Carmen Simerská
Systémy algebro-diferenciálních rovnic

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 50 (2005), No. 3, 182–192

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/141270

Systémy algebro-diferenciálních rovnic

Carmen Simerská, Praha

1. Úvod

Účelem tohoto příspěvku je podat krátký přehled o systémech algebro-diferenciálních rovnic, o komplikacích vznikajících při jejich řešení a o numerických metodách, které se pro tyto úlohy používají.

Typy rovnic, o kterých zde bude pojednáno, se v anglosaské literatuře dříve označovaly např. jako singular, implicit, noncanonic, degenerate, semistate, differential-algebraic descriptor, reduced order model, podle toho, v kterém oboru se úloha s nimi spojená formulovala. O specifice těchto rovnic asi nejvíce napoví název constrained differential equations, tj. diferenciální rovnice s algebraickými omezeními.

V posledních několika letech jsou tyto typy rovnic terminologicky shrnuty v širším pojmu algebro-diferenciální rovnice (differential-algebraic equations, DAE). Vznik tohoto jednotícího termínu byl přímým důsledkem rozvoje matematické teorie DAE, která nejen umožnila pochopit specifické numerické i analytické problémy DAE, ale dala vzniknout i robustním a efektivním algoritmům, které se často dají s úspěchem aplikovat na různé typy DAE. Tato teorie zdaleka není ucelená, stále se intenzivně rozvíjí a má celou řadu aplikací.

Většina klasických pojednání o obyčejných diferenciálních rovnicích začíná formulací systému

$$\mathcal{F}\big(\boldsymbol{y}'(t),\, \boldsymbol{y}(t),\, t\big) = \boldsymbol{0}, \tag{1}$$

kde $\mathcal{F}$ a $\boldsymbol{y}$ značí vektorové funkce a kde se předpokládá, že se tato soustava rovnic (1) dá přepsat do explicitního tvaru

$$\boldsymbol{y}'(t) = \boldsymbol{f}\big(t, \boldsymbol{y}(t)\big). \tag{2}$$

Tento přepis však není většinou snadný, v mnohých případech je dokonce nemožný. I když (2) zůstává stále důležitou výchozí rovnicí pro teoretické studium i praktické použití numerických metod, přesto v posledních letech roste zájem o řešení rovnic v implicitním tvaru (1).

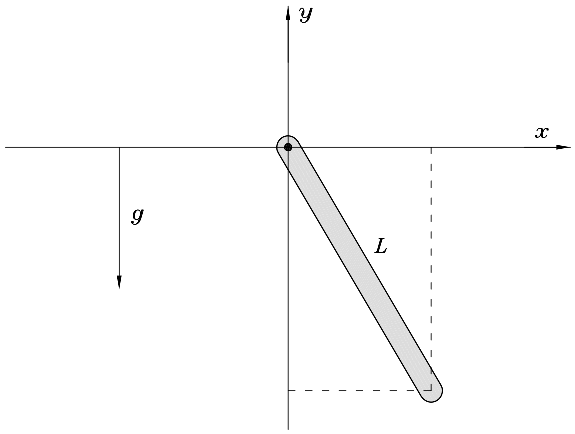
V tomto příspěvku se omezíme na problematiku počátečních úloh pro tzv. algebro-diferenciální rovnice a jejich numerické řešení. Jako ilustrační příklad nám může posloužit model rovinného kyvadla délky L (viz obr. 1). Jestliže g značí gravitační

Doc. RNDr. Carmen Simerská, CSc. (1950), Ústav matematiky, Vysoká škola chemicko-technologická, Studentská 6, 166 28 Praha 6.

zrychlení, $[x, y]$ kartézské souřadnice nekonečně malého bodu na konci tyče a λ vyjadřuje veličinu úměrnou síle, kterou je tyč napínána, pak dostáváme soustavu DAE pro neznámé x, x', y, y', λ:

$$\begin{aligned} x'' &= -2x\lambda, \\ y'' &= -2y\lambda - g, \\ 0 &= x^2 + y^2 - L^2. \end{aligned}$$

Je zřejmé, že příslušná počáteční úloha bude mít smysl, pokud budou počáteční podmínky konzistentní, tj. $[x, y]$ bude ležet na kružnici o poloměru L.



