

О РЕШЕНИИ БОЛЬШИХ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ

Н. Н. Седов

Воронежский филиал Российского государственного открытого технического университета путей сообщения

Для ускорения решения нелинейной системы алгебраических уравнений большой размерности в разреженном якобиане посредством перенумерации неизвестных выделяется плотно заполненный фрагмент, что позволяет заменить ньютоновские итерации более экономичными. Побочный эффект такой замены компенсируется эффективным пересчетом решений линейных систем, основанным на формуле Шермана—Моррисона. Обсуждается быстрое действие предлагаемого метода

ВВЕДЕНИЕ

Рассматривается методика учета разреженности произвольной системы нелинейных алгебраических уравнений большой размерности, позволяющая в ряде случаев существенно сэкономить объем вычислений.

Специальной перенумерацией неизвестных левые верхний или нижний фрагменты якобиана приводятся к разреженному виду так, что (при последующем их усечении) в приближенном решении итерационной подзадачи метода Ньютона достигается ускорение решения линейной системы алгебраических уравнений в несколько раз.

При таком отходе от чисто ньютоновских итераций, обладающих квадратичной скоростью сходимости, в оценке сходимости процесса появляется линейный член, пропорциональный величине нормы усеченного разреженного фрагмента якобиана. Подавление его влияния достигается корректировкой решения внутренней линейной подзадачи посредством ранговой модификации по формуле Шермана—Моррисона, основанной на экономичном пересчете обратной матрицы.

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ,
АПРИОРНАЯ ОЦЕНКА
ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДИКИ**

Пусть в некоторой области G n -мерного линейного нормированного пространства (n велико) задана система нелинейных уравнений

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{F} : G \subset R^n \rightarrow R^n \quad (1)$$

с разреженным якобианом $J = \mathbf{F}'(\mathbf{x})$. Сравнительные характеристики неизвестных можно

определить степенью заполнения строк и столбцов якобиана. Пусть r_j и c_j — количества ненулевых элементов в строках и столбцах J . Значение r_j характеризует «потребительское» свойство j -й переменной — сколько переменных входят в ее уравнение, а c_j задает степень ее востребованности — в скольких уравнениях она задействована.

На основе этих показателей ниже рассматриваются способы упорядочения переменных, позволяющие выделить в якобиане плотно заполненный и разреженный фрагменты, которые будучи дополненными нулями до квадратных матриц P и R соответственно, определяют представление J в виде суммы главного слагаемого, удобного в обращении, и разреженного остатка

$$J(\mathbf{x}) = P(\mathbf{x}) + R(\mathbf{x}) \quad (2)$$

так, что $p_{ij}r_{ij} = 0 \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, n$. При этом в норме Фробениуса

$$\|A\|_F^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2$$

выполняется условие «ортогональности» слагаемых:

$$\|J\|_F^2 = \|P\|_F^2 + \|R\|_F^2. \quad (3)$$

При малой норме R линейную систему уравнений

$$J(\mathbf{x}_k)\mathbf{h} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$$

относительно уточняющей добавки \mathbf{h} на k -й итерации метода Ньютона для системы (1) можно заменить системой

$$P(\mathbf{x}_k)\mathbf{h} = -\mu_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_k),$$

где компенсирующий параметр μ_k определяется из условия

$$\mu_k = \arg \min_{\mu} \|\mu J(\mathbf{x}_k) - P(\mathbf{x}_k)\|_F^2.$$

С учетом (2, 3) имеем

$$\begin{aligned} \|\mu J - P\|^2 &= \|(\mu - 1)P + \mu R\|^2 = \\ &= (\mu - 1)^2 \|P\|^2 + \mu^2 \|R\|^2 \rightarrow \min_{\mu}, \end{aligned}$$

отсюда

$$\mu_{\min} = \frac{\|P\|^2}{\|P\|^2 + \|R\|^2}, \quad \|\mu_{\min} J - P\|^2 = \frac{\|P\|^2 \|R\|^2}{\|P\|^2 + \|R\|^2}.$$

