

3. Jorge J. More, Burton S. Garbow, Kenneth E. Hillstom Testing unconstrained optimization software // ACM Transactions on mathematical Software. – Vol 7. – No. 1. – March, 1981. – P.17-41.
4. Luksan L., Vlcek J. Test problems for unconstrained optimization // Institute of computer science, Academy of sciences of the Czech Republic. – 2003.

In this paper a new way to the creation of the method for solving system of nonlinear equations is being researched, which is based on steepest descent and the Newton methods. We have proved theorem where the convergence of the proposed method is justified and the rate of convergence is established. Numeral experiments have been conducted on the test problems and they have been compared of the basic methods. The conclusions on the possibilities application of method have been made.

Key words: *the methods of steepest descent, the Newton methods, system of nonlinear equations.*

Отримано: 02.06.2008

УДК 519

І. В. Бейко¹, П. М. Зінько²

¹*Українсько-Угорський інститут кібернетики
та інформаційних технологій, м. Київ*

²*Київський національний університет імені Тараса Шевченка*

МЕТОДИ ВИСОКИХ ПОРЯДКІВ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ КОШІ ТА БАГАТОМІРНИХ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ ЗА ДОПОМОГОЮ АСИМПТОТИЧНО-РОЗВ'ЯЗУЮЧИХ ОПЕРАТОРІВ

Побудовані чисельні методи підвищеної точності для розв'язування багатовимірних крайових задач і задач Коші з використанням асимптотично-розв'язуючих операторів.

Ключові слова: *асимптотично-розв'язуючі оператори, крайові задачі, задачі Коші.*

Вступ. Для побудови оптимальних робочих моделей в роботах [1, 5, 7] використовуються розв'язуючі оператори, які узагальнюють псевдообернені оператори та функції Гріна. Їх асимптотичні апроксимації (асимптотично-розв'язуючі оператори) використовуються для побудови математичних моделей складних керованих багатозв'язних систем у класі граф-операторних моделей, де k -та підсистема (k -й вузол граф-операторної моделі), представлена алгебраїчними, диференційними, інтегро-диференційними рівняннями чи їх сукупністю, представляється в канонічному вигляді $A_{ks}(x_{ks}, z_{ks}, p_{ks}) = \theta_{W_{A_{ks}}}$, A_{ks} :

$X_{ks} \times Z_{ks} \times P_{ks} \rightarrow W_{Aks}$, X_{ks} – множина фазових станів x_{ks} s -ої підсистеми k -го вузла граф-операторної моделі, $z_{ks} \in Z_{ks}$ – величини, які характеризують зв'язок s -ої підсистеми з її навколишнім середовищем (зі всією системою), P_{ks} – множина значень параметрів p_{ks} s -ої підсистеми. Якщо у позначеннях

$$A_s(x, p) \equiv (A_{1s}(x_{1s}, z_{1s}, p_{1s}), \dots, A_{Nks}(x_{Nks}, z_{Nks}, p_{Nks}), z_{ks} = Z_{ks}(x, p),$$

$$A(x, p) \equiv (A_1(x, p), \dots, A_{Nks}(x, p)) = \theta_{WA}, x \equiv (x_1, \dots, x_{Nks}),$$

$$x_s \equiv (x_{1s}, \dots, x_{Nks}), p \equiv (p_1, \dots, p_{Nks}), p_s \equiv (p_{1s}, \dots, p_{Nks})$$

