{(k)}, \Phi\left(\tilde{x}^{(k)}\right)\right)\right]^{-1} \left(F\left(\tilde{x}^{(k)}\right) + F\left(x^{(k)}\right)\right), \\ x^{(k)} &= \tilde{x}^{(k)} - \left[F\left(\tilde{x}^{(k)}, \Phi\left(\tilde{x}^{(k)}\right)\right)\right]^{-1} F\left(\tilde{x}^{(k)}\right), \end{aligned} \tag{9}$$

где $F(x)$ — непрерывный, вообще говоря, нелинейный оператор, действующий в банаховом пространстве X, $F\left(x', x''\right) = \frac{1}{\lambda}\left(E - \Phi\left(x', x''\right)\right)$ — первая разделенная разность по С.Ю. Ульму[11], $\lambda \in (0,\, 1]$, $\mu \in (0,\, 1]$, $k = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots$, или при $\mu = 1$, $\lambda = 1$

$$\begin{aligned} \tilde{x}^{(k+1)} &= \left(E - \bar{\Lambda}^{(k)}\right) x^{(k)} + \bar{\Lambda}^{(k)} \Phi\left(x^{(k)}\right), \\ x^{(k)} &= \left(E - \bar{\Lambda}^{(k)}\right) \tilde{x}^{(k)} + \bar{\Lambda}^{(k)} \Phi\left(\tilde{x}^{(k)}\right), \end{aligned} \tag{10}$$

где $\bar{\Lambda}^{(k)} = \left[E - \Phi\left(\tilde{x}^{(k)}, \Phi\left(\tilde{x}^{(k)}\right)\right)\right]^{-1}$, $k = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots$.

Предполагается непрерывность оператора $\Phi(x)$ и существование обратного оператора разделенной разности $[F(x', x'')]^{-1}$ в интересующей нас области. Исследуется сходимость полученного метода. Формулируются и доказываются следующие теоремы.

Теорема 11.1. *Пусть*

1) $\left\|F(\widetilde{x}^{(0)})\right\| = \left\|\widetilde{x}^{(0)} - \Phi\left(\widetilde{x}^{(0)}\right)\right\| \leqslant \eta$;

2) существует открытая область $\Omega \subseteq X$, *и для каждого* x', x'', x''' *из* Ω *справедливы оценки*

А) $\left\|[F(x', x'')]^{-1}\right\| = \left\|[\frac{1}{\lambda}\left(E - \Phi(x', x'')\right)]^{-1}\right\| \leqslant B$,

Б) $\|\Phi(x', x'')\| \leqslant M$,

В) $\|\Phi(x', x'') - \Phi(x'', x''')\| \leqslant K \|x' - x'''\|$,

где B, M, K *— константы;*

3) $h = C_2 B^2 K M \dfrac{\mu}{\lambda} \eta < 1$, *где* C_2 *— положительная константа;*

4) замкнутый шар

$$\left\| x - \widetilde{x}^{(0)} \right\| \leqslant R, \tag{11}$$

где $R = \frac{C_1 S_0}{C_2 BKM}$, $S_k = \sum\limits_{n=k}^{\infty} h^{2^n}$, C_1 *— положительная константа, целиком содержится в* Ω.

Тогда все члены последовательности $\left(x^{(k)}\right)$, *определяемые методом* (9) *(или* (10)*), начинающимся с заданного* $\widetilde{x}^{(0)}$, *лежат в шаре* (11)*; последовательность* $\left(x^{(k)}\right)$ *имеет в шаре* (11) *предел* $\widetilde{x}^*$, *служащий решением уравнения* $F(x) = 0$ *(или* $x = \Phi(x)$*); справедлива оценка*

$$\left\| \widetilde{x}^* - \widetilde{x}^{(k)} \right\| \leqslant \frac{C_1}{C_2 BKM} S_k \quad (k = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots).$$

