

12-12-2019

Analysis of Initialization Variables Selection in Multi-Domain Modeling

Guangyuan Li

Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China;

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the [Artificial Intelligence and Robotics Commons](#), [Computer Engineering Commons](#), [Numerical Analysis and Scientific Computing Commons](#), [Operations Research, Systems Engineering and Industrial Engineering Commons](#), and the [Systems Science Commons](#)

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

Analysis of Initialization Variables Selection in Multi-Domain Modeling

Abstract

Abstract: In multi-domain modeling, the problem of initial consistency must be settled to solve differential algebraic equations (DAEs). Structural analysis is capable of verifying the initial consistency, solving some initial values and determining the degree of freedom, but not capable of affirming the variables that need to be initialized. If improper selection is made for the initiation variables, it will become low efficient and even fail to solve and simulate the model. After analyzing the initial consistency of DAEs, *a strategy based on DM decomposition is proposed for selecting the initialization variables*. The method decomposes the system into two parts with the use of DM decomposition after the system is structurally analyzed. By analyzing the reachability of under constraint part, the initialization variables can be affirmed. *This method is efficient to affirm the initialization variables and avoids wrong selections.*

Keywords

multi-domain modeling, differential algebraic equations (DAEs), initial consistency, maximum matching, DM decomposition

Recommended Citation

Li Guangyuan. Analysis of Initialization Variables Selection in Multi-Domain Modeling[J]. Journal of System Simulation, 2019, 31(7): 1313-1320.

多领域统一建模初始化变量选择分析

李光远

(重庆文理学院, 重庆 402160)

摘要: 多领域统一建模中, 为求解 DAEs (Differential Algebraic Equations) 需要解决初始相容性问题。结构化分析可以验证初始相容性, 求解部分初值并确定方程自由度, 但无法确定需要初始化的变量。错误地选择初始化变量可能极大地降低求解与仿真的效率, 甚至导致失效。分析了 DAEs 初始相容性问题, 提出了基于 DM 分解(Dulmage and Mendelsohn Decomposition)的初始化变量选择策略, 通过 DM 分解将结构化分析得到的系统分解为两部分, 对欠约束部分进行可达性分析, 确定需要初始化的变量。该方法可以有效地确定初始化变量, 避免错误的选择。

关键词: 多领域统一建模; 微分代数方程; 初始相容性; 最大匹配; DM 分解

中图分类号: TP391.9 文献标识码: A 文章编号: 1004-731X (2019) 07-1313-08

DOI: 10.16182/j.issn1004731x.joss.19-0014

Analysis of Initialization Variables Selection in Multi-Domain Modeling

Li Guangyuan

(Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China)

Abstract: In multi-domain modeling, the problem of initial consistency must be settled to solve differential algebraic equations (DAEs). Structural analysis is capable of verifying the initial consistency, solving some initial values and determining the degree of freedom, but not capable of affirming the variables that need to be initialized. If improper selection is made for the initiation variables, it will become low efficient and even fail to solve and simulate the model. After analyzing the initial consistency of DAEs, a strategy based on DM decomposition is proposed for selecting the initialization variables. The method decomposes the system into two parts with the use of DM decomposition after the system is structurally analyzed. By analyzing the reachability of under constraint part, the initialization variables can be affirmed. This method is efficient to affirm the initialization variables and avoids wrong selections.

Keywords: multi-domain modeling; differential algebraic equations (DAEs); initial consistency; maximum matching; DM decomposition

引言

多领域统一建模过程中, 为求解 DAEs 需要解决初始相容性问题, 包括初始相容性的验证与初始

化变量的选择等^[1]。确定 DAEs 的相容初始化条件是判断模型合理性与有效性的基本要求, 而找出相容的初值是求解 DAEs, 尤其是数值求解 DAEs 的前提条件^[2]。不相容的初始条件, 常常会导致求解的失效或极大地降低求解的效率。事实上, 大部分 DAEs 求解的失效都发生在初始化阶段, 或源于初始化, 不论高阶还是低阶的系统。关于 DAEs 初始相容性的研究一直以来都受到了广泛的关注, 也取