граф-операторна модель $A(x, p) = \theta_{WA}$ містить повну інформацію про залежності між величинами $v \in C(x, p)$ та $w \in B(x, p)$, то ця залежність представляється розв'язуючим оператором [5, 6]. Для побудови математичної моделі залежності між v і w будується невід'ємна функція $\mu: 2^{W_B} \rightarrow \mathbb{R}^+$, інваріантна відносно паралельного переносу, тобто $\forall \bar{w} \in W_B, \forall K \in 2^{W_B}, \mu(K) = \mu(\{\bar{w} + z \mid z \in K\})$ (2^{W_B} – множина всіх підмножин множини W_B). З цією метою за допомогою функції $\mathfrak{R}: (P \times W_A \times W_C) \rightarrow W_B$ з областю визначення $D(\mathfrak{R})$, яка містить множину

$$\Omega(M, A, C) \triangleq \{(p, z, v) \mid z = A(x, p), v = C(x, p), (x, p) \in M\},$$

будуємо оцінку

$$d_1(\mathfrak{R}, p, M) = \mu(\{w \mid w = B(x, p) - \mathfrak{R}(p, A(x, p), C(x, p)), (x, p) \in M\}).$$

Постановка задачі.

Означення 1 [5]. Функція $\mathfrak{R}^\delta$, яка задовольняє нерівність

$$\max_{p \in P(M)} d_1(\mathfrak{R}^\delta, p, M) \leq \delta,$$

$$P(M) = \{p \mid \exists x \in X, (x, p) \in M\},$$

називається *розв'язуючим оператором з дефектом δ на множині M* .

Означення 2. Інформацію $((A, C), M)$ називають ε -повною для функції B , якщо існує така ε -апроксимація $\mathfrak{R}$, для якої виконується нерівність $d_1(\mathfrak{R}, p, M) \leq \varepsilon$.

Величина $\Psi(A, C, M, p) \equiv \inf_{\mathfrak{R}} d_1(\mathfrak{R}, p, M)$ є кількісною мірою корисності інформації (A, M) у відшуванні залежності $(C(x, p), p) \rightarrow B(x, p)$. А наявність наближеного розв'язку $(\bar{x}, \bar{p})$ системи $A(x, p) = \theta_W$ може бути використана для побудови алгоритмів прогнозування підвищеної точності з використанням асимптотично-розв'язуючих операторів $\mathfrak{R}_s$ та $\mathfrak{R}_{sq}$, які в околі $(\bar{x}, \bar{p})$ визначаються асимптотичними рівняннями [3, 6, 7, 13]

$$\begin{aligned} \dim(\{B(x, p) - \mathfrak{R}_s(\bar{x}, A(x, p), C(x, p)), (x, p) \in M\}) &= O(\|x - \bar{x}^k\|^s), \\ \dim(\{B(x, p) - \mathfrak{R}_{sq}(p, \bar{p}, \bar{x}, A(x, p), C(x, p)), (x, p) \in M\}) &= \\ &= O(\|x - \bar{x}^k\|^s) + O(\|p - \bar{p}\|^q). \end{aligned}$$

Основні результати. В роботі [4] побудовано асимптотично розв'язуючі оператори для складних математичних моделей $A(x, u) = \theta_{W_A}$ з операторами, які описуються багатовимірними неявними алгебро-диференціальними та алгебро-інтегро-диференціальними рівняннями. Зокрема, справедлива наступна теорема.

Теорема 1 [13]. Якщо параметром p є час t і для математичної моделі вигляду

$$A(x, p) \equiv A(\dot{x}, x, t) = 0$$

частинні похідні A'_x і A'_x задовольняють умові Ліпшиця по змінних $\dot{x}$ та x і виконуються рівності

$$\begin{aligned} x(\tau) &= \bar{x}(\tau) + O((t - \tau)^s), \\ (d/d\tau)(A'_x(\dot{x}, \bar{x}, \tau)l - A'_x(\dot{x}, \bar{x}, \tau)l) &= O((t - \tau)^q), \\ 0 \leq q \leq s, \quad A'_x(\dot{x}, \bar{x}, t+h)^T l &= \Phi, \end{aligned}$$

то

$$\begin{aligned} \Phi x(t+h) &= \Phi \bar{x}(t+h) + A'_x(\dot{x}, \bar{x}, t)^T l(t)(x(t) - \bar{x}(t)) + \\ &+ \int_t^{t+h} l(\tau) A(\dot{x}(\tau), \bar{x}(\tau), \tau) d\tau + O(h^{s+q}). \end{aligned}$$