При $\mu = 1$, $\lambda = 1$ справедлива

Теорема 11.2. *Пусть*

1) уравнение $F(x) = 0$ *(или* $x = \Phi(x)$*) имеет решение в шаре*

$$\left\| x - \tilde{x}^{(0)} \right\| \leqslant \rho; \tag{12}$$

2) для каждого x', x'', x''' *из шара* $\left\| x - \tilde{x}^{(0)} \right\| \leqslant (1 + \alpha)\, \rho$ *справедливы оценки*

А) $\left\| [F(x', x'')]^{-1} \right\| = \left\| [E - \Phi(x', x'')]^{-1} \right\| \leqslant B$,

Б) $\|\Phi(x', x'')\| \leqslant M$,

В) $\|\Phi(x', x'') - \Phi(x'', x''')\| \leqslant K \|x' - x'''\|$,

где B, M, K *— константы,*

причем $\alpha = \max\{l^2 \rho^2,\, M\}$, *где* $l = \sqrt{CM(M+1)}BK$;

3) существует положительная константа $C > 1$ *такая, что* $l\rho < 1$.

Тогда решение $\tilde{x}^*$ *уравнения* $F(x) = 0$ *(или* $x = \Phi(x)$*) в шаре* (12) *единственно и последовательность* $\left(\tilde{x}^{(k)}\right)$, *определяемая методом* (9) *(или* (10)*) сходится к* x^*, *причем* $\left\| \tilde{x}^* - \tilde{x}^{(k)} \right\| \leqslant \dfrac{1}{l} (l\rho)^{3^k} \quad (k = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots)$.

Демонстрируются способы эффективного применения обобщенного Δ^2–процесса Эйткена к задаче приближенного решения нелинейных интегральных уравнений Гаммерштейна и к задаче о пересечении кривых, где применение методов типа Ньютона затруднительно.

В ЧЕТВЕРТОЙ ГЛАВЕ описываются применения разработанных методов к решению прикладных задач, а именно, к модели электростатического пленочного реле, к модели взаимодействия иммунной системы и ВИЧ и к задаче о равновесном составе продуктов горения органического топлива.

В § 15 рассматривается модель взаимодействия иммунной системы и ВИЧ[13] вида

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x};\mathbf{a});$$
$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x_0},$$

где $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ — вектор фазовых переменных, размерность $\mathbf{x}$ равна 5, $\mathbf{a}$ — вектор параметров.

Пусть t_n, $n = 1, \ldots, m$, $t_1 < t_2 < \cdots < t_m$ — моменты наблюдений за системой; $\mathbf{a}^* = \left(a_1^*, \ldots, a_p^*\right)$ — вектор параметров, подлежащих оценке, $1 \leqslant p \leqslant 18$; $\mathbf{x}(t;\, \mathbf{a})$ — решение системы при заданных параметрах $\mathbf{a}$, $\mathbf{x}_n(\mathbf{a}) = \mathbf{x}(t_n;\, \mathbf{a})$.

Обозначим через $\mathbf{y}_n$ результаты измерений в моменты времени t_n, и пусть точность измерений удовлетворяет неравенству $|y_{i,n} - x_{i,n}| \leqslant \xi_i$, $i = 1, \ldots, 5$, где ξ_i известно.

Требуется оценить параметры $\mathbf{a}^*$ на основе заданного начального приближения $\mathbf{a}^0 = \left(a_1^0, \ldots, a_p^0\right)$.

Рассмотрим функционал рассогласования

$$\Phi(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^{5} \sum_{n=1}^{m} \frac{1}{\xi_i} \left(x_{i,n}(\mathbf{a}) - y_{i,n}\right)^2. \tag{13}$$

Заменяем задачу минимизации функционала рассогласования (13) задачей решения системы нелинейных уравнений

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{a})}{\partial a_l} = 0, \tag{14}$$

где $\dfrac{\partial \Phi(\mathbf{a})}{\partial a_l} = 2 \sum\limits_{i=1}^{5} \sum\limits_{n=1}^{m} \dfrac{1}{\xi_i} \left(x_{i,n}(\mathbf{a}) - y_{i,n}\right) \dfrac{\partial x_{i,n}(\mathbf{a})}{\partial a_l}, \;\; l = 1, \ldots, p.$

[13]Kirschner D. E., Webb G. F. Resistance, Remission, and Qualitative Differences in HIV Chemotherapy // Emerging Infectious Diseases, 1997. Vol. 3, No. 3. pp. 273—283.

