

Модификация методов решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с интервальными параметрами

Морозов А.Ю.*, Ревизников Д.Л.**

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ, Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия

**e-mail: alex-icez@yandex.ru*

***e-mail: reviznikov@inbox.ru*

Аннотация

В статье рассматриваются вопросы численного решения систем ОДУ с интервальными начальными условиями. Описаны существующие интервальные методы, основанные на рядах Тейлора: метод Мура, метод параллелепипедов и QR-метод Лонера. Предложены и апробированы подходы (модификации), улучшающие эффективность интервальных методов, основанных на рядах Тейлора.

Ключевые слова: интервальные методы рядов Тейлора, метод Мура, метод параллелепипедов, QR-метод Лонера, эффект обертывания (Мура), модель Лотки-Вольтерры, интервальные системы ОДУ.

Введение

Часто на практике приходится сталкиваться с задачами, содержащими некоторую неопределенность или неоднозначность в начальных условиях или

параметрах. Термин неопределенность обычно обозначает частичное знание о значениях того или иного параметра.

Дифференциальные уравнения широко используются для решения различных классов прикладных задач, например, для задач в механике, термодинамики и химической кинетики. Большая часть реальных прикладных задач описывается сложными системами дифференциальных уравнений, не имеющими аналитического решения[1]. Естественной потребностью для таких задач, является получение внешней интервальной оценки решения по известным интервальным значениям начальных условий или параметров. В частности, подобные задачи возникают в прикладной механике, термодинамике и химической кинетике.

Для решения задачи Коши для систем ОДУ с интервальными параметрами существуют несколько численных методов, основанных на рядах Тейлора, такие как прямой метод Мура, метод параллелепипедов и QR-метод Лонера[2]. Все эти методы представляют собой некоторое расширение классического метода рядов Тейлора, учитывающие интервальную постановку задачи. Применение строгих интервальных методов, к которым относятся методы семейства рядов Тейлора, для более комплексных задач зачастую приводит к неудовлетворительным результатам из-за чрезмерных длин получаемых интервалов[3]. Данный эффект (получение чрезмерно больших длин интервалов) принято называть эффектом обертывания или эффектом Мура[4]. В статье предлагаются некоторые модификации, направленные на снижение этого эффекта и, как следствие, на улучшение эффективности и точности алгоритмов при

незначительной потери свойства гарантированности получаемых оценок решения. Существует альтернативный подход к решению рассматриваемых задач, основанный на методе Монте-Карло, но за приемлемое время он дает достаточно грубые оценки решений.

Постановка задачи Коши

Интервальная задача Коши ставится следующим образом[4]

$$u' = f(t, u),$$

где $f: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ – называется правой частью системы ОДУ, $u_0 \in \mathbb{R}^m$.

Здесь и далее интервалы (или интервальные числа) выделяются **жирным** шрифтом, а их множество обозначается $\mathbb{I}\mathbb{R}$ [5-8]:

$$\mathbb{I}\mathbb{R} = \{x = [\underline{x}, \bar{x}] \mid \underline{x} \leq \bar{x}\}, \quad \underline{x}, \bar{x} \in \mathbb{R}.$$

Метод интервальных рядов Тейлора

Интервальный метод Тейлора заключается в разбиении исходного периода интегрирования на определенное число шагов; при этом каждый шаг интегрирования состоит из двух этапов.

Первый этап заключается в определении текущего шага интегрирования и априорного интервала v_j , гарантированно содержащего единственное решение $u(t)$ для всех $t \in [t_{j-1}, t_j]$ и $u_{j-1} \in \mathbf{u}_{j-1}$, рис. 1.