Таким образом,

$$\mu_k = \frac{\|P(\mathbf{x}_k)\|^2}{\|J(\mathbf{x}_k)\|^2}, \quad (4)$$

причем

$$\|\mu_k J(\mathbf{x}_k) - P(\mathbf{x}_k)\| = \frac{\|P(\mathbf{x}_k)\| \|R(\mathbf{x}_k)\|}{\|J(\mathbf{x}_k)\|}. \quad (5)$$

Сходимость итерационного процесса

$$P(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = -\mu_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \quad (6)$$

для системы (1) исследуется традиционным образом при стандартных предположениях [4]. Обозначим корень (1) через \mathbf{x}_* , а его окрестность через

$$D_a = \{\mathbf{x} : \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_*\| < a\} \subseteq G.$$

Пусть при некоторых $a, a_1, a_2 > 0$ выполняются условия

- а) $\|P^{-1}(\mathbf{x})\| \leq a_1 \quad \forall \mathbf{x} \in D_a$
- б) $\|R(\mathbf{x})\| \leq \frac{1}{2a_1} \quad \forall \mathbf{x} \in D_a$
- в) $\|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{F}(\mathbf{y}) - J(\mathbf{y})(\mathbf{x} - \mathbf{y})\|_F \leq a_2 \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D_a;$

обозначим $b = \min \left\{ a, \frac{1}{2a_1 a_2} \right\}$.

Теорема. При условиях (а-в) и $\mathbf{x}_0 \in D_b$ итерационный процесс (6) с параметром (4) сходится к корню \mathbf{x}_* системы (1) с оценкой погрешности

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_{k+1}\| &\leq \\ &\leq a_1 a_2 \mu_k \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\|^2 + a_1 \sqrt{\mu_k} \|R(\mathbf{x}_k)\|_F \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\|. \end{aligned} \quad (7)$$

Доказательство. Пусть $\mathbf{x}_0 \in D_b$. Индукцией по k докажем, что все $\mathbf{x}_k \in D_b$. В предположении справедливости $\mathbf{x}_k \in D_b$ для некоторого k , получим $\mathbf{x}_k \in D_a$, так как $b \leq a$. Подставив в (в) $\mathbf{x} = \mathbf{x}_*$ и $\mathbf{y} = \mathbf{x}_k$, получим

$$\|\mathbf{0} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - J(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)\|_F \leq a_2 \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\|^2. \quad (8)$$

Преобразуем (6) к виду

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_*) &= -\mu_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - P(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k) = \\ &= -\mu_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mu_k J(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k) + \\ &\quad + [\mu_k J(\mathbf{x}_k) - P(\mathbf{x}_k)](\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k). \end{aligned}$$

Умножим обе части полученного равенства на матрицу, обратную к $P(\mathbf{x}_k)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k &= P^{-1}(\mathbf{x}_k) \left\{ \mu_k [-\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - J(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)] + \right. \\ &\quad \left. + [\mu_k J(\mathbf{x}_k) - P(\mathbf{x}_k)](\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k) \right\}. \end{aligned}$$

Используя (а), (8) и согласованность нормы Фробениуса с евклидовой нормой вектора, приступим к оценке

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| &\leq \|P^{-1}(\mathbf{x}_k)\|_F \left\{ \mu_k \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + J(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)\|_F + \right. \\ &\quad \left. + \|\mu_k J(\mathbf{x}_k) - P(\mathbf{x}_k)\|_F \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\| \right\} \leq \\ &\leq a_1 \left(\mu_k a_2 \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\|^2 + \|\mu_k J(\mathbf{x}_k) - P(\mathbf{x}_k)\|_F \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\| \right), \end{aligned}$$

откуда, с учетом (4, 5), следует (7) и кроме того — попадание \mathbf{x}_{k+1} в D_b , поскольку в силу $\mu_k < 1$ и условия (б) имеем:

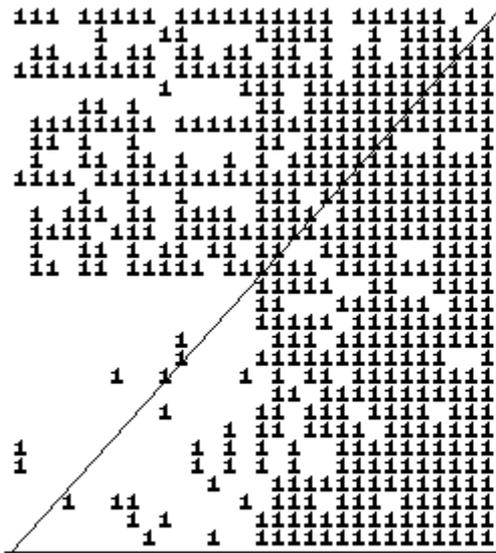
$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| &\leq a_1 a_2 \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\|^2 + a_1 \|R(\mathbf{x}_k)\|_F \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\| \leq \\ &\leq a_1 a_2 b^2 + a_1 \frac{1}{2a_1} b \leq \left(a_1 a_2 b + \frac{1}{2} \right) b \leq b, \end{aligned}$$

что завершает доказательство.

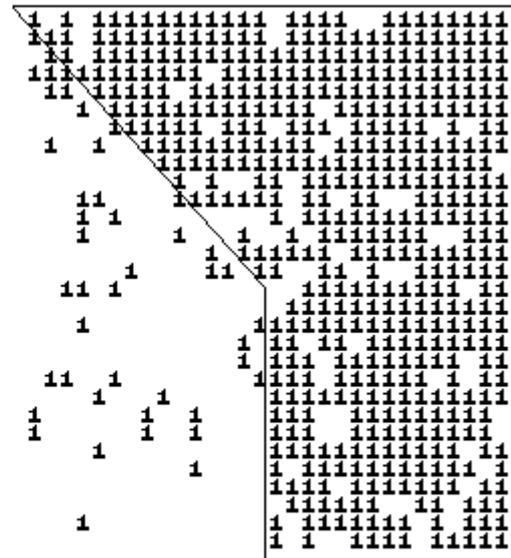
С убыванием нормы разреженного фрагмента R линейный член в оценке (7) стремится к нулю, скорость сходимости приближается к квадратичной, поэтому общий объем вычислений будет определяться эффективностью обращения P (решения линейной системы (6)).

Рассмотрим способы нумерации неизвестных в системе (1), формирующие в якобиане J плотный фрагмент, удобный для обращения. Пусть во время генерации уравнений (1) фиксируются элементы якобиана, не являющиеся тождественными нулями, и подсчитываются их количества по строкам r_i и столбцам c_j . Упорядочение неизвестных по возрастанию c_j , в частности, может сформировать в J правую верхнюю треугольную область для обратного хода Гауссова исключения снизу вверх, но этот случай маловероятен. Поэтому остановимся на более типичных ситуациях, представленных на рис. 1б и рис. 2а (фрагменты, соответствующие P , обведены в рамки).

При общей тенденции смещения вправо плотно заполненных столбцов, они иллюстрируют стратегии смещения плотно заполненных строк вниз (попытка (а)), или вверх (попытка (б)), что достигается упорядочением неизвестных по возрастанию критериев $c_i r_i$ или c_i / r_i соответственно. Отметим, что применение в качестве критерия упорядочения, произведения числа ненулевых элементов столбца на число