Означення 3. Оператор F є асимптотично-розв'язуючим на інтервалі $\tau \in [t, t+H]$ для функції $v(x(t+H))$ відносно неперервної по τ функції $Z(Q(\tau))$ на розв'язку x задачі Коші

$$dx(\tau)/d\tau = f(x(\tau), \tau), \quad x(t) = x^0,$$

якщо для неперервних функцій p із околу x виконується асимптотичне рівняння

$$F(t, p, H, Z, Q) = v(x(t+H)) + (O(\|Z(Q)\|) + O(\|p - x\|))H\|p - x\|.$$

Означення 4. Оператор $G(\tau)$ є асимптотично-розв'язуючим оператором s -го порядку за параметром h в околі t для функції $v(x(t+h))$, якщо виконується асимптотичне рівняння

$$G(h) = v(x(t+h)) + O(h^s).$$

Теорема 2. Якщо

$$v(x(t+H)) \triangleq Q(t+H)x(t+H), \quad Z(Q(\tau)) \triangleq dQ(\tau)/d\tau + Q(\tau)A(\tau)$$

на інтервалі $\tau \in [t, t+H]$ функції

$$Q(\tau), A(\tau) \triangleq f'_x(p(\tau), \tau) \text{ і } Z(Q(\tau))$$

є неперервними, а матриця $f'_x(p(\tau), \tau)$ є ліпшицевою по $p(\tau)$, то оператор F , який є асимптотично-розв'язуючим для функції $v(x(t+H))$ відносно $Z(Q)$ на розв'язках $x(t+H)$ визначається на неперервних функціях p із околу x рівнянням

$$F(t, p, H, Z, Q) = Q(t+H)p(t+H) + \int_t^{t+H} Q(\tau)(f(p(\tau), \tau) - dp(\tau)/d\tau) d\tau.$$

Теорема 3. Якщо в умовах теореми 1 функції $Q(\tau)$, $A(\tau) = f'_x(p(\tau), \tau)$, $p(\tau)$ та $x(\tau)$ задовольняють на інтервалі $\tau \in [t, t+h]$ асимптотичним рівнянням

$$dQ(\tau)/d\tau = -Q(\tau)A(\tau) + O(h^k), \quad p(\tau) = x(\tau) + O(h^l), \quad p(t) = x(t),$$

то асимптотично-розв'язуючий оператор $G(h)$ s -го порядку, $s = k + l + 1$, визначається при $l \leq k$ рівнянням

$$G(h) = Q(t+h)p(t+h) + \int_t^{t+H} Q(\tau)(f(p(\tau), \tau) - dp(\tau)/d\tau) d\tau.$$

За допомогою цих асимптотично-розв'язуючих операторів будуються наближені розв'язки високих порядків для задачі Коші

$$\dot{x}(t) = f(x(t), t), \quad x(t_0) = x^0 \in R^{n_1}, \quad n_1 \geq 1, \quad t \geq t_0,$$

які використовують інтерполяційні поліноми Лагранжа.

Якщо $n \geq 1$ – степінь інтерполяційного поліному Лагранжа, $h \geq 0$ – крок інтегрування і відомі розв'язки $x(t+ih)$, $i = \overline{0, n}$, а p_{n+1} – інтерполяційний поліном Лагранжа, який проходить через точки $x(t+ih)$, $i = \overline{0, n}$, то відомо, що $p_{n+1}(\tau)$ апроксимує розв'язок задачі Коші на проміжку $[t, t+(n+1)h]$ з похибкою $O(h^{n+1})$. Тому для обчислення наближеного розв'язку $x(t+(n+1)h)$ з похибкою $O(h^{n+3})$ можемо скористатися формулою

$$\begin{aligned} x(t+(n+1)h) &= p_{n+1}(t+(n+1)h) + \int_t^{t+(n+1)h} [E - (\tau - t - (n+1)h) \times \\ &\times f'_x(p_{n+1}(t+(n+1)h), t+(n+1)h)] [f(p_{n+1}(\tau), \tau) - \dot{p}_{n+1}(\tau)] d\tau, \end{aligned}$$