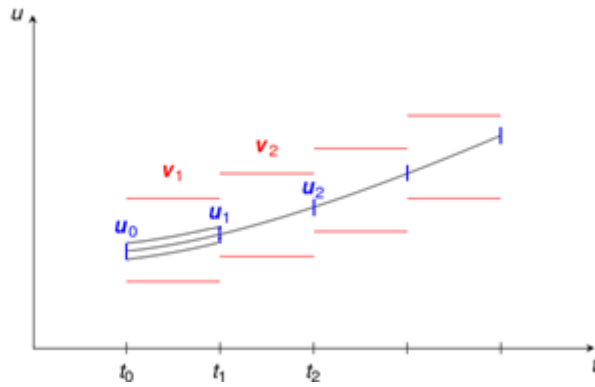


Рис. 1. Априорная оценка решения

На этом этапе часто применяют метод постоянного приближения первого порядка для автономных задач Коши [9], который заключается в следующем.

Если h_j и \mathbf{v}_j удовлетворяют условию

$$\mathbf{v}_j^1 = \mathbf{u}_{j-1} + [0, h_j]f(\mathbf{v}_j) \subseteq \mathbf{v}_j,$$

то задача Коши имеет единственное решение $u(t) \subseteq \mathbf{v}_j^1$ для всех $t \in [t_{j-1}, t_j]$ и $u_{j-1} \in \mathbf{u}_{j-1}$.

На втором этапе с помощью априорного интервала \mathbf{v}_j вычисляется более узкий интервал \mathbf{u}_j , гарантированно содержащий решение исходной задачи в точке t_j .

Рассмотрим разложение функции в ряд Тейлора:

$$u(t_j) \in \mathbf{u}_{j-1} + \sum_{k=1}^n \frac{h_j^k}{k!} f^{(k-1)}(\mathbf{u}_{j-1}) + \mathbf{z}_j,$$

где \mathbf{z}_j – интервальная оценка остаточного члена в форме Лагранжа:

$$\mathbf{z}_j = \frac{h_j^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n)}(\mathbf{v}_j)$$

Данное разложение будет гарантированно содержать решение $u(t_j)$.

Семейство методов на основе рядов Тейлора

Идея методов заключается в рассмотрении каждого шага интегрирования с использованием рядов Тейлора, как некоторого нелинейного преобразования из \mathbb{R}^n в \mathbb{R}^n . При этом отделяется вычисление траектории перемещения области решения от производимых с ней деформаций под действием преобразования (дополнительно вычисляется матрица Якоби преобразования).

Вычисление полных производных вплоть до k -го порядка имеет вид

$$f^{[0]}(u) = u, \quad f^{[k]}(u) = \left(\frac{\partial f^{[k-1]}}{\partial u} f \right) (u), \quad \text{для } k \geq 1,$$

а вычисление матрицы Якоби преобразования –

$$\mathbf{S}_{j-1} = I + \sum_{k=1}^n \frac{h_0^k}{k!} J(f^{[k]}(\mathbf{u}_{j-1})), \quad \mathbf{z}_j = \frac{h_0^{n+1}}{(n+1)!} f^{[n]}(\mathbf{v}_j),$$

где I – единичная матрица, $J(f^{[k]})$ – матрица Якоби для $f^{[k]}$.

Для некоторой точки $\hat{u}_{j-1} \in \mathbf{u}_{j-1}$ получаем итоговую формулу[2]

$$u(t_j) \in \mathbf{u}_j = \hat{u}_{j-1} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h_j^k}{k!} f^{[k]}(\hat{u}_{j-1}) + \mathbf{z}_j + \mathbf{S}_{j-1}(\mathbf{u}_{j-1} - \hat{u}_{j-1}).$$

В этой формуле эффект обертывания появляется в связи с последним членом $\mathbf{S}_{j-1}(\mathbf{u}_{j-1} - \hat{u}_{j-1})$. По сути, $(\mathbf{u}_{j-1} - \hat{u}_{j-1})$ является прямоугольным параллелепипедом, сдвинутым в начало координат относительно \hat{u}_{j-1} , а матрица \mathbf{S}_{j-1} является интервальной матрицей Якоби преобразования.

Рассмотрим следующее множество:

$$\Sigma = \{ \mathbf{S}_{j-1}(\mathbf{u}_{j-1} - \hat{u}_{j-1}) \mid \mathbf{S}_{j-1} \in \mathbf{S}_{j-1}, \mathbf{u}_{j-1} \in \mathbf{u}_{j-1} \}.$$

Множество Σ на каждом шаге интегрирования заменяется соответствующим прямоугольным параллелепипедом со сторонами, параллельными осям координат. За счет этого и происходит паразитное увеличение множества решений (эффект обертывания).