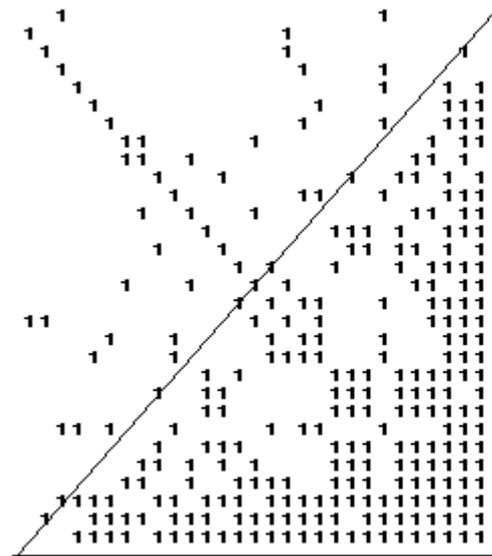


(a) $\rho = 0.41$

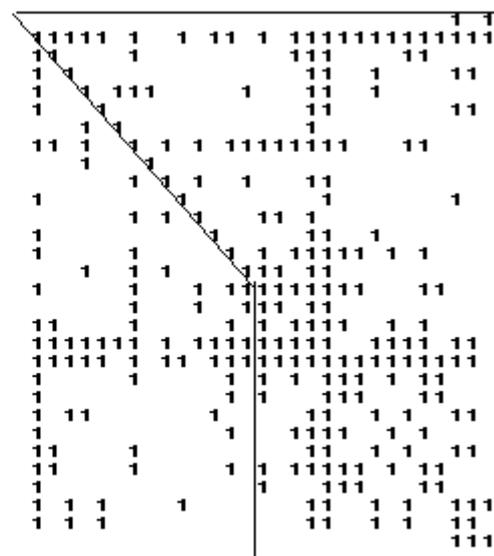


(б) $\rho = 0.09$

Рис. 1. Портреты матрицы с трапециевидным R -фрагментом упорядочения: а — неудачное, б — удачное



(a) $\rho = 0.05$



(б) $\rho = 0.22$

Рис. 2. Портреты матрицы с треугольным R -фрагментом упорядочения: а — удачное, б — неудачное

ненулевых элементов строки является одним из первых в технологии разреженных матриц [2,3], предложенных Марковицем еще в 1957 г. На рис. 1а и рис. 2б представлены результаты неудачных выборов критерия упорядочения для тех же примеров. Матрицы на рис. 2 являются портретами якобиана правой части уравнений химической кинетики

$$dn_i/dt = f_i(\mathbf{n}), \quad i = 1, 2, \dots, 30,$$

моделирующих плазмохимический пиролиз метана [4].

В дальнейшем под плотностью ρ фрагмента матрицы будем подразумевать долю ненулевых элементов, заключенных в нем. Автоматизация распознавания случаев (а) или (б) основана на вычислении ρ для R -фрагментов исходной матрицы, претендующих на разреженность по каждому из критериев. Для критерия $c_i r_i$, соответствующего случаю (а), R -фрагментом будет левая верхняя треугольная область J ; для критерия c_i/r_i , соответствующего случаю (б), R -фрагментом будет левый трапециевидный клин. Выбор эффективного упорядочения определяется меньшим значением ρ .

Экономичное использование случая (б) при организации итерации (б) заключается в решении линейной системы половинной размерности для определения неизвестных, входящих во вторую половину упорядоченного списка, с последующим переходом на обратный ход Гауссова исключения снизу вверх.

Экономичное использование случая (а) базируется на использовании LU -разложения стреловидной матрицы $A = LU$:

$$\begin{pmatrix} a & & & & a \\ & a & & & a \\ & & a & & a \\ & & & a & a \\ & & & & a \\ a & a & a & a & a \\ a & a & a & a & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & & & & \\ & a & & & \\ & & a & & \\ & & & a & l \\ & & & a & a & l \\ a & a & a & l & l & l \end{pmatrix} = . \tag{9}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & & & & u \\ & 1 & & & u \\ & & 1 & & u \\ & & & 1 & u \\ & & & & 1 \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} .$$

$A \qquad L \qquad U$

Поскольку выигрыш от замены метода Ньютона итерационным процессом (б) может сни-

зиться увеличением числа итераций (а также возможными затратами на r -ранговую модификацию по формуле Шермана—Моррисона), нет смысла в детальном подсчете вычислительной сложности каждой итерации (б). Поэтому при прогнозировании эффективности предлагаемой методики ограничимся нестрогими соображениями, принимая во внимание, что вычислительная сложность решения линейной системы прямым методом пропорциональна n^3 .