Obr. 1.

2. DAE v historickém pohledu

Obecná *soustava algebro-diferenciálních rovnic* je soustava rovnic tvaru (1), kde $\mathcal{F}\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ a $\boldsymbol{y}\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ jsou dostatečně hladké funkce a funkce $\mathcal{F}(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, t)$, definovaná v oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^{2n+1}$, je taková, že hodnost matice $\partial\mathcal{F}/\partial\boldsymbol{y}_1$ je konstantní v Ω.

Budeme se zajímat především o rovnice, kde je buď hodnost této matice menší než n, nebo kde je přepsání soustavy z tvaru (1) na (2) obtížné. V takovém systému se většinou explicitně vyskytují algebraická omezení na některé proměnné, takže soustavu (1) lze po případných úpravách přepsat do tvaru

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t) = \boldsymbol{0}, \tag{3.1}$$

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t) = \boldsymbol{0}, \tag{3.2}$$

kde matice $\partial\boldsymbol{F}/\partial\boldsymbol{x}'$ je regulární.

Z rovnic (3.1) a (3.2) je patrné, že problémy, které s sebou DAE přinášejí, jsou především následující:

- dimenze prostoru řešení (počet volných konstant) soustavy (3) je díky algebraickým omezením nižší, než bychom čekali z (3.1);
- počáteční podmínky mohou být zadány nekonzistentně s (3.2).

Uvedeme některé důvody, proč je lépe řešit přímo (1) než hledat způsob, jak přepsat (1) do tvaru (2), tj. na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic (ODR).

1. Při modelování fyzikálních problémů dostáváme DAE, které splňují řadu vazeb mezi proměnnými a jejich derivacemi. Tyto vazby mají svůj fyzikální význam. Podaří-li se převod (1) na (2), mohou se tyto vazby vytratit.
2. V případě, že je systém generován počítačem (např. u popisu velkých elektrických obvodů nebo dynamických systémů) nebo jde o složité nelineární modely, je algoritmicky obtížné nebo často nemožné dostat explicitní systém obyčejných diferenciálních rovnic (2).
3. V mnoha aplikacích se vyskytují v (3.2) parametry, jejichž změna, tj. změna vztahu mezi proměnnými, může znamenat změnu dimenze množiny řešení a převedením na tvar (2) můžeme dostat explicitní ODR různých dimenzí. Jestliže se dá tedy původní DAE řešit rovnou, pak je jednodušší pouze měnit parametry v algebraických rovnicích (3.2) než měnit tvar ODR (2).
4. Při práci se soustavou DAE je zřetelnější korespondence mezi matematickým modelem a modelem fyzikálním.
5. Převod DAE na ODR může porušit „řídkost“ systému a může znemožnit využití často výhodné struktury systému DAE plynoucí z fyzikálního modelu.

DAE byly až do konce sedmdesátých let řešeny numerickými metodami určenými pro ODR, aniž by se někdo zamýšlel nad tím, proč tyto metody nejsou u některých typů účinné.

První teoretické práce zabývající se lineárními DAE s konstantními koeficienty a některými speciálními nelineárními systémy publikovali Silverman [1] v roce 1969 a Luenberger [2] v roce 1977. K řešení DAE použili transformace souřadnic a derivování algebraických rovnic systému.

Gear [3] jako první aplikoval na některé třídy DAE metody zpětných diferencí (backward differential formulae, BDF).

V roce 1981 vešlo ve všeobecnou známost, že klasické numerické metody při řešení jistých, na první pohled jednoduchých DAE selhávají, a o těchto systémech DAE se začaly intenzivně publikovat práce.

Gear a Petzoldová svým článkem [4] dali popud k teoretickému studiu DAE a ke hledání nových numerických metod pro jejich řešení.