де f'_x – матриця частинних похідних вектор-функції f по x . Якщо для обчислення інтегралу скористатися формулою Ньютона-Котеса

$$\int_a^b g(\tau) d\tau \cong (b-a) \sum_{i=0}^r c_{i,r} g(t_i), \text{ де } r+1 - \text{кількість вузлів інтегрування,}$$

$$c_{i,r}, \quad i = \overline{0, r} - \text{константи, які задаються таблицею, } t_i = a + i(b-a)/r,$$

$$i = \overline{0, r}, \text{ то похибка обчислень при непарних } r \text{ дорівнює } O(h^{r+2}), \text{ а}$$

$$\text{при парних } r - O(h^{r+3}).$$

Якщо скористатися інтерполяційним поліномом Лагранжа 2-го степеня, то з використанням прогнозного розв'язку

$$p_3(t+3h) = x(t) - 3x(t+h) + 3x(t+2h)$$

отримуємо формулу з похибкою $O(h^5)$,

$$x(t+3h) = x(t) + 3h\{f(x(t), t) + 3f(x(t+h), t+h) + 3f(x(t+2h), t+2h) +$$

$$+ f(p_3(t+3h), t+3h) + 3f'_x(p_3(t+3h), t+3h)[h(f(x(t), t) +$$

$$+ 2f(x(t+h), t+h) + f(x(t+2h), t+2h)) + 2x(t) - 2x(t+2h)]\}/8.$$

Числові методи четвертого і п'ятого порядків точності будуються з використанням ряду Тейлора за формулами

$$x(t+mh) = \int_t^{t+mh} [E - (\tau - t - mh)f'_x(p(t+mh), t+mh)] \times$$

$$\times [f(p(\tau), \tau) - \dot{p}(\tau)] d\tau + p(t+mh),$$

де m – деяке натуральне число. Якщо $p(\tau)$ – вектор-функція, яка апроксимує розв'язок задачі Коші з похибкою $O(h^5)$, то одержуємо формулу з похибкою $O(h^5)$

$$x(t+h) = x(t) + \frac{h}{12} \{6f(x(t), t) + 6f(p(t+h), t+h) -$$

$$- h[\dot{f}(p(t+h), t+h) - x''(t) + f'_x(p(t+h), t+h) \times$$

$$\times [2f(x(t), t) - f(p(t+h), t+h) + 2hx''(t)]]\}.$$

Для обчислення f можна використати формулу

$$f(x(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h) = f(p(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h) +$$

$$+ f'_x(p(t_{k-1}+h), t_{k-1}+h)[x(t_{k-1}+h) - p(t_{k-1}+h)].$$

Для наближеного обчислення розв'язку задачі Коші з похибкою $O(h^6)$, отримуємо формулу

$$x(t+2h) = p(t+2h) + \frac{h}{12} \{-23f(x(t), t) + 16f(p(t+h), t+h) +$$

$$+ 7f(p(t+2h), t+2h) + h[-9x''(t) - 20x''(t+h) - \dot{f}(p(t+2h), t+2h)] + \\ + hf'_x(p(t+2h), t+2h)[-18f(x(t), t) + 16f(p(t+h), t+h) + \\ + f(p(t+2h), t+2h) - h(8x''(t) + 12x''(t+h))].$$

Аналогічно будуються методи високого порядку для розв'язання крайових задач. Розглянемо крайову задачу для рівняння

