ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Научная статья

УДК 519.62
DOI: 10.18101/2304-5728-2020-3-12-18

О САМОРЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИХ СВОЙСТВАХ КОЛЛОКАЦИОННО-ВАРИАЦИОННОГО МЕТОДА ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

© Соловарова Любовь Степановна
кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник,
Институт динамики систем и теории управления
имени В. М. Матросова СО РАН
Россия, 664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 134, а/я 292
soleilu@mail.ru

Аннотация. В настоящей статье рассмотрены линейные взаимосвязанные системы алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений, достаточно часто встречающиеся в важных прикладных задачах энергетики, кинетической химии, биологии и других областей. В литературе их принято называть дифференциально-алгебраическими уравнениями. Отмечены трудности, возникающие при реализации методов их численного решения, и характерные свойства рассматриваемых задач, в частности некорректность. Детально описано построение одного частного случая коллокационно-вариационного подхода, весьма хорошо зарекомендовавшего себя для решения различных классов дифференциально-алгебраических уравнений. Данный подход основан на решении специфической задачи математического программирования. На тестовом примере показано, что данная разностная схема может порождать регуляризирующий алгоритм (обладать так называемым свойством саморегуляризации) с параметром регуляризации — шагом сетки.
Ключевые слова: дифференциально-алгебраические уравнения; разностные схемы; численные методы; саморегуляризация; некорректные задачи; регуляризирующий алгоритм; погрешность; квазиоптимальный шаг; обыкновенные дифференциальные уравнения; интегральные уравнения.

Для цитирования
Соловарова Л. С. О саморегуляризирующих свойствах коллокационно-вариационного метода для дифференциально-алгебраических уравнений // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. 2020. № 3. С. 12–18.

Введение

Многие математические модели из области химии, биологии, энергетики представляют собой взаимосвязанные системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) и конечномерных уравнений, которые можно записать в виде системы ОДУ с тождественно вырожденной матрицей перед производной. Такие постановки задач принято называть дифференциально-алгебраическими уравнениями (ДАУ). Свойства ДАУ в значительной мере отличаются от свойств ОДУ, разрешенных относительно производной. Данный факт во многом объясняет сложность численного решения ДАУ. В частности, принципиально нельзя применять явные разностные схемы (в силу вырожденности матрицы перед производной), а неявные схемы могут быть неустойчивыми. Другими направлениями теории численного решения ДАУ являются «расширенные системы» [7] и подходы, основанные на различных полуобратных матрицах и проекторах [2; 9]). К их принципиальным недостаткам можно отнести тот факт, что они применимы для узкого класса задач и сложны в реализации.

Кроме того, все вышеобозначенные методы не учитывают следующую характеристику ДАУ. Рассматриваемые задачи относятся к классу некорректных задач. По Адамару, задача считается корректно поставленной, если ее решение существует, оно единственно и непрерывно зависит от входных данных. Некорректной она называется в том случае, когда не выполняется хотя бы одно из вышеперечисленных условий. Статья [8] посвящена одношаговой разностной схеме первого порядка, которая учитывает погрешности входных данных (обладает регулязирующим свойством). В этой же работе приведен обзор методов регуляризации для ДАУ.

Перспективным подходом для численного решения ДАУ являются коллокационно-вариационные алгоритмы. В исследованиях [3–5] показаны их эффективность, простота в реализации и применимость для широкого класса задач. В настоящей работе проведено исследование саморегуляризирующих свойств данных численных методов.

1 Постановка задачи

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений

$$A(t)x'(t)+B(t)x(t)=f(t),\ t\in[0,1], \tag{1}$$

$$x(0)=x_0, \tag{2}$$

где $A(t)$ и $B(t)$ — $(n\times n)$-матрицы, $f(t)$ и $x(t)$ — заданная и искомая n-мерные вектор-функции, причем $\det A(t)\equiv 0$. Как уже отмечалось, такие задачи принято называть дифференциально-алгебраическими уравнениями. Предполагается, что для ДАУ (1) начальное условие (2) согласовано с правой частью.