V letech 1984–92 bylo publikováno několik prací analyzujících problém systémů DAE a vymezujících třídy úloh, kde jsou metody určené pro ODR použitelné. DAE se v současné době klasifikují podle různých strukturálních vlastností (viz např. [5] až [9]). V průběhu zkoumání soustav algebro-diferenciálních rovnic došlo k vytvoření důležitého pojmu, totiž tzv. *indexu* DAE. Index DAE charakterizuje stupeň obtížnosti řešení DAE. Ukazuje se, že DAE indexu 1 a 2 a některé speciální DAE indexu 3 lze řešit metodami pro obyčejné diferenciální rovnice, tj. metodami zpětných diferencí (BDF) a implicitními metodami Rungova-Kuttova typu.

V posledních letech byly vytvořeny programy, jako jsou LSODI (1980) [10], DASSL (1983) [11], RADAU5 (1990) [6] a IDA [16] (1999), DASPK (nové verze po roce 2000), všechny volně získatelné, které dokáží řešit poměrně široké třídy DAE. Rovněž se zlepšily teoretické znalosti, které umožňují posoudit, zda je příslušný algoritmus použitelný, a pokud není, jakou je třeba zvolit další strategii, viz [18] (2002).

3. Některé typy soustav DAE

Nejjednodušší soustavy DAE jsou *lineární soustavy s konstantními koeficienty*, které lze zapsat ve tvaru

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}'(t) + \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{q}(t), \tag{4}$$

kde $\boldsymbol{A}$ a $\boldsymbol{B}$ jsou matice typu $n \times n$. Tyto rovnice jsou samozřejmě prostudovány nejlépe a jejich řešení, ať už analytické či numerické, se podrobně rozebírá (např. v [8]).

Pro lepší pochopení pojmu index úlohy je dobré jej definovat již u rovnic (4). Většinou má smysl se zabývat jen těmi úlohami, které mají právě jedno řešení.

Říkáme, že dvojice matic $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ tvoří *regulární svazek*, jestliže polynom

$$p(\lambda) = \det(\lambda \boldsymbol{A} + \boldsymbol{B})$$

není identicky rovný 0.

Pokud $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ netvoří regulární svazek, pak buď existuje nekonečně mnoho řešení úlohy (4), nebo tato úloha nemá žádné řešení. Platí následující věta:

Věta. *Pokud $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ tvoří regulární svazek, potom existují regulární matice $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{F}$ takové, že*

$$\boldsymbol{EAF} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_{n-s}, & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0}, & \boldsymbol{J} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{EBF} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{W}, & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0}, & \boldsymbol{I}_s \end{pmatrix},$$

kde matice $\boldsymbol{W}$ je typu $(n-s) \times (n-s)$ a matice $\boldsymbol{J}$ typu $s \times s$ je blokově diagonální a je tvořena Jordanovými bloky

$$\begin{pmatrix} 0, & 1, & . & . & 0 \\ 0, & 0, & 1, & . & 0 \\ . & . & . & . & 1 \\ 0, & 0, & 0, & 0, & 0 \end{pmatrix}.$$

Soustava (4) *je tedy ekvivalentní soustavě*

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_{n-s}, & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0}, & \boldsymbol{J} \end{pmatrix} \boldsymbol{y}' + \begin{pmatrix} \boldsymbol{W}, & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0}, & \boldsymbol{I}_s \end{pmatrix} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{E}\boldsymbol{q},$$

kde $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{F}^{-1}\boldsymbol{x}$.

Index soustavy (4) (nebo také *Kroneckerův index*) se definuje jako velikost největšího bloku matice $\boldsymbol{J}$ v ekvivalentní soustavě (5).

Poznamenejme, že převod soustavy (4) na tvar (5) může být proveden různými způsoby, ale index soustavy (4) je jednoznačně definovaný pojem. Z uvedené věty je patrné, že soustava (4) byla transformována na soustavu (5) separovatelnou na explicitní část (5.1) a část (5.2)

$$\boldsymbol{y}_1' + \boldsymbol{W}\boldsymbol{y}_1 = (\boldsymbol{E}\boldsymbol{q})_1, \tag{5.1}$$

$$\boldsymbol{J}\boldsymbol{y}_2' + \boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{r}, \tag{5.2}$$

kde $\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2)^{\mathrm{T}}$ a $\boldsymbol{r}(t) = \big(\boldsymbol{E}\boldsymbol{q}(t)\big)_2$.