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) + \phi(x, t)$$

з початковими $u(x, 0) = \mu(x)$, $0 \leq x \leq 1$ і крайовими умовами

$$u(0, t) = \eta_1(t), \quad u(1, t) = \eta_2(t), \quad 0 \leq t \leq T.$$

Якщо на рівномірній сітці

$$\omega_\Delta = \{x_i = i \cdot \Delta, i = 0, 1 \dots N, \Delta = 1/N\}$$

скористатися апроксимацією

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \cdot \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) = \frac{1}{\Delta^2} \left[\left(k(x) - \frac{k(x+\Delta) - k(x-\Delta)}{4} \right) u(x-\Delta, t) - \right. \\ \left. - 2k(x)u(x, t) + \left(k(x) + \frac{k(x+\Delta) - k(x-\Delta)}{4} \right) u(x+\Delta, t) \right] + O(\Delta^2),$$

$$u(x_i, t) = u_i(t), \quad k(x_i) = k_i, \quad \overline{\psi_i}(t) = \phi(x_i, t), \quad i = \overline{0, N},$$

то за формулою

$$u(t+h) = p(t+h) + \int_t^{t+h} \left[E + (t+h-\tau) \frac{\partial f(p(t+h), t+h)}{\partial u} \right] \times \\ \times [f(p(\tau), \tau) - \dot{p}(\tau)] d\tau$$

отримаємо

$$u_i(t+h) = u_{i-2}\alpha_{i-1}\alpha_i/2 + u_{i-1}\alpha_i[1 - \bar{k}_{i-1} - \bar{k}_i] + \\ + u_i[1 - 2\bar{k}_i + 2\bar{k}_i^2 + \alpha_i\beta_{i-1}/2 + \alpha_{i+1}\beta_i/2] + \\ + u_{i+1}\beta_i[1 - \bar{k}_i - \bar{k}_{i+1}] + u_{i+2}\beta_i\beta_{i+1}/2 + \\ + h[\alpha_i\psi_{i-1} - 2\bar{k}_i\psi_i + \beta_i\psi_{i+1}]/2 + \int_t^{t+h} \psi_i(\tau) d\tau, \quad i = \overline{2, N-2}; \\ \alpha_i = h(k_i - V_i)/\Delta^2; \quad \beta_i = h(k_i + V_i)/\Delta^2; \quad \bar{k}_i = hk_i/\Delta^2; \\ u_i = u_i(t); \quad \psi_i = \psi_i(t).$$

Аналогічно будуються неявні різницеві схеми високих порядків для крайових задач параболічного типу у двовимірному і трьохвимірному випадках.

Висновки. Побудовані асимптотично-розв'язуючі оператори високого порядку точності апроксимації лінійних функціоналів в околі розв'язку задачі Коші з ліпшицевими похідними від правої частини по фазовим змінним дозволили побудувати числові алгоритми для розв'язування задач Коші з високим порядком точності. При цьому з використанням інтерполяційних поліномів Лагранжа та формул Ньютона-Котеса досягається висока точність розв'язків, а саме: при використанні інтерполяційного поліному Лагранжа 2-го степеня будується поправка до наближеного розв'язку, яка підвищує точність розв'язку до 5-го порядку (відносно кроку чисельного інтегрування); числові методи четвертого і п'ятого порядків точності побудовано також із використанням рядів Тейлора. Аналогічно побудовано методи високого порядку для розв'язання крайових задач параболічного типу у двовимірному і трьохвимірному випадках.