Как было отмечено во введении, ДАУ относятся к классу некорректных задач. Проиллюстрируем этот факт простым примером.

Пример 1.

$$\begin{pmatrix}1 & t\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u'(t)\\ v'(t)\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & \alpha\\ 1 & t\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u(t)\\ v(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}q(t)\\ g(t)\end{pmatrix},\ t\in[0,1],$$

где α — скалярный параметр, $\alpha\neq 1$, имеет единственное, не зависящее от начального условия решение

$$u(t)=g(t)-tv(t),\ v(t)=(g'(t)-q(t))/(1-\alpha).$$

При $\alpha = 1$ однородная задача с нулевым начальным условием имеет множество решений $u(t) = -tv(t)$, где $v(t)$ — произвольная гладкая функция с условием $v(0) = 0$.

Далее рассмотрим возмущенную задачу

$$\begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{u}'(t) \\ \tilde{v}'(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ 1 & t \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{u}(t) \\ \tilde{v}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q(t) \\ g(t) + \varepsilon \sin \dfrac{t}{\varepsilon^2} \end{pmatrix},$$

Если $\alpha \neq 1$, $0 < \varepsilon << 1$, то будем иметь

$$\tilde{u}(t) - u(t) = -t(\tilde{v}(t) - v(t)) + \varepsilon \sin \frac{t}{\varepsilon^2},\ \tilde{v}(t) - v(t)) = \frac{1}{\varepsilon} \cos \frac{t}{\varepsilon^2}.$$

При $\tilde{u}(0) = u(0)$, $\tilde{v}(0) = v(0)$ данный пример не имеет классического решения.

Некорректные задачи требуют создания так называемых регулязирующих алгоритмов.

Определение 1 (см., напр. [6]). Пусть дано операторное уравнение $Az = u$, где A — линейный оператор, действующий из нормированного пространства Z в нормированное пространство U. Тогда регуляризирующим алгоритмом (регуляризирующим оператором) называется оператор $R(\delta, u_\delta) \equiv R_\delta(u_\delta)$, обладающий двумя следующими свойствами:

1. $R_\delta(u_\delta)$ определен для любых $\delta > 0$ $u_\delta \in U$, и отображает $(0,+\infty) \times U$ в Z.
2. Для любого $z \in Z$ и для любого $u_\delta \in U$, такого, что $Az = u$, $|u - u_\delta| \leq \delta$, $\delta > 0$, $z_\delta = R_\delta(u_\delta)_{\delta \to 0} \to z$.

В статье [1] впервые показано, что методы решения некоторых классов интегральных уравнений Вольтерра первого рода (ИУВI), основанные на простейших квадратурных формулах, порождают регуляризирующий алгоритм с параметром регуляризации — шагом сетки, определенным образом связанным с уровнем возмущения правой части в метрике $C_{[0,1]}$. В таком случае принято говорить, что алгоритм обладает свойством саморегуляризации, а шаг интегрирования принято называть квазиоптимальным.

Определение 2 [10]. Шаг интегрирования принято называть квазиоптимальным, если погрешность $\|\tilde{x}_{i+1} - x(t_{i+1})\| = p_{i+1}(\delta, h(\delta))$ имеет максимальную скорость стремления к нулю.

Поскольку проблемы численного решения рассматриваемых задач в некотором смысле похожи на проблемы численного решения интегральных уравнений Вольтерра первого рода, аналогичный результат [8] был получен для одношаговой схемы первого порядка, предназначенной для решения линейных ДАУ. Данная схема имеет невысокий порядок, поэтому есть смысл исследовать другие алгоритмы численного решения ДАУ на регуляризирующие свойства, например, коллокационно-вариационные.

2 Коллокационно-вариационная разностная

Рассмотрим построение конкретной коллокационно-вариационной разностной схемы [5].