Soustava rovnic (5.1) je jednoznačně řešitelná pro libovolné počáteční podmínky. Na druhé straně soustava (5.2) je jednoznačně řešitelná pouze tehdy, pokud jsou počáteční podmínky „vhodně stanoveny“. Jestliže (5.2) neobsahuje diferenciální část, je $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{0}$ a index soustavy (4) je tedy roven jedné. Pokud rovnice (5.2) chybí, je index soustavy (4) nulový.

Označíme-li $\boldsymbol{r}^{(i)} = D^{(i)}\boldsymbol{r} = \mathrm{d}^i\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t^i$, lze řešení (5.2) zapsat ve tvaru

$$\boldsymbol{y}_2 = (\boldsymbol{J}D + I)^{-1}\boldsymbol{r} = \sum_{i=0}^{index-1} (-1)^i \boldsymbol{J}^i \boldsymbol{r}^{(i)}. \tag{6}$$

Ze vztahů (6) a (5) se dají odvodit základní vlastnosti řešení obecné soustavy DAE:

- řešení může obsahovat derivace pravé strany až do řádu $index - 1$;
- neplatí, že by libovolné počáteční podmínky dávaly spojité řešení soustavy; ty, které vedou na spojité řešení, se nazývají *konzistentní počáteční podmínky*;
- soustavy (4) vyšších indexů v sobě mohou obsahovat skrytá algebraická omezení.

Nejvíce aplikací má tvar *lineární (časově proměnné) soustavy* DAE

$$\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{x}'(t) + \boldsymbol{B}(t)\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{f}(t), \tag{7}$$

kde čas t probíhá jistý časový interval $\langle t_0, T\rangle$ a matice $\boldsymbol{A}(t)$ je singulární pro všechna t z tohoto intervalu.

Pojem regularity svazku se sice dá lokálně zavést (analogicky jako v případě lineární soustavy s konstantními koeficienty), ale s řešitelností úlohy není tento pojem svázán. Existují totiž regulární svazky systémů s nekonečně mnoha řešeními a rovněž existují jednoznačně řešitelné počáteční úlohy se singulárními svazky.

Rovnice typu (7) vykazují chování, které výrazně odlišuje obecné DAE od rovnic s konstantními koeficienty (4). Ukazuje se, že teoretické výsledky i použití numerických metod na lineární DAE (7) lze aplikovat na obecné nelineární systémy (1). Nicméně rigorózní důkazy vět o řešitelnosti a konvergenci metod jsou zatím provedeny většinou pouze pro lineární DAE tvaru (7).

Speciálním případem systému (7) je *semiexplicitní lineární soustava* DAE

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1'(t) + \mathbf{B}_{11}(t)\mathbf{x}_1(t) + \mathbf{B}_{12}(t)\mathbf{x}_2(t) &= \mathbf{f}_1(t), \\ \mathbf{B}_{21}(t)\mathbf{x}_1(t) + \mathbf{B}_{22}(t)\mathbf{x}_2(t) &= \mathbf{f}_2(t). \end{aligned}$$

Pokud jsou DAE *lineární v první derivaci*, lze je zapsat ve tvaru

$$\mathbf{A}\big(t, \mathbf{y}(t)\big)\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}\big(t, \mathbf{y}(t)\big).$$

Odpovídající semiexplicitní tvar je

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1'(t) &= \mathbf{f}_1\big(\mathbf{x}_1(t),\, \mathbf{x}_2(t),\, t\big), \\ \mathbf{0} &= \mathbf{f}_2\big(\mathbf{x}_1(t),\, \mathbf{x}_2(t),\, t\big). \end{aligned}$$

Uvažujme nyní *obecnou soustavu DAE* (1) a pokusme se definovat, co znamená, že je taková soustava řešitelná. Přesnou definici pojmu řešitelnosti obecné DAE lze nalézt např. v [12]. Základním předpokladem řešitelnosti počáteční úlohy je konzistence počátečních podmínek.