Уравнение (14) решается с помощью метода (9). Пользуясь априорной информацией, задаем начальное приближение a_0.

Проведены численные эксперименты, показано преимущество разработанных методов по сравнению со встроенными решателями MATLAB fzero и fsolve. Вычислительные эксперименты показали, что область сходимости метода (9) шире, чем у встроенных решателей MATLAB, для получения решения с заданной точностью методу (9) требуется меньше итераций и вычислений функции.

В § 16 рассматривается модель электростатического пленочного реле[14] в виде стационарной нелинейной краевой задачи:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \frac{q}{(1-y)^2} = 0, \qquad \frac{\partial y}{\partial x}(0) = y(1) = 0, \qquad 0 \leqslant x \leqslant 1, \tag{15}$$

Задача (15) решается двумя способами: 1) методом стрельбы с последующим применением метода (9), метода простых итераций, метода Ньютона, встроенных решателей MATLAB fsolve и fzero; 2) сведением к конечно–разностной задаче с дальнейшим применением метода нелинейной прогонки и метода (9).

Проведены численные эксперименты. Показано, что метод (9) сходится в случаях, когда fzero и fsolve расходятся. Для получения решения с заданной точностью методу (9) требуется в 10–18 раз меньше итераций, чем методу простых итераций, методу Ньютона. По количеству вычислений функции метод (9) выигрывает у перечисленных методов.

В § 17 рассматривается задача и химически равновесном составе продуктов горения органического топлива.

Уравнение реакции «топливо $\to$ продукты сгорания» можно записать в виде:

$$A^{(1)}_{b_{1T}} A^{(2)}_{b_{2T}} \dots A^{(n)}_{b_{nT}} \to \sum_{j=1}^{l} n_j^{(M)} M_j + \sum_{i=1}^{n} n_i^{(A)} A^{(i)},$$

где $A^{(i)}$ — i–й химический элемент, b_{iT} — количество атомов i–го химического элемента в условной молекуле топлива, M_j — молекулярный, а $A^{(i)}$ — атомарный компонент продуктов этой реакции, $n_j^{(M)}$ и $n_i^{(A)}$ — число молей j–го молекулярного и i–го атомарного компонента продуктов этой реакции, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, l$.

Задача о химически равновесном составе органического топлива может быть сведена к системе нелинейных уравнений[2] (16)—(18) относительно неизвестных $P_j^{(M)}$ $(j = 1, \dots, l)$, $P_i^{(A)}$ $(i = 1, \dots, n)$ и M_T.

[14] Лукьянова Р. Г., Фадеев С. И., Шведова К. В. Расчет статических параметров механической модели пленочного электростатического реле // Вычислительные системы, 1970. Вып. 40. С. 3—35.

Уравнения диссоциации в логарифмической форме имеют вид:

$$\ln P_j^{(M)} - \sum_{i=1}^{n} a_{ij} \ln P_i^{(A)} + \ln K_j = 0, \quad j = 1,\, 2,\, \ldots,\, l, \tag{16}$$

где величины K_j — константы равновесия по парциальным давлениям для реакции диссоциации j–го компонента на атомы (вычисляются по энтропиям и энтальпиям продуктов, участвующих в реакциях и зависят от температуры продуктов реакции); $P_j^{(M)}$, $P_i^{(A)}$ — парциальные давления молекулярных и атомарных компонентов продуктов сгорания соответственно.