Пусть $L_2(x_{i+1}, x_i, x_{i-1}, t)$, $t \in [t_{i-1}, t_{i+1}]$, — интерполяционный вектор-полином, проходящий через точки (t_{i-1}, x_{i-1}), (t_i, x_i), (t_{i+1}, x_{i+1}). Подставив его в (2) и полагая $t = t_{i+1}$, получим

$$A_{i+1}(3x_{i+1} - 4x_i + x_{i-1}) + 2hB_{i+1}x_{i+1} = 2hf_{i+1}, \tag{3}$$

Будем смотреть на разностную схему (5) как на одношаговую, т. е. будем иметь недоопределенную СЛАУ размером $n \times 2n$, которую дополним условием минимума выпуклой целевой функции $\Phi(x_{i+1}, x_i)$.

Определим $\|L_2(x_{i+1}, x_{i,} x_{i-1}, t\|^2$, $t \in [t_{i-1}, t_{i+1}]$, как

$$\|L_2(.)\| = \sum_{j=0}^{2} \int_{t_{i-1}}^{t_{i+1}} L_2^{(j)T}(x_{i+1}, x_i, x_{i-1}, t) L_2^{(j)}(x_{i+1}, x_i, x_{i-1}, t)dt. \tag{4}$$

Данная функция аппроксимирует квадрат нормы решения на отрезке $[t_{i-1}, t_{i+1}]$. Применяя для вычисления определенного интеграла (4) формулу левых прямоугольников, будем иметь

$$\|L_2(.)\| = \sum_{j=0}^{2} \int_{t_{i-1}}^{t_{i+1}} L_2^{(j)T}(x_{i+1}, x_i, x_{i-1}, t) L_2^{(j)}(x_{i+1}, x_i, x_{i-1}, t)dt \approx \tag{5}$$

$$\approx 2h\left(\|x_{i-1}\|^2 + \left\| \frac{1}{2h}(-x_{i+1} + 4x_i - 3x_{i-1}) \right\|^2 + \left\| \frac{1}{h^2}(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) \right\|^2 \right).$$

Здесь норма вектора — евклидова. Так как мы полагаем, что x_{i-1} задано и постоянный множитель не влияет на поиск аргумента условного минимума целевой функции, то в качестве ее выбираем

$$\Phi(x_{i+1}, x_i) = \frac{h^2}{4}\|-x_{i+1} + 4x_i - 3x_{i-1}\|^2 + \|x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}\|^2. \tag{6}$$

Выражение (6) представляет собой некий аналог квадрата нормы интерполяционного векторного многочлена $L_2(x_{i+1}, x_i, x_{i-1}, t)$, $t \in [t_{i-1}, t_{i+1}]$.

Стандартно [3] перейдем от задачи на минимум функции (6) с ограничением (3) к задаче на безусловный минимум функции Лагранжа

$$Z(x_{i+1}, x_i, \Lambda) = \frac{h^2}{4}\|-x_{i+1} + 4x_i - 3x_{i-1}\|^2 + \|x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}\|^2 +$$
$$+ \Lambda^T\left[(3A_{i+1} + 2hB_{i+1})x_{i+1} - 4A_{i+1}x_i + A_{i+1}x_{i-1} - 2hf_{i+1}\right],$$

где $\Lambda = (\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n)^T$ — n-мерный вектор множителей Лагранжа. Аргументы x_{i+1}, x_i, Λ, при которых функция (6) будет достигать минимума, удовлетворяют следующей СЛАУ

$$\begin{pmatrix} (2+0.5h^2)E & -(4+2h^2)E & (3A_{i+1}+2hB_{i+1})^T \\ -(4+2h^2)E & (8+8h^2)E & -4A_{i+1}^T \\ 3A_{i+1}+2hB_{i+1} & -4A_{i+1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{i+1} \\ x_i \\ \Lambda \end{pmatrix} = \tag{7}$$

$$\begin{pmatrix} -(2+1.5h^2)E \\ (4+6h^2)E \\ -A_{i+1} \end{pmatrix} x_{i-1} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2f_{i+1} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, полагая x_{i+1} известным, x_i и x_{i-1} находим из условия минимума функции (6) при ограничениях (3), т. е. продвигаемся сразу на $2h$. Далее процесс повторяется до исчерпания отрезка.

Далее выдвинем предположение, основанное на анализе поведения погрешности $\|\tilde{x}_{i+1} - x(t_{i+1})\|$ (см. Определение 2), что квазиоптимальный шаг $h \asymp \delta^{1/3}$, и проверим его на численном расчете модельного примера. Обоснование данного результата предполагается провести в дальнейшем.