收稿日期: 2019-01-08 修回日期: 2019-03-10;
基金项目: 重庆文理学院重点科研项目(2017ZRJ23),
重庆市基础科学与前沿技术研究项目(cstc2015jcyjA
40026, cstc2016jcyjA0568);
作者简介: 李光远(1973-), 男, 重庆, 博士, 讲师,
研究方向为多领域统一建模、信息物理融合系统。

<http://www.china-simulation.com>

• 1313 •

得了大量的成果, 比如: 文献[3]提出了一种签名方法(Σ -方法)对 DAEs 进行结构化分析, 然后验证其初始相容性, 并从流形的角度对 DAEs 的相容初始化问题进行了分析; 文献[4-5]以分块的思想对签名方法进行了改进, 提高了结构化分析和初始化验证的效率; 文献[6]通过系统结构图的压缩变换, 以分层的方法对 DAEs 进行结构化分析, 从而完成系统初始相容性的验证; 文献[7-8]在签名方法的基础上提出了结合 Pantelides 算法^[9]与哑导数方法^[10]的 DAEs 规范化方法, 并以此处理结构化奇异系统, 解决冗余和不相容问题; 文献[11]详细分析了已有的一些初始化策略, 包括依靠前解的热开始方法、线性化方法、结构化分解法和决策变量的增量释放法; 文献[12]采用加权二部图对 DAEs 结构化分析进行了研究, 得到的结果可以有效地证明 DAEs 的初始相容性; 文献[13]讨论了在 Maple 软件包 deaSolve 中解决常系数 DAEs 初值问题的方法; 文献[14]提出了一种基于投影优化约束方法计算 DAEs 相容初始值的方法。

DAEs 的本质特征隐含了对初值变量的约束, 所以相容的初值有时可以根据物理条件确定, 但更多的时候需要基于变量之间的关系来计算, 而不是以实际问题的状态来指定。相容的初值往往很难确定, 上述方法部分基于粗略的假定, 希望随着求解的进行可以快速进入一种稳定状态, 从而任何粗略的初始误差都能快速地被抑制下来; 而另一些方法只是求解了部分变量的固定初值或证明了初始相容性, 对自由度范围内需要初始化的变量却没有明确如何选择。很显然, 不可能对所有的变量都进行初始化。因此, 需要对 DAEs 进行分析, 确定哪些变量是自由变量, 需要进行初始化。错误地选择初始化变量可能极大地降低模型求解与仿真的效率, 甚至导致求解与仿真的失效。所以, 选择需要初始化的变量是 DAEs 求解需要解决的一个非常重要的问题。为此, 本文分析了 DAEs 初始相容性问题, 提出了一种基于 DM(Dulmage and Mendelsohn)分解的 DAEs 初始化变量选择策略, 可以有效地确定

需要初始化的变量, 避免错误的选择。

1 初始相容性问题

正如文献[11]所指出的那样, 即使问题求解不需要初始化, 阶段性的初始化也能从整体上加快求解。更重要的是, 随机地选择初始化变量常常会极大地降低 DAEs 求解和仿真的效率, 而错误地选择甚至会导致求解和仿真的失效。

1.1 初始相容性分析

Pantelides 首次从理论上提出了 DAEs 的初始相容性问题并对其进行了分析和研究^[9]。考虑如式(1)所示的 DAEs:

$$f(x, x', y, t) = 0 \quad (1)$$

这里的 x , $x' \in R^n$, $y \in R^m$, $f: G \subseteq R^n \times R^n \times R^m \times R \rightarrow R^{n+m}$ 。

定义 1: 若初始条件集 (x_0, x'_0, y_0) 在 t_0 时刻满足式(1), 即:

$$f(x_0, x'_0, y_0, t_0) = 0 \quad (2)$$

则该条件集是相容的。

需要注意的是这里的“初始条件”是指向量 (x_0, x'_0, y_0) 而不是简单的 (x_0, y_0) , 因为一般情况下, 在初始时刻 t_0 关于式(1)的 DAEs 能得到的信息实际上可能包含了向量 x'_0 的元素。比如, 从一个平衡位置开始可以用 $x'_0 = 0$ 表示, 通过求解式(2)可以确定 x_0 和 y_0 , 并不需要考虑式(1)关于 x' 的线性性质。