Soustava DAE (1) je *řešitelná* pro $t \in \langle t_0, T\rangle$, jestliže pro všechna t existuje varieta M_t konstantní dimenze vzhledem k t, která se nazývá *varietou konzistentních počátečních hodnot* a kde

- každým bodem variety prochází hladké řešení,
- dvě řešení s různými počátečními podmínkami se nikdy neprotínají v $\langle t_0, T\rangle$,
- řešení nebifurkují,
- každé hladké řešení soustavy patří do $\{M_t\}$.

Vidíme, že řešitelnost DAE je obtížně definovatelný pojem. To ilustruje počáteční úloha pro velmi jednoduchou soustavu DAE:

$$\begin{aligned} x' &= y, \\ 1 &= x^2 + y^2, \\ x(0) &= 1, \\ y(0) &= 0. \end{aligned}$$

Například dvojice $x_1 \equiv 1$, $y_1 \equiv 0$ nebo dvojice $x_2(t) = \cos t$, $y_2(t) = -\sin t$ jsou dvě řešení pro uvedenou počáteční úlohu. Snadno nahlédneme, že počáteční úloze vyhovuje například i lipschitzovské řešení: x_1, y_1 pro $t \leqq 0$ a x_2, y_2 pro $t > 0$.

Dříve než budeme definovat index u obecné soustavy DAE (1), názorně ukážeme, jak bychom určili index například v případě semiexplicitní DAE

$$\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t), \tag{8.1}$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t). \tag{8.2}$$

Derivujeme-li algebraická omezení (8.2) podle t, dostaneme

$$\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t), \tag{9.1}$$

$$\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t)\boldsymbol{x}' + \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t)\boldsymbol{y}' = -\boldsymbol{g}_t(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t). \tag{9.2}$$

Jestliže je matice $\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{y}}$ regulární, potom soustava (9.1), (9.2) je implicitní soustavou ODR a říkáme, že soustava (8.1), (8.2) má index 1. Pokud je $\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{y}}$ singulární, potom algebraickými operacemi a změnami souřadnic můžeme (9.1), (9.2) převést na soustavu tvaru (8.1), (8.2) (samozřejmě pro jiné proměnné $\boldsymbol{x}$ a $\boldsymbol{y}$). Dále znovu derivujeme algebraické rovnice, a jestliže dostaneme implicitní ODR, potom původní systém (8.1), (8.2) má index 2 atd. Počet nutných derivování v tomto postupu bude roven indexu soustavy (8.1), (8.2) (viz např. [12]). Nyní již můžeme přistoupit k definici indexu obecné soustavy.

Index (nebo také diferenciální index) obecné soustavy DAE (1) je minimální počet nutných derivování (podle t) části nebo celého systému (1), abychom mohli určit $\boldsymbol{y}'$ jako spojitou funkci $\boldsymbol{y}$ a t.

Diferenciální index se může považovat za míru toho, jak daleko jsou systémy DAE od systémů ODR. K definici indexu DAE učiňme několik poznámek.

1. Soustavy ODR mají index 0.
2. Definice indexu pro lineární DAE s konstantními koeficienty koresponduje s definicí pro obecné DAE.
3. Index soustavy charakterizuje stupeň obtížnosti jejího řešení. Obecně platí, že čím vyšší je index soustavy, tím obtížnější je problém numericky řešit.
4. Pro numerické řešení se nedoporučuje derivovat algebraické rovnice a vzniklou soustavu řešit jako ODR (tento postup je jenom výjimečně úspěšný). Numerické derivování je totiž nestabilní proces a navíc derivováním algebraických omezení ztrácíme původní přehledné vztahy mezi proměnnými.
5. Stanovení indexu DAE (pokud se podaří) je významným vodítkem pro volbu numerické metody.
6. Hairer et al. definovali v [6] tzv. *perturbační index*, který může být totožný s indexem zde uvedeným. Detailnější zkoumání vztahu mezi indexem a perturbačním indexem lze nalézt v práci Geara [13]. Hlavním výsledkem práce [13] je platnost následujících nerovností pro obecný systém DAE:

   $$\textit{index} \leqq \textit{perturbační index} \leqq \textit{index} + 1.$$

   Speciálně pro semiexplicitní systém, jako je (8.1), (8.2), jsou si index a perturbační indexy rovny.
7. Kromě již zmíněných definic indexu DAE se ještě v literatuře používají pojmy *geometrický index*, vyjadřující geometrickou interpretaci prostoru řešení s jistými invariantními varietami, a *strukturální index*, vhodný pro studium DAE z hlediska numerické matematiky, např. v [17].