3 Численный расчет

Применим метод (7) для примера 1

$$\begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}'(t) \\ \tilde{v}'(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}(t) \\ \tilde{v}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q(t) \\ \exp(-t) + \delta(t) \end{pmatrix}, \ t \in [0,1],$$

Точное решение данного примера $u(t) = \exp(-t) + t\exp(-t)$, $v(t) = -\exp(-t)$ в случае $\delta(t) \equiv 0$. Погрешности для нескольких значений шага интегрирования и пилообразного возмущения $\delta(t) \equiv (-1)^i \delta$ даны в таблице 1. Под погрешностью понимается $\max_{1 \le i \le N} \max\{|u_i - u(t_i)|, |v_i - v(t_i)|\}$. Значения погрешности, при котором шаг близок к квазиоптимальному, приведены в табл. 1 и выделены жирным шрифтом.

Таблица 1

h / δ	0.15	0.075	0.0375
0.1	0.035	0.099	0.11
0.075	**0.0144**	0.068	0.087
0.05	0.028	0.038	0.056
0.0125	0.069	**0.085**	0.0096
0.01	0.072	0.011	0.0065
0.002	0.081	0.02	**0.0036**
0.001	0.082	0.022	0.0048

Приведенные результаты согласуются с предположением, что квазиоптимальный шаг $h \asymp \delta^{1/3}$. В самом деле, уменьшая δ приблизительно в 6 раз, квазиоптимальный шаг уменьшается в 2 раза, то есть приблизительно как $6^{1/3}$.

Заключение

В статье рассмотрены линейные дифференциально-алгебраические уравнения. Перспективным подходом их численного решения являются коллокационно-вариационные методы. Исследованы саморегуляризирующие свойства коллокационно-вариационой разностной схемы с одной точкой коллокации на модельном примере.

Литература

1. Апарцин А. С., Бакушинский А. Б. Приближенное решение интегральных уравнений Вольтерра 1 рода методом квадратур // Дифференциальные и интегральные уравнения. Иркутск: Изд-во ИГУ, 1972. Вып. 1. С. 248–258.

2. Бояринцев Ю. Е. Регулярные и сингулярные системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Новосибирск: Наука, 1980. 222 с.

3. Вариационные подходы к численному решению дифференциально-алгебраических уравнений / М. В. Булатов [и др.] // Вычислительные технологии. 2010. Т. 15, № 5. С. 3–14.

4. Булатов М. В., Рахвалов Н. П., Соловарова Л. С. Численное решение дифференциально-алгебраических уравнений методом коллокационно-вариационных сплайнов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2013. Т. 53, № 3. С. 46–58. DOI:10.7868/S0044466913030046.

5. Соловарова Л. С. О коллокационно-вариационной разностной схеме для дифференциально-алгебраических уравнений // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. 2017. № 3. С. 3–9. DOI: 10.18101/2304-5728-2017-3-3-9.

6. Тихонов А. Н., Леонов А. С., Ягола А. Г. Нелинейные некорректные задачи. М.: КУРС, 2017. 400 с.

7. Чистяков В. Ф. Алгебро-дифференциальные операторы с конечномерным ядром. Новосибирск: Наука, 1996. 280 с.

8. Bulatov M., Solovarova L. On self-regularization properties of a difference scheme for linear differential-algebraic equations // Applied Numerical Mathematics. 2018. Vol. 130. P. 86–94. DOI: 10.1016/j.apnum.2018.03.015.

9. Lamour R., März R., Tischendorf C. Differential-Algebraic Equations: A Projector Based Analysis. Berlin: Springer, 2013. 649 p.

10. Апарцин А. С. Неклассические уравнения Вольтерра I рода: теория и численные методы. Новосибирск: Наука. Сиб. издат. фирма РАН, 1999. 193 с.