Все методы семейства направлены на учет происходящих преобразований исходной области с дальнейшей их компенсацией на каждом шаге.

Основанная схема всех методов одинаковая:

$$\hat{u}_0 = mid(u_0), \quad \mathbf{r}_0 = \mathbf{u}_0 - \hat{u}_0, \quad B_0 = I,$$

$$\hat{u}_j = \hat{u}_{j-1} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h_{j-1}^k}{k!} f^{[k]}(\hat{u}_{j-1}) + mid(\mathbf{z}_j),$$

$$\mathbf{u}_j = \hat{u}_{j-1} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h_{j-1}^k}{k!} f^{[k]}(\hat{u}_{j-1}) + \mathbf{z}_j + (\mathbf{S}_{j-1} B_{j-1}) \mathbf{r}_{j-1},$$

где \mathbf{z}_j – локальная ошибка, \mathbf{r}_j – «глобальная ошибка».

$$\mathbf{r}_j = \left(B_j^{-1} (\mathbf{S}_{j-1} B_{j-1}) \right) \mathbf{r}_{j-1} + B_j^{-1} (\mathbf{z}_j - mid(\mathbf{z}_j))$$

Все методы семейства различаются только способом вычисления матрицы B_j [2,10]:

- Прямой метод Мура: $B_j = I$.
- Метод параллелепипедов (Еижгенраам, Лонер): $B_j = mid(\mathbf{S}_{j-1} B_{j-1})$.
- QR-метод (Лонер): $mid(\mathbf{S}_{j-1} B_{j-1}) = QR$, $B_j = Q$.

Очевидно, что прямой метод Мура никак не компенсирует эффект обертывания. QR-метод Лонера отличается от метода параллелепипедов тем, что на каждом шаге область решения заключается в прямоугольный параллелепипед для

более эффективного учета локальной ошибки z_j на каждом шаге. QR-метод Лонера считается одним из самых эффективных методов снижения эффекта обертывания[11].

Модификация методов на основе рядов Тейлора

Описанные выше методы значительно снижают эффект обертывания, особенно в однородных линейных системах ОДУ с постоянными коэффициентами. Однако при интегрировании нелинейных систем ОДУ эффект обертывания все равно проявляется, хотя и в меньшей мере, и начиная с определенного момента, получаемые оценки решения становятся чрезмерно большими и неприемлемыми.

Матрица Якоби характеризует деформацию элементарных объемов пространства. В случае линейной системы ОДУ матрица Якоби постоянна и каждый элементарный объем области деформируется линейно и одинаково, как и в целом вся область. Поэтому как была изначально область параллелепипедом, так и в процессе решения она остается такой. В случае нелинейной системы ОДУ матрица Якоби в каждой точке области разная. За счет использования интервальной арифметики мы получаем уже интервальную матрицу Якоби, содержащую в себе все возможные матрицы во всех точках области. Используя такую матрицу для деформации, мы заведомо закладываем то, что любой элементарный объем области может быть деформирован любой вещественной матрицей Якоби. Это, в конечном счете, и ведет к паразитному эффекту.

Идея снижения эффекта обертывания заключается в том, чтобы вычислять матрицу Якоби не от всей области, а только от её некоторой заведомо меньшей

части, или вообще только в одной точке. Использование такого подхода лишает нас свойства гарантированности, но, как показали численные эксперименты, большая часть решения все равно содержится в получаемой оценке.

Были апробированы несколько подходов:

- Матрица Якоби вычислялась от текущего множества решения, уменьшенного в p раз:

$$\mathbf{S}_{j-1} = I + \sum_{k=1}^n \frac{h_0^k}{k!} J \left(f^{[k]} \left(\text{mid}(\mathbf{u}_{j-1}) + \frac{1}{p} (\mathbf{u}_{j-1} - \text{mid}(\mathbf{u}_{j-1})) \right) \right),$$

где $\text{mid}(\mathbf{u}_{j-1})$ – вещественный вектор-медиана интервального вектора \mathbf{u}_{j-1} .