4. Vztah singulárně perturbovaného problému a DAE

Gear v [14] zkoumal a popsal singulárně perturbované problémy (SPP) jako soustavu diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}' &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t, \varepsilon), \\ \varepsilon \boldsymbol{y}' &= \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t, \varepsilon), \end{aligned} \tag{10}$$

kde $0 < \varepsilon \ll 1$.

Soustavy rovnic tohoto typu se vyskytují např. v dynamice tekutin nebo při matematickém modelování elektrických obvodů. Pro malá ε může být soustava (10) tzv. stiff systém (soustava ODR se silným tlumením). Je známo, že při numerickém řešení takových soustav ODR vznikají obtíže s vhodnou volbou integračního kroku.

Jestliže uvažujeme limitní případ soustavy (10) pro $\varepsilon = 0$, dostaneme tzv. *model redukovaného řádu*, tj. soustavu algebro-diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}' &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t, 0), \\ \boldsymbol{0} &= \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t, 0), \end{aligned} \tag{11}$$

kterou je možno mnohem snadněji analyzovat. Prostřednictvím numerického řešení soustavy (11) lze získat poměrně přesný odhad chyby numerického řešení SPP (10).

5. Krátce o numerických metodách

Jak již bylo řečeno, přestože jsou diferenciální rovnice SPP formulovány v explicitním tvaru (10), vyžadují speciální výběr numerických metod. Explicitní metody jsou pro ně nevhodné, neboť jsou nestabilní. Pokud chceme při konkrétním výpočtu explicitní metodou dosáhnout přijatelně přesných výsledků, je třeba volit velmi malý integrační krok. Proto se u úloh typu stiff používají téměř výhradně implicitní metody.

Úloha (11), kdy $\varepsilon = 0$, je případ soustavy ODR, kde vlastnost silného tlumení je dovedena do krajnosti. Ukazuje se, že na úlohy SPP i na soustavy DAE je zapotřebí aplikovat obdobné metody.

Pokud bychom chtěli například na implicitní soustavu (1), tj. na soustavu $\mathcal{F}(\boldsymbol{y}',\, \boldsymbol{y},\, t) = \boldsymbol{0}$, aplikovat jednokrokovou explicitní Eulerovu metodu, potom většinou nebudeme úspěšní. V každém kroku k je totiž třeba řešit soustavu nelineárních rovnic

$$\mathcal{F}\left(\frac{\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{y}_{k-1}}{h},\, \boldsymbol{y}_{k-1},\, t_{k-1}\right) = \boldsymbol{0},$$

kde $h = t_k - t_{k-1}$. Takové soustavy se obvykle řeší Newtonovou iterační metodou. Zde však tuto metodu použít nelze, protože Jacobián

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{y}'}(\boldsymbol{y}', \boldsymbol{y}, t)$$

je singulární matice.

Naproti tomu vícekrokové metody zpětných diferencí (BDF) a jednokrokové implicitní metody Rungova-Kuttova typu (implicit Runge-Kutta, IRK) dávají často dobré výsledky. Nejjednodušší metoda BDF prvního řádu, která je zároveň nejjednodušší metodou IRK, je implicitní Eulerova metoda. Tato metoda nahrazuje první derivaci zpětnou diferencí

$$\mathcal{F}\left(\frac{\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{y}_{k-1}}{h}, \boldsymbol{y}_k, t_k\right) = \boldsymbol{0}. \tag{12}$$

Jacobián této soustavy

$$\frac{1}{h}\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{y}'}(\boldsymbol{y}', \boldsymbol{y}, t) + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{y}}(\boldsymbol{y}', \boldsymbol{y}, t)$$

může být regulární, i když je $\partial\mathcal{F}/\partial\boldsymbol{y}'$ singulární. V lineárním případě se Jacobián rovná $(1/h)\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}$ a za předpokladu, že $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ tvoří regulární svazek, je regulární pro dostatečně malá h.