Уравнение сохранения i–го вещества в логарифмической форме имеет вид:

$$\ln\left(\sum_{j=1}^{l} a_{ij} P_j^{(M)} + P_i^{(A)}\right) = \ln M_T + \ln b_{iT}, \quad i = 1,\, \ldots,\, n. \tag{17}$$

Правая часть уравнения выражает количество атомов i–го элемента в топливе, левая — количество атомов этого элемента в продуктах диссоциации.

Для замыкания системы уравнений расчета химически равновесного состава при P, $T = const$ используется закон Дальтона в логарифмической форме

$$\ln\left(\sum_{j=1}^{l} P_j^{(M)} + \sum_{i=1}^{n} P_i^{(A)}\right) - \ln P = 0. \tag{18}$$

Для решения системы уравнений (16)—(18) будем использовать подход, описанный в книге В.В. Васина и А.Л. Агеева[15]. Пусть известно, что решение системы уравнений (16)—(18) принадлежит выпуклому замкнутому множеству

$$Q = \left\{x \in \mathbb{R}^q : g_j(x) \leqslant 0, j = 1,\, \ldots,\, m\right\}, \tag{19}$$

где g_j — выпуклые дифференцируемые функции. В рассматриваемой задаче о химически равновесном составе продуктов сгорания органического топлива $q = n + l + 1$.

Введем в рассмотрение отображение вида

$$H(x) = x - \theta \frac{d(x)e(x)}{\|e(x)\|^2}, \qquad 0 < \theta < 1, \tag{20}$$

здесь по определению $H(x) = x$, если $d(x) \leqslant 0$; $d : \mathbb{R}^q \to \mathbb{R}^1$ — выпуклая полунепрерывная снизу функция; $e : \mathbb{R}^q \to \mathbb{R}^q$ — ограниченное отображение.

[15]Васин В.В., Агеев А.Л. Некорректные задачи с априорной информацией. Екатеринбург: Наука, 1993. 264 с.

Зададим d, e формулами

$$d(x) = \sum_{j=1}^{m} \left[g_j^+(x) \right]^{\mu}, \quad e(x) = \sum_{j=1}^{m} \left[g_j^+(x) \right]^{\mu-1} \bigtriangledown g_j(x),$$

где параметр $\mu \geqslant 1$; $g_j^+(x) = \max\{0,\ g_j(x)\}$; $\bigtriangledown g_j(x)$ — градиент функции g_j.

Таким образом, система уравнений (16)—(18) играет роль базовой системы, а множество Q — априорной информации. Учет априорных ограничений чрезвычайно важен для некорректных задач, поскольку это позволяет локализовать искомое решение и тем самым повысить устойчивость задачи и выделить «физичное» решение. Таким образом, речь идет о совместном решении системы уравнений (16)—(18) и системы (19).

Рассмотрим итерационный процесс в виде суперпозиции базовой схемы (9) (обозначим ее $U(x^{(k)})$, $x^{(0)} \in \mathbb{R}^q$) для аппроксимации решения системы уравнений (16)—(18) и отображений H вида (20):

$$x^{(k+1)} = \gamma_{k+1} H\left(U(x^{(k)})\right) + (1 - \gamma_{k+1})\, v_0, \quad x^{(0)} \in \mathbb{R}^n,\ k = 0,\ 1,\ \ldots, \tag{21}$$

v_0 — некоторый фиксированный элемент из $\mathbb{R}^q$ и $\{\gamma_k\}$ — числовая последовательность с $0 < \gamma_k < 1$. Рекомендации по выбору параметров итерационного процесса (21) и соответствующие теоремы сходимости приведены в книге В.В. Васина и А.Л. Агеева[15].

Показано превосходство разработанных методов по количеству итераций в сравнении с подходом, предложенным в статье О.В. Мищенковой, О.А. Воеводиной,[16] на конкретных условных формулах топлив.

В ПЯТОЙ ГЛАВЕ описан разработанный расширяемый комплекс проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительных экспериментов: используемые технологии, состав программного комплекса и его функциональные возможности, примеры работы программного комплекса.