В случае (б) основное время тратится на решение линейной системы нижнего блока половинной размерности с вычислительной сложностью $(n/2)^3$.

В случае (а) разумно предположить, что если «узким местом» прямого метода, с вычислительной сложностью порядка n^3 , является вычисление $N \cong \frac{n^2}{2} + \frac{n^2}{2}$ коэффициентов матриц L и U , то сокращение числа ненулевых коэффициентов LU -разложения, подлежащих определению, до величины $N = \gamma n^2 = (n\sqrt{\gamma})^2$ приведет к вычислительной сложности, порядка $(n\sqrt{\gamma})^3$, то есть отношение затрат можно оценить величиной $\gamma^{\frac{3}{2}}$.

В разложении (9) $N \cong \frac{n^2}{8} + \frac{n^2}{4}$; $\gamma^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{3}{8}\right)^{\frac{3}{2}}$, а сравнение процессорного времени работы алгоритма стандартного гауссова исключения с излагаемым ниже алгоритмом LU -разложения (9) при разных размерностях подтверждает четырехкратное ускорение счета на системах с матрицей вида (9).

ДЕТАЛИ РЕАЛИЗАЦИИ LU -РАЗЛОЖЕНИЯ И РАНГОВОЙ МОДИФИКАЦИИ

В результате непосредственного перемножения матриц правой части (9) проверяется совпадение левых фрагментов матриц A и L ; определяются формулы для вычисления верхнего фрагмента матрицы U :

$$a_{ii}u_{ij} = a_{ij}, \quad i < m = \left[\frac{n}{2}\right] + 1, \quad j \geq m.$$

Приведем результат вывода расчетных формул для правых нижних фрагментов L и U , в порядке попарного чередования «столбец L — строка U »:

$$\begin{aligned}
 l_{m+1,m+1} &= a_{m+1,m+1} - \sum_{k=m-1}^m l_{m+1,k} u_{k,m+1}, \\
 l_{m+2,m+1} &= a_{m+2,m+1} - \sum_{k=m-1}^m l_{m+2,k} u_{k,m+1} \quad u_{m+1,m+2} = \left(a_{m+1,m+2} - \sum_{k=m-1}^m l_{m+1,k} u_{k,m+2} \right) / l_{m+1,m+1}, \\
 &\dots \dots \dots \\
 l_{n,m+1} &= a_{n,m+1} - \sum_{k=m-1}^m l_{n,k} u_{k,m+1} \quad u_{m+1,n} = \left(a_{m+1,n} - \sum_{k=m-1}^m l_{m+1,k} u_{kn} \right) / l_{m+1,m+1}, \\
 l_{m+2,m+2} &= a_{m+2,m+2} - \sum_{k=m-2}^{m+1} l_{m+2,k} u_{k,m+2}, \\
 l_{m+3,m+2} &= a_{m+3,m+2} - \sum_{k=m-2}^{m+1} l_{m+3,k} u_{k,m+2} \quad u_{m+2,m+3} = \left(a_{m+2,m+3} - \sum_{k=m-2}^{m+1} l_{m+2,k} u_{k,m+3} \right) / l_{m+2,m+2}, \quad (10) \\
 &\dots \dots \dots \\
 l_{n,m+2} &= a_{n,m+2} - \sum_{k=m-2}^{m+1} l_{n,k} u_{k,m+2}, \quad u_{m+2,n} = \left(a_{m+2,n} - \sum_{k=m-2}^{m+1} l_{m+2,k} u_{kn} \right) / l_{m+2,m+2}, \\
 l_{n-1,n-1} &= a_{n-1,n-1} - \sum_{2m-n+1}^{n-2} l_{n-1,k} u_{k,n-1}, \\
 l_{n,m+2} &= a_{n,m+2} - \sum_{2m-n+1}^{n-2} l_{n,k} u_{k,n-1}, \quad u_{n-1,n} = \left(a_{n-1,n} - \sum_{2m-n+1}^{n-2} l_{n-1,k} u_{kn} \right) / l_{n-1,n-1}, \\
 &\dots \dots \dots \\
 l_{nm} &= a_{nm} - \sum_{2m-n}^{n-1} l_{nk} u_{kn}.
 \end{aligned}$$

При четном N элементы побочной диагонали A полагаются нулевыми.