- Матрица Якоби вычислялась от центральной точки множества решений:

$$\mathbf{S}_{j-1} = I + \sum_{k=1}^n \frac{h_0^k}{k!} J \left(f^{[k]}(\text{mid}(\mathbf{u}_{j-1})) \right).$$

- Матрица Якоби вычислялась на каждом шаге в случайной точке множества решений:

$$\mathbf{S}_{j-1} = I + \sum_{k=1}^n \frac{h_0^k}{k!} J \left(f^{[k]}(\text{random}(\mathbf{u}_{j-1})) \right),$$

где $\text{random}(\mathbf{u}_{j-1})$ – случайный вещественный вектор из интервального вектора \mathbf{u}_{j-1} .

На практике, мы используем $n = 3$.

Критерии оценки эффекта обертывания и гарантированности решения

Для оценки эффективности предложенных подходов приведем основные критерии оценки эффекта обертывания и гарантированности решения.

Определим отображение, сопоставляющее некоторому интервальному вектору \mathbf{v} из \mathbb{IR}^n число, характеризующее «размер» области, описываемой вектором:

$$val(\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^n wid(\mathbf{v}_i),$$

где $wid(\mathbf{v}_i)$ – ширина интервала \mathbf{v}_i .

С геометрической точки зрения, рассматриваемое отображение представляет собой полусумму длин всех ребер некоторого n -мерного прямоугольного параллелепипеда.

Критерий оценки эффекта обертывания

$$t_{wrap} = \frac{val(\mathbf{x})}{val(\mathbf{x}_{mt} \cap \mathbf{x})},$$

где \mathbf{x}_{mt} – точное решение, \mathbf{x} – численное решение.

Данный критерий характеризует, во сколько раз получаемое решение больше оптимального.

Критерий оценки гарантированности решения

$$t_{guar} = \frac{val(\mathbf{x}_{mt} \cap \mathbf{x})}{val(\mathbf{x}_{mt})},$$

где \mathbf{x}_{mt} – точное решение, \mathbf{x} – численное решение.

Этот критерий характеризует долю содержания оптимального решения в получаемом численном решении.

Определим понятие сильного и слабого критерия оценки для всего интервала интегрирования системы ОДУ.

Сильные критерии оценки

$$t_{wrap}^s = \max_i t_{wrap}^i,$$

$$t_{guar}^s = \min_i t_{guar}^i,$$

Слабые критерии оценки

$$t_{wrap}^w = \text{avg}_i t_{wrap}^i,$$

$$t_{guar}^w = \text{avg}_i t_{guar}^i$$

где t_{wrap}^i и t_{guar}^i – значения соответствующих критериев на i -ом шаге метода.

Слабые критерии характеризуют средние значения, сильные же критерии показывают худшие значения на всем протяжении решения системы ОДУ.

Пример интегрирования нелинейной системы ОДУ, описывающей модель

Лотки-Вольтерры с использованием модификаций

Рассматриваемая модель описывает взаимодействие двух видов типа «хищник-жертва».

Задача Коши:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -\alpha x + \beta xy \\ \frac{dy}{dt} = \gamma y - \delta xy \end{cases}, \quad \alpha = 0.9, \quad \beta = 0.5, \quad \gamma = 0.7, \quad \delta = 0.8;$$

$$x(0) \in \mathbf{x}_0 = [0.98, 1.0];$$

$$y(0) \in \mathbf{y}_0 = [0.78, 0.8];$$

где x – количество жертв, y – количество хищников, $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ – коэффициенты, отражающие взаимодействие между видами.

Множество решений данной задачи на фазовой плоскости (x, y) представляет собой некоторые периодические колебания, отражающие изменения в популяциях хищников и жертв (рис. 2).