Разработанные методы численного решения конечномерных задач о неподвижной точке и уравнений вида $F(x) = 0$, описанные в главах 1, 2 и 3 и использованные для решения конкретных прикладных задач в главе 4, реализованы на языке программирования MATLAB (полностью совместимый для решения поставленных задач с языком программирования GNU Octave) и включены в расширяемый комплекс программ «Решение конечномерных задач о неподвижной

[16] Мищенкова О. В., Воеводина О. А. Применение LU– и QR–методов при решении задачи о равновесном составе продуктов химической реакции // Вестник Ижевского государственного технического университета имени М. Т. Калашникова, 2014. №3. С. 172—176.

точке на основе адаптивных алгоритмов». Комплекс прошел процедуру государственной регистрации программы для ЭВМ, получено соответствующее свидетельство [7].

Программный комплекс разрабатывался с использованием встроенного в систему GNU Octave редактора/отладчика, результаты работы программного комплекса могут быть визуализированы с помощью специализированного проприетарного программного пакета MATLAB или с помощью пакета GNU Octave, свободно распространяющегося под лицензией GNU GPL.

Программная реализация численных методов выполнена с применением языков программирования интерпретируемого типа, что, в частности, позволило принимать в качестве входных аргументов не только числовые и строковые параметры, но и код функций (например, функций правой части решаемых уравнений), и, используя встроенные функции типа eval и feval, производить вычисления без изменения исходного кода основной программы и ее перекомпиляции.

Для получения результатов с произвольной точностью используется Multiple Precision Toolbox, что позволяет работать с числами, мантисса которых существенно больше, чем это предусмотрено типом данных *double*.

Комплекс разработан в виде m–файлов, что позволяет использовать его в рамках других программ, тем самым существенно расширяя область его применимости. Для работы с программным комплексом предусмотрен как оконный, так и консольный интерфейс.

В ЗАКЛЮЧЕНИИ приводятся основные результаты проделанной работы, указываются возможные направления дальнейших исследований.

Основные результаты работы

1. Разработаны, обоснованы и протестированы вычислительные методы в виде обобщений Δ^2–процесса Эйткена для нелинейных скалярных уравнений, систем нелинейных уравнений и нелинейных операторных уравнений. Получены достаточные условия глобальной сходимости и квадратичной сходимости предложенных методов в одномерном случае, получены достаточные условия сходимости в n–мерном случае. Для предложенного метода решения операторных уравнений получены достаточные условия сходимости нового метода, доказана единственность решения, доказана теорема о порядке

сходимости нового метода. Метод приложен к системам нелинейных уравнений и к решению нелинейного операторного уравнения типа Гаммерштейна.

2. Развиты приближенные методы исследования математических моделей: модели электростатического пленочного реле, модели взаимодействия иммунной системы и ВИЧ.

3. Развиты приближенные методы исследования математической модели сгорания органического топлива. Предложен регуляризирующий алгоритм, учитывающий априорную информацию, для решения реальной прикладной задачи о равновесном составе продуктов горения органического топлива.

4. Разработанные вычислительные методы на базе Δ^2–процесса Эйткена реализованы в виде комплекса проблемно–ориентированных программ для проведения вычислительных экспериментов.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК

1. Вержбицкий В. М., Юманова И. Ф. Об одном аналоге метода Вегстейна ускорения сходимости итерационных процессов // Интеллектуальные системы в производстве, 2010. №1(15). С. 18—28. (1 п.л./ 0.5 п.л.)

2. Вержбицкий В. М., Юманова И. Ф. О квадратичной сходимости Δ^2-процесса Эйткена // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2011. Т. 51. №10. С. 1770—1774. (0.5 п.л./ 0.25 п.л.)

3. Солодушкин С.И., Юманова И.Ф. Анализ модели ВИЧ: идентификация параметров и численные эксперименты // Вестник Тамбовского университета. Серия: естественные и технические науки, 2013. Т. 18. № 5-2. С. 2683—2684. (0.2 п.л./ 0.1 п.л.)