Уравнения прямого хода гауссова исключения

$$Ly = \mathbf{b}$$

для линейной системы со стреловидной матрицей принимают вид

$$\begin{aligned}
 l_{ii} y_i &= b_i, \quad i = 1, \dots, m, \\
 \sum_{k=2m-i}^i l_{ik} y_k &= b_i, \quad i = m+1, \dots, n,
 \end{aligned}$$

отсюда

$$y_i = \begin{cases} b_i / l_{ii}, & i \leq m, \\ \left(b_i - \sum_{k=2m-i}^{i-1} l_{ik} y_k \right) / l_{ii}, & i > m. \end{cases} \quad (11)$$

Уравнения обратного хода гауссова исключения

$$Ux = \mathbf{y}$$

принимают вид

$$\begin{aligned}
 x_i + \sum_{k=i+1}^n u_{ik} x_k &= y_i, \quad i = n-1, n-2, \dots, m, \\
 x_i + \sum_{k=2m-i}^n u_{ik} x_k &= y_i, \quad i = m-1, \dots, 1,
 \end{aligned}$$

отсюда

$$x_i = \begin{cases} y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik} x_k, & i \geq m \\ y_i - \sum_{k=2m-i}^n u_{ik} x_k, & i < m. \end{cases} \quad (12)$$

Сходимость (6) может тормозиться из-за пренебрежения достаточно большими по модулю членами, входящими в разреженную часть якобиана $J(x_k)$. Их влияние учитывается применением известных формул Шермана—Моррисона [5–7]:

$$(A + \mathbf{u} \mathbf{v}^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1} \mathbf{u} \mathbf{v}^T A^{-1}}{1 + \mathbf{v}^T A^{-1} \mathbf{u}},$$

$$(A + UV^T)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(I + V^T A^{-1}U)^{-1}V^T A^{-1}.$$

пересчета обратной матрицы для

$$A = P(\mathbf{x}_k)$$

(с учетом одного, или нескольких элементов, соответственно). Фактически же используется экономичный пересчет решения системы линейных уравнений

$$P\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (13)$$

в решение системы

$$\tilde{P} \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{b}.$$

В случае замены в P только одного нуля элементом якобиана J_{ij} из разреженной части (одноранговая модификация) пересчет проводится по формуле

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \frac{x_i}{1 + y_i} \mathbf{y}, \quad (14)$$

где \mathbf{y} — решение (13) с вектором \mathbf{b} , у которого только i -я координата, равная J_{ij} , отлична от нуля.

В случае учета r элементов из разреженной части якобиана (r -ранговая модификация: $r < n$) пересчет проводится по формуле

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - Y\mathbf{z}, \quad (15)$$

где Y — решение матричного уравнения

$$PY = U,$$

вектор \mathbf{z} — решение линейной системы r -го порядка

$$(I + V^T Y)\mathbf{z} = V^T \mathbf{x}$$

(U, V, Y — соответствующие матрицы размерности $n \times r$).

В качестве претендента на одноранговую модификацию можно выбрать элемент $J_{ij}(\mathbf{x})$, соответствующий наибольшему фрагменту левых частей системы (1), информация о котором теряется при переходе к (6) (здесь и ниже \mathbf{x} равен начальному приближению). Например, при полиномиальных левых частях (1), как это бывает в неявных разностных схемах уравнений химической кинетики, индексы i и j претендента можно определить из условия

$$\max_{i+j < n} |F_i(x_1, \dots, x_{j-1}, 0, x_{j+1}, \dots, x_n) - F_i(\mathbf{x})|,$$

что однако, требует дополнительного n -кратного вычисления правых частей (1).