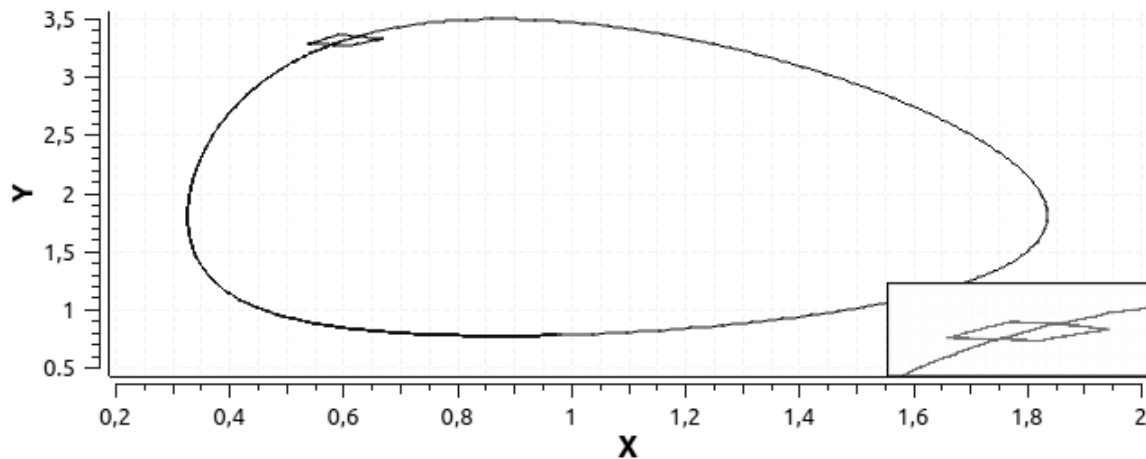


Рис. 2. Модель Лотки-Вольтерры. Фазовая плоскость

В табл. 1 на момент $t = 13$ приведены значения критериев при использовании каждой из модификаций на примере метода параллелепипедов. В качестве оптимального решения использовалось решение, полученное методом Монте-Карло.

Таблица 1.

Сравнение походов. Модель Лотки-Вольтерры.

| подходы критерии | без модификаций | 1-й подход. ($p = 10$) | 2-й подход. Центральная точка области | 3-й подход. Случайная точка области |
|---------------------|--------------------|-----------------------------|---|---|
| t_{wrap}^s | 9.35 | 1.21 | 1.07 | 1.07 |
| t_{wrap}^w | 2.59 | 1.08 | 1.02 | 1.02 |
| t_{guar}^s | 1.00 | 0.99 | 0.96 | 0.96 |
| t_{guar}^w | 1.00 | 1.00 | 1.00 | 1.00 |

Применение метода параллелепипедов для данной системы ОДУ привело к увеличению получаемого решения в 9 раз на момент $t = 13$ по сравнению с оптимальным решением. На момент же $t = 16$ решение полностью расходится и устремляется в бесконечность. Все модификации достаточно существенно снизили паразитный эффект. Второй и третий подходы показали себя одинаково за счет потери в худшем случае 4-х процентов решения; эффект обертывания снизился до 7 процентов. Первый же подход достиг снижения эффекта обертывания до 21 процента за счет потери всего лишь одного процента решения. При этом следует отметить, что в первом подходе за счет выбора коэффициента уменьшения области можно добиваться разных результатов, то есть варьировать между эффектом обертывания и гарантированностью.

Пример интегрирования нелинейной системы ОДУ, описывающей осциллятор

Ван дер Поля с использованием модификаций

Задача Коши:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y \\ \frac{dy}{dt} = -x + \alpha y(1 - x^2) \end{cases}, \quad \alpha = 3.0, \quad \begin{matrix} x(0) \in \mathbf{x}_0 = [0.09, 0.1] \\ y(0) \in \mathbf{y}_0 = [0.09, 0.1] \end{matrix}$$

где x — координата точки, зависящая от t , y — скорость точки, α — некий коэффициент, характеризующий нелинейность и силу затухания.

Множество решений данной задачи представляет собой некоторые периодические колебания (рис. 3).