4. Юманова И. Ф. Об одном методе идентификации параметров в системах обыкновенных дифференциальных уравнений на примере модели взаимодействия иммунной системы и ВИЧ // Российский иммунологический журнал, 2013. Т. 7(16). №2—3. С. 181.

5. Юманова И. Ф., Воеводина О. А. Определение химически равновесного состава продуктов сгорания органического топлива // Вестник Ижевского государственного технического университета имени М.Т. Калашникова, 2013. №2(58). С. 154—156. (0.3 п.л./ 0.15 п.л.)

6. Юманова И.Ф. Об одном аналоге метода Стеффенсена для решения нелинейных операторных уравнений // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки, 2016. Т. 26. Вып. 4. С. 579—590.

Патенты и свидетельства о регистрации программ:

7. Юманова И.Ф. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013616374 «Решение конечномерных задач о неподвижной точке на основе адаптивных алгоритмов». Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). Зарегистрировано 04 июля 2013 г.

Другие публикации

8. Солодушкин С.И., Ким А.В., Юманова И. Ф. Идентификация параметров в модели ВИЧ на параллельном вычислителе // Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики: тезисы XX всероссийской конференции, посвященной памяти К.И. Бабенко, 2014. С. 94—95. (0.2 п.л./ 0.06 п.л.)

9. Юманова И. Ф. Новые модификации метода простых итераций // Материалы XII студенческой научной конференции кафедры ПМИ ИжГТУ, 2010. С. 28.

10. Юманова И. Ф. Об итерационном процессе Манна — Вегстейна // Материалы XIII студенческой научной конференции кафедры ПМИ ИжГТУ, 2011. С. 36—37.

11. Юманова И. Ф. Модификации метода Вегстейна как итерации Манна — Ишикавы // Материалы XIV студенческой научной конференции кафедры ПМИ ИжГТУ, 2012. С. 31—32.

12. Юманова И. Ф. Модифицированный метод Вегстейна с модулями // Теория управления и математическое моделирование : труды конференции, 2012. С. 99—100.

13. Юманова И. Ф. О применении метода Вегстейна к нелинейным системам // Современные проблемы математики. Тезисы международной (44-ой всероссийской) молодежной школы-конференции, 2013. С. 166—169.

14. Юманова И. Ф., Воеводина О. А. Определение состава химически реагирующего топлива // Математическое моделирование в образовании, науке и производстве: тезисы в VIII международной конференции, 2013. С. 177—178.

15. Юманова И. Ф. О применении метода Вегстейна к идентификации параметров в системах обыкновенных дифференциальных уравнений // Современные проблемы математики. Тезисы международной (45-ой всероссийской) молодежной школы-конференции, 2014. С. 284—286.

16. Юманова И.Ф. Ускорение сходимости итерационных методов идентификации параметров на примере модели ВИЧ // Тезисы докладов Всероссийской конференции с международным участием, посвященная памяти В.К. Иванова «Алгоритмический анализ неустойчивых задач», 2014. С. 172—173.

17. Verzhbitskii V. M., Yumanova I. F. One specification of Mann—Ishikawa iterations // NNA'12: Fifth Conference on Numerical Analysis and Applications. Abstracts (June 15—20, 2012, Lozenets), 2012. P. 54. (0.1 п.л./ 0.05 п.л.)

18. Iumanova I.F., Solodushkin S.I. Adaptive Wegstein method for a coefficient inverse problem for one model of HIV infection // CEUR Workshop Proceedings, 2016. V. 1662. P. 261—267. (0.2 п.л./ 0.1 п.л.)

19. Yumanova Irina F. The solving of finite-dimensional fixed point problem with adaptive algorithms based on Mann—Ishikawa iterations // Theses of the 8th Conference on Applied Mathematics and Scientific Computing, 2013. P. 54—55.