Je třeba mít na paměti, že metody BDF a IRK jsou metodami pro řešení ODR a na systémy DAE se dají aplikovat jen za některých předpokladů.

Především je nutné, aby byl problém matematicky dobře formulován, tj. aby soustava DAE byla řešitelná. Dále musí být metoda taková, aby vzniklý nelineární systém rovnic (v případě implicitní Eulerovy metody je to systém (12)) byl řešitelný v každém kroku k. Tedy příslušný Jacobián musí být regulární matice. V poslední době se ukazuje, že jednokrokové metody IRK jsou v některých směrech efektivnější než metody BDF, zvláště pokud je při řešení (vzhledem k možným nespojitostem) nutno znovu nastartovat integraci soustavy. Metody BDF je zapotřebí restartovat od metody nejnižšího řádu, zatímco IRK mohou být nastartovány od vyššího řádu metody. Metody IRK mohou být rovněž použity pro generování startovacích hodnot pro metody BDF vyšších řádů. Metody IRK i BDF s IRK startem mohou potenciálně vyřešit soustavu DAE, která má i vyšší index.

Metody BDF, resp. metody IRK jsou detailně popsány v [12], resp. [7], [15]. Tam jsou také dokázány věty o konvergenci metod pro speciální typy DAE.

6. Aplikace

Existuje několik tříd úloh, které vedou na soustavy DAE. Jednu z těchto tříd tvoří například problémy, které vznikají při modelování elektrických obvodů. Z takových modelů dostáváme typ DAE, který je většinou lineární vzhledem k první derivaci, nebo typ úloh SPP, které je třeba řešit jako model redukovaného řádu.

Při řešení problémů řízení s předepsanou cestou (prescribed path control problems) je nutné řešit semiexplicitní DAE typu (8.1), (8.2), kde v rovnicích (8.2) chybí proměnná $\boldsymbol{y}$. Tento fakt může při řešení DAE způsobit numerické potíže. Jako příklad uveďme model kosmické lodi létající ve vesmíru po předem popsaných trajektoriích, které jsou vyjádřeny algebraickými rovnicemi.

Diferenční metody pro řešení parciálních diferenciálních rovnic nahrazují derivace diferencemi. Metoda přímek (method of lines, MOL) přitom využívá existující software pro ODR. Pro parabolickou parciální diferenciální rovnici MOL diskretizuje prostorové derivace, např. konečnými diferencemi, a převádí tak parciální diferenciální rovnici na počáteční úlohu pro ODR. Mnohdy je jednodušší takové převedené problémy považovat za soustavy DAE a jako takové je numericky řešit.

Snad nejčastěji se aplikace vedoucí na soustavy DAE vyskytují při modelování mechanických soustav tuhých těles. Protože se v poslední době u takových soustav požaduje malá hmotnost a větší rychlosti, vznikají nové elastické modely, které se skládají z mnoha tuhých těles a elastických tyčí. Tedy dimenze množiny řešení vzniklých systémů DAE se mnohonásobně zvětšila a jejich řešení se zkomplikovalo.

Pokud bychom příklad rovinného kyvadla z úvodní kapitoly zobecnili na model chapadla robotu upevněného na jednom konci, dostaneme při Eulerově-Lagrangeově formulaci problému soustavu tvaru

$$\begin{aligned} \boldsymbol{z}' &= \boldsymbol{u}, \\ \boldsymbol{M}\boldsymbol{u}' &= \boldsymbol{q}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{u},t) + \boldsymbol{G}^T\lambda, \\ \boldsymbol{0} &= \varphi(\boldsymbol{z}), \end{aligned} \tag{13}$$

kde $\boldsymbol{M}$ je matice hmotností, $\boldsymbol{G} = \varphi_{\boldsymbol{z}}$ a λ značí vektor Lagrangeových multiplikátorů. Lze ukázat, že tato soustava (i soustava rovinného kyvadla) má index 3, a je tedy obtížně řešitelná. V tomto případě lze její index snížit na index 2 derivováním algebraických rovnic v (13) a přidáním dalších Lagrangeových multiplikátorů μ. Obdržíme tak soustavu

$$\begin{aligned} \boldsymbol{z}' &= \boldsymbol{u} + \boldsymbol{G}^T\mu, \\ \boldsymbol{M}\boldsymbol{u}' &= \boldsymbol{q}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{u},t) + \boldsymbol{G}^T\lambda, \\ \boldsymbol{0} &= \boldsymbol{G}\boldsymbol{u}, \\ \boldsymbol{0} &= \varphi(\boldsymbol{z}). \end{aligned}$$