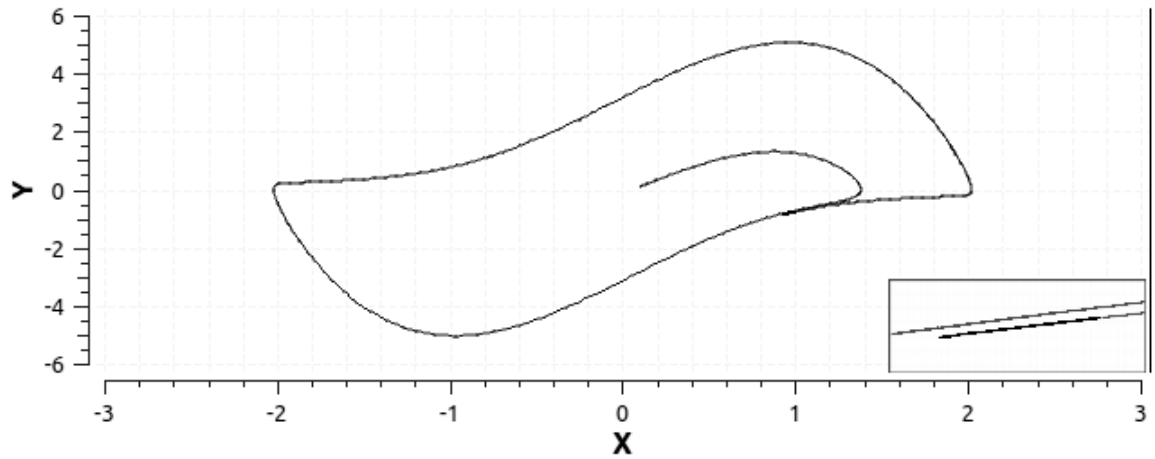


Рис. 3. Осциллятор Ван дер Поля. Фазовая плоскость

В табл. 2 на момент $t = 27$ приведены значения критериев при использовании модификаций на примере метода параллелепипедов. В качестве оптимального решения использовалось решение, полученное методом Монте-Карло.

Таблица 2.

Сравнение походов. Осциллятор Ван дер Поля.

| подходы критерии | 2-й подход. Центральная точка области | 3-й подход. Случайная точка области |
|---------------------|--|--|
| t_{wrap}^s | 2.84 | 2,36 |
| t_{wrap}^w | 1.66 | 1.25 |
| t_{guar}^s | 0.95 | 0.91 |
| t_{guar}^w | 1.00 | 0.996 |

Метод параллелепипедов без модификации расходится, начиная с момента $t = 1.66$, а с использованием первой модификации ($p = 10$), с момента $t = 4.25$. Третий

подход немного лучше снизил эффект обертывания, по сравнению со вторым подходом, но за счет потери в худшем случае 9-ти процентов решения, вместо 5-ти.

Пример интегрирования нелинейной системы ОДУ, описывающей консервативный осциллятор с использованием модификаций

Задача Коши:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y \\ \frac{dy}{dt} = -\sin(x) \end{cases}, \quad \begin{matrix} x(0) \in x_0 = [0.3, 0.4] \\ y(0) \in y_0 = [0.2, 0.3] \end{matrix}$$

где x — координата точки, зависящая от t , y — скорость точки.

Множество решений данной задачи представляет собой некоторые периодические колебания (рис. 4).