Менее затратным является близкий к указанному критерий

$$\max_{i+j < n} |J_{ij}(\mathbf{x})x_j| \quad (16)$$

Элементы для r -ранговой модификации выявляются аналогичным образом.

ОРГАНИЗАЦИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Проблема глобальной сходимости метода Ньютона [8, 9] остается и для итерационного процесса (6), поэтому для сохранения экономичности вычислений и локальной скорости сходимости на текущей итерации после решения уравнения

$$P(\mathbf{x}_k)\mathbf{h} = -\mu_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \quad (17)$$

с учетом возможных ранговых модификаций и вычисления нового приближения к решению

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t\mathbf{h}$$

(вначале $t=1$) проверяется условие убывания нормы невязки (1) и в случае его нарушения иницируется одна из стратегий глобальной сходимости [8], например, линейный одномерный поиск по шагу t . С учетом изложенного, схема применения методики учета разреженности для многократного, как например, при реализации неявных разностных схем, решения больших систем (1) может быть оформлена следующим образом (первые два пункта выполняются только раз, третий является стартовым для каждого решения (1)).

1. Выбор из двух упорядочений неизвестных (по возрастанию критериев $c_i r_i$ и c_i / r_i) варианта, соответствующего меньшей плотности разреженного фрагмента.

2. Составление списка ненулевых элементов, входящих в выбранную на предыдущем этапе структуру R -фрагмента.

3. Упорядочение списка по условию (16) с последующим выбором из него одного или нескольких претендентов на ранговую модификацию. Далее следуют итерации.

4. В зависимости от выбора первого пункта — расчет (17) либо как решение системы половинной размерности с последующим обратным ходом Гауссова исключения снизу вверх, либо с использованием LU -разложения стреловидной матрицы (10—12).

5. Ранговая модификация решения (17) по формулам (14) или (15).

6. При необходимости переключение на стратегию глобальной сходимости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Апробация алгоритма проводилась на системах алгебраических уравнений, возникающих при интегрировании жестких кинетических уравнений пиролиза метана [4] неявным методом трапеций с фиксированной температурой и постоянных (для «чистоты эксперимента») шагах интегрирования, отличающихся лишь в пограничном слое и в квазистационарной области. При незначительном увеличении общего числа итераций было достигнуто удвоение скорости счета по сравнению с использованием только ньютоновских итераций.

Для выявления степени распространенности систем уравнений со стреловидным портре-

том якобиана были рассмотрены детальные механизмы реакций из различных литературных источников [10, 11]. Результаты упорядочения их структур подтверждают перспективность предлагаемой методики по крайней мере для одного (но достаточно широкого) класса уравнений химической кинетики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бахвалов Н. С. Численные методы. М.: Наука, 1975.
2. Тьюарсон Р. Разреженные матрицы. М.: Мир, 1977.
3. Писсанецки С. Технология разреженных матриц. М.: Мир, 1988.
4. Словецкий Д. И., Манкелевич Ю. А., Словецкий С. Д., Рахимова Т. В. Математическое моделирование плазмохимического пиролиза метана // Химия высоких энергий. 2002, Т. 36, № 1, С. 50—58.
5. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. М.: Мир, 1998.
6. Воеводин В. В., Воеводин Вл. В. Энциклопедия линейной алгебры. Электронная система ЛИНЕАЛ. С.-Петербург: СПБ БХВ, 2006.
7. Икрамов Х. Д., Матин фар М. Пересчет нормальных псевдорешений при одноранговых модификациях матрицы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003, Т. 43, № 4, С. 493—505.
8. Дэннис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений.: Мир, 1988.
9. Лебедев К. А. Об одном способе нахождения начального приближения для метода Ньютона // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1996, Т. 36, № 3, С. 6—13.
10. Полак Л. С., Гольденберг М. Я., Левицкий А. А. Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука, 1984.
11. Гидаспов В. Ю., Иванов И. Э., Крюков И. А., Стрельцов В. Ю. Исследование нестационарных неравновесных процессов в акустическом резонаторе Гартмана // Математическое моделирование 2003, Т. 15, № 6, С. 41—47.