Potom $(\boldsymbol{z},\boldsymbol{u},\lambda,\ \mu)$ je řešením této soustavy DAE právě tehdy, když $\mu = 0$ a $(\boldsymbol{z},\boldsymbol{u},\lambda)$ je řešením (13).

V problematice DAE se dá ještě očekávat mnoho zajímavých výsledků, z nichž jistě nejdůležitější by bylo nalézt obecnou metodu pro řešení soustav DAE indexu 2 a vyššího.

L i t e r a t u r a

[1] Silverman, L. M.: *Inversion of multivariable systems.* IEEE Trans. Aut. Control, AC-14 (1969), 270–276.

[2] Luenberger, D. G.: *Dynamic equations in descriptor form.* IEEE Trans. Aut. Control, AC-22 (1977), 312–321.

[3] GEAR, C. W.: *The simultaneous numerical solution of differential-algebraic equations.* IEEE Trans. Circuit Theory, CT-18 (1971), 89–95.
[4] GEAR, C. W., PETZOLD, L. R.: *ODE methods for the solution of differential/algebraic systems.* SIAM J. Numer. Anal. *21* (1984), 716–728.
[5] LÖTSTEDT, P., PETZOLD, L.: *Numerical solution of nonlinear differential equations with algebraic constraints I: Convergence results for backward differentiation formulas.* Math. Comp. *46* (1986), 491–516.
[6] HAIRER, E., LUBICH, C., ROCHE, M.: *The Numerical Solution of Differential-Algebraic Systems by Runge-Kutta Methods.* Springer-Verlag, Berlin 1989.
[7] HAIRER, E., LUBICH, C.: *Extrapolation at stiff differential equations.* Numer. Math. *52* (1988), 377–400.
[8] GRIEPENTROG, E., MÄRTZ, R.: *Differential-Algebraic Equations and Their Numerical Treatment.* Teubner, Leipzig 1986.
[9] MÄRTZ, R.: *On initial value problems in differential-algebraic equations and their numerical treatment.* Computing *35* (1985), 13–37.
[10] HINDMARSH, A. C.: *LSODE and LSODI, two new initial value ordinary differential equation solvers.* ACM-SIGNUM Newsletters *15* (1980), 10–11.
[11] PETZOLD, L. R.: *A description of DASSL: a differential-algebraic system solver.* In: *Scientific Computing*, eds. STEPLEMAN et al., North-Holland, Amsterdam 1983, 65–68.
[12] BRENAN, K. E., CAMPBELL, S. L., PETZOLD, L. R.: *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations.* North-Holland, Amsterdam 1989.
[13] GEAR, C. W.: *Differential-algebraic equations, indices, and integral algebraic equations.* SIAM J. Numer. Anal. *27* (1990), 1527–1534.
[14] GEAR, C. W.: *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations.* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ 1971.
[15] HAIRER, E., WANNER, G.: *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems.* Springer-Verlag, Berlin 1991.
[16] HINDMARSH, A., TAYLOR, A.: *User Documentation for IDA: A Differential-Algebraic Equation Solver for Sequential and Parallel Computers.* Lawrence Livermore National Laboratory report, UCRL-MA-136910, December 1999.
[17] REISIG, G., MARTINSON, W. S., BARTON, P. I.: *Differential-algebraic equations of index* 1 *may have an arbitrary high structural index.* SIAM J. Scientific Computing (2000), 1987–1990.
[18] RABIER, P. J., RHEINBOLDT, W. C.: *Theoretical and numerical analysis of differential--algebraic equations.* Handbook of Numerical Analysis VIII, Elsevier Publ., North Holland 2002.