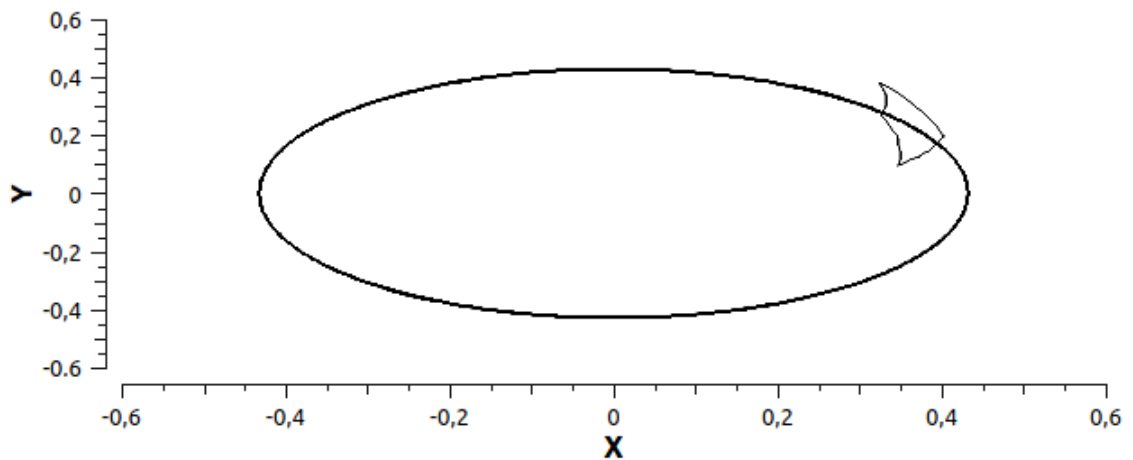


Рис 4. Нелинейный консервативный осциллятор. Фазовая плоскость

В табл. 3 на момент $t = 70$ приведены значения критериев при использовании модификаций на примере метода параллелепипедов. В качестве оптимального решения использовалось решение, полученное методом Монте-Карло.

Таблица 3.

Сравнение походов. Нелинейный консервативный осциллятор.

| подходы критерии | 1-й подход. ($p = 10$) | 2-й подход. Центральная точка области | 3-й подход. Случайная точка области |
|---------------------|-----------------------------|---|---|
| t_{wrap}^s | 1.35 | 1.23 | 1.25 |
| t_{wrap}^w | 1.13 | 1.09 | 1.10 |
| t_{guar}^s | 0.99 | 0.97 | 0.98 |
| t_{guar}^w | 1.00 | 1.00 | 1.00 |

Метод параллелепипедов без модификации расходится, начиная с момента $t = 37$.

Заключение

Предложенные в статье модификации методов на основе рядов Тейлора заметно снижают паразитный эффект обертывания.

Погрешность методов зависит от геометрии исходной области и от нелинейных деформаций, появляющихся в процессе интегрирования системы ОДУ, но при этом, в рассмотренных вычислительных экспериментах она не превысила 10 процентов.

Предложенные и реализованные модификации хорошо справляются с паразитным эффектом и являются некоторым компромиссом между безграничным ростом внешних оценок решений и свойством гарантированности.

Библиографический список

1. Афанасьева М.Н., Кузнецов Е.Б. Численный метод решения нелинейной краевой задачи для дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом. // Труды МАИ, 2016, №88: <http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=70713>
2. Markus Neher, Interval Methods and Taylor Model Methods for ODEs, TM VII, Key West, KIT, Michigan State University, 2011, p 33.
3. Lee H.J., Schiesser W.E. Ordinary and partial differential equation routines in C, C++, Fortran, Java, Maple, and MATLAB. London: Chapman and Hall/CRC, 2004, p 515.
4. R. E. Moore. Interval Analysis. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ (1966).
5. Добронец Б.С. Интервальная математика. - Красноярск: Издательство КГУ 2007. – 287с.
6. Шарый С.П. Конечномерный интервальный анализ. – Новосибирск: Институт вычислительной техники СО РАН, 2015. – 609 с.
7. Шарый С.П. Интервальные методы для решения задач глобального поиска. – Новосибирск: Институт вычислительной техники СО РАН, 2010. – 33с.
8. Шокин Ю.И. Интервальный анализ. – Новосибирск: Наука, 1981. – 112 с.
9. Позин А.В. Обзор методов и инструментальных средств решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений с гарантированной оценкой погрешности. URL: <http://conf.nsc.ru/niknik-90/reportview/37500> (дата обращения: 10.10.2014).
10. P. Eijgenraam. The Solution of Initial Value Problems using Interval Arithmetic. Math. Centre Tracts 144, Amsterdam (1981).

11. Lohner R.J. Enclosing the solutions of ordinary initial and boundary value problems // Computer Arithmetic: Scientific Computation and Programming Languages. 1987. P. 255–286.