Список використаних джерел:

1. Бейко И. В. Экстремальные модели сложных систем и метод декомпозиции в вычислительном эксперименте // Весн. Киев. ун-та. Моделирование и оптимизация сложных систем. – 1982. – Вып. 1. – С.72-81
2. Самарский А. А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1983. – 616 с.
3. Бейко И. В., Бублик Б. Н., Зинько П. Н. Методы и алгоритмы решения задач оптимизации. – К.: Вища школа, 1983. – 512 с.
4. Бейко И. В., Бейко М. Ф. К численному построению оптимальных управлений // Моделирование нестационарных процессов. – К.: ИМ АН УССР, 1977. – С.173-190.
5. Бейко И. В. Функции для оценивания полезности информации в конструктивной теории оптимальных агрегированных моделей // Кибернетика и системный анализ. – 1996. – №3. – С.43-54.
6. Бейко І. В. Розвиток методів розв'язуючих та асимптотично-розв'язуючих операторів для побудови оптимальних та асимптотично-оптимальних математичних моделей // Вісник Київського університету. Серія: Кібернетика. – 2002. – Вип. 3. – С.10-15.
7. Бейко И. В. Применение развязывающих операторов для решения задачи Коши и построения экстремальных алгоритмов развязывающей декомпозиции // Вычислительная и прикладная математика. Респ. междувед. науч. сб. – 1981. – Вып. 45. – С.110-118.
8. Зінько П. М. Числові алгоритми побудови наближених розв'язків крайових задач за неявними схемами. Одновимірна задача // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2000. – Вип. 3. – С.233-238.
9. Зінько П. М. Побудова явних різницевих схем для неоднорідного рівняння теплопровідності зі змінними коефіцієнтами // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2005. – Вип. 1. – С.177-181.
10. Зінько П. М. Неявна різницева схема для розв'язування неоднорідного рівняння теплопровідності зі змінними коефіцієнтами // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2006. – Вип. 2. – С.186-191.
11. Бейко І. В., Бодачівська Л. Ю., Зінько П. М. Системний аналіз процесів підвищення техніко-експлуатаційних характеристик свердловин // Вісник

- Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2007. – Вип. 2. – С.101-104.
12. Бейко И. В. Численный анализ граф-операторных уравнений методом разрешающих операторов и s -экстремальных моделей // II Республиканская конференция “Вычислительная математика в современном научно-техническом прогрессе”. – Киев: КГУ, 1978. – С.124-125.
13. Бейко І. В. Уніфікована методологія розв’язуючих операторів як новітня інформаційна технологія для відшукування нових знань і прийняття оптимальних рішень (англійською мовою) // Proc. “The Information Technology Contribution to the Building of a Safe Regional Environment”, AFCEA, Europe Seminar, Kiev, 28-30 May 1998. – С.44-50.

Numerical high-order methods for solution of multi-dimensional boundary and Cauchy problem are developed by implementation of asymptotic solve-operators.

Key words: *asymptotic solve-operators, boundary/Cauchy problems.*

Отримано: 05.06.2008

УДК 519.711

І. В. Бейко, В. І. Ночвай

*Українсько-Угорський інститут кібернетики
та інформаційних технологій, м. Київ*

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ЕМІСІЙНИХ ПРОЦЕСІВ У ПОВІТРЯНОМУ БАСЕЙНІ МІСТА

Побудовано математичні моделі та алгоритми багатокритеріальної оптимізації емісійних параметрів екозабруднення повітряного басейну міста.

Ключові слова: *математичне моделювання, багатокритеріальна оптимізація, забруднення атмосфери, процеси переносу і дифузії.*

Вступ. Задача побудови адекватних математичних моделей процесів розповсюдження забруднюючих речовин (ЗР) в повітряному басейні міста залишається актуальною для оперативного управління параметрами емісії на основі розрахунків оптимальних сценаріїв розповсюдження викидів за наявних метеоумов. Відомі методи комбінації прямого і оберненого моделювання з використанням техніки зворотньої траєкторії в лагранжевих моделях (Persson et al., 1987 [1]); Pragm et al., 1980 [2]; Seibert, 2001 [3]) та спряжених рівнянь в ейлерівських моделях (Марчук Г. І. [4,5], Пененко В. В. [6]), знаходять широке практичне застосування, зокрема і для оцінювання параметрів джерел викидів ЗР в атмосферу (Бакланов, 1986 [7]; Pudykiewicz,