ON SELF-REGULATING PROPERTIES OF COLLOCATION VARIATIONAL METHOD FOR LINEAR DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC EQUATIONS

Lubov S. Solovarova
Cand. Sci. (Phys. and Math.), Junior Researcher,
Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory SB RAS
134 Lermontova St., Irkutsk 664033, Russia
soleilu@mail.ru

Abstract. The article deals with linear interrelated systems of algebraic and ordinary differential equations, which are commonly occurring in important applied problems of power engineering, kinetic chemistry, biology, and other areas. In the literature, they are usually called differential-algebraic equations. We have emphasized the difficulties arising in the numerical solution of such problems and their characteristic properties, in particular, ill-posedness. The article described in detail the construction of one particular case of the collocation variational approach, which have given a good account of solving various classes of differential-algebraic equations. This approach is based on solving a specific problem of mathematical programming. Using a test example, we have shown that this difference scheme can generate a regularization algorithm (the so-called self-regulation property) with a regularization parameter — a grid step.

Keywords: algebraic-differential equations; difference schemes; numerical technique; regularizing algorithm; ill-posed problems; regularization algorithm; operational margin; quasioptimal step; ordinary differential equations; integral equations.

References

1. Apartsin A. S., Bakushinskii A. B. Priblizhennoe reshenie integralnykh uravnenii Volterra 1 roda metodom kvadratur [Approximate Solution of Volterra Integral Equations of the First Kind by the Quadrature Method]. *Differentsialnye i integralnye uravneniya.* 1972. Vol. 1. Pp. 248–258.

2. Boyarintsev Yu. E. *Regulyarnye i singulyarnye sistemy lineinykh obyknovennykh differentsialnykh uravnenii* [Regular and Singular Systems of Ordinary Differential Equations]. Novosibirsk: Nauka Publ., 1980. 222 p.

3. Bulatov M. V., Gorbunov V. K., Martynenko Yu. V., Nguen Din Kong. Variatsionnye podkhody k chislennomu resheniyu differentsialno-algebraicheskikh uravnenii [Variational Approaches to the Numerical Solution of Differential-Algebraic Equations]. *Vychislitelnye tekhnologii.* 2010. Vol. 15. No. 5. Pp. 3–14.

4. Bulatov M. V., Rakhvalov N. P., Solovarova L. S. Chislennoe reshenie differentsialno-algebraicheskikh uravnenii metodom kollokatsionno-variatsionnykh splainov [Numerical Solution of Differential-Algebraic Equations using the Spline Collocation Variational Method]. *Computational Mathematics and Mathematical Physics.* 2013. Vol. 53. No. 3. Pp. 46–58. DOI: 10.7868/S0044466913030046.

5. Solovarova L. S. O kollokatsionno-variatsionnoi raznostnoi skheme dlya differentsialno-algebraicheskikh uravnenii [On Collocation Variational Difference Scheme for Differential-Algebraic Equations]. *Vestnik Buryatskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika, informatika.* 2017. No. 3. Pp. 3–9. DOI: 10.18101/2304-5728-2017-3-3-9.

6. Tikhonov A. N., Leonov A. S., Yagola A. G. *Nelineinye nekorrektnye zadachi.* [Nonlinear Ill-Posed Problems]. Moscow: Kurs Publ., 2017. 400 p.

7. Chistyakov V. F. *Algebro-differentsialnye operatory s konechnomernym yadrom* [Algebraic Differential Operators with a Finite-Dimensional Kernel]. Novosibirsk: Nauka Publ., 1996. 280 p.

8. Bulatov M., Solovarova L. On Self-Regularization Properties of a Difference Scheme for Linear Differential-Algebraic Equations. *Applied Numerical Mathematics.* 2018. Vol. 130. P. 86–94. DOI:10.1016/j.apnum.2018.03.015

9. Lamour R., März R., Tischendorf C. *Differential-Algebraic Equations: A Projector Based Analysis.* Berlin: Springer, 2013. 649 p.

10. Apartsyn A. S. *Nonclassical Linear Volterra Equations of the First Kind.* Utrecht; Boston: VSP, 2003. 168 p.

Статья поступила в редакцию 11.11.2020; одобрена после рецензирования 30.11.2020; принята к публикации 10.12.2020.