但式(2)并不总是能满足相容性。对原始方程的部分或全部进行微分, 得到的新方程也必须满足初始条件, 但这并不一定会给向量 (x_0, x'_0, y_0) 提供更多的约束, 因为微分也会引入新的变量(x' 和 y 的时间导数), 并且可能正好出现这种情况, 那就是新方程正好能满足初始条件所有可能的值, 以及新变量经过适当选择的值。下面 2 个例子可以很好地说明以上的问题。

例 1 原始 DAEs 如下:

$$\begin{cases} x' = x + y \\ 0 = x + 2y + a(t) \end{cases} \quad (3)$$

这里 $a(t)$ 是一个给定的连续可微的时间函数。对这个系统中某一个方程或所有两个方程进行微分, 都不能得到更多有用的信息。比如, 考虑对第 2 个方程进行微分, 可以得到下式:

$$0 = x' + 2y' + a'(t) \quad (4)$$

为新引入的变量 y'_0 选择 $-(x'_0 + a'(t))/2$ 的取值, 则变量 x' 的所有初值都可以满足上式。因此上式也使得初始条件 (x_0, x'_0, y_0) 在时刻 t_0 能满足原始方程系统。也就是说, 在式 (4) 中选择 $y'_0 = -(x'_0 + a'(t))/2$, 则如果给定 x'_0 的值, 就可以通过求解方程 (3) 得到 x_0 和 y_0 的值, 即:

$$\begin{cases} x'_0 = x_0 + y_0 \\ 0 = x_0 + 2y_0 + a(t_0) \end{cases}$$

因此, 在这种情况下就没有对向量 (x_0, x'_0, y_0) 作更多的约束, 或者说没有出现新的约束条件需要满足, 系统就能满足相容初始化的要求。

但也可能出现另一种情况, 那就是经过微分后, 出现了新的约束条件需要得到满足, 才能使系统满足相容初始化的要求, 如例 2 所示。

例 2 考虑如下的 DAEs 系统:

$$\begin{cases} x'_1 + x'_2 = a(t) \\ x_1 + x_2^2 = b(t) \end{cases}$$

这里 $a(t)$ 和 $b(t)$ 都是连续可微的时间函数。对第 2 个方程进行关于时间的微分后可以得到一个方程, 初始条件 $(x_{1_0}, x_{2_0}, x'_{1_0}, x'_{2_0})$ 必须要满足这个新的方程, 即:

$$x'_1 + 2x_2x'_2 = b'(t)$$

由于上式没有出现新的变量, 因此这个新得到的方程就是一个新的约束条件, 初始条件 $(x_{1_0}, x_{2_0}, x'_{1_0}, x'_{2_0})$ 必须满足这个新的方程, 才能使系统满足初始相容性的要求。

为便于讨论, 可以将一般形式的 DAEs 写成如下形式:

$$Fy = f(t, y, y', \dots) \quad (5)$$

如果 f 是其所有变量的一个联立的解析函数, 则 F 被称为是解析的。对非空实区间 T 中的 t 来说, 式 (5) 的一个解就是一个函数 $y(t)$, 该函数对 T 中的所有 t 满足 $f(t, y(t), y'(t), \dots) = 0$ 。

显然, 式 (5) 的 DAEs 需要解决的一个基本问题就是找出相容的点。如果将出现在 f 中的 $y_j, y'_j, \dots$ 看成是由 N 个独立变量构成的向量 Y , 则 f 就可以定义在 $N+1$ 维空间 (t, Y) 的某个区域中, 每一个解就定义了这个区域中一条显著的路径。这个区域中所有这些路径的并集就构成了一个流形 M (Manifold), 并且有一个解正好穿过 M 上的每一个点。定义自由度 (Degree of Freedom, DF) 这个概念为可以赋给任意初值的变量个数, 用 d 来表示, 则 M 通过了固定 t 的特定部分的维数, 也就是维度 $\dim(M) - 1$, 就是这个 DAEs 的自由度。如果 (t, Y) 中的每一个 $f=0$ 都在 M 上, 则这个 DAEs 就是一个隐式 ODEs, 但并不是 (t, Y) 中的每一个 $f=0$ 都在 M 上, 这就是初始相容性问题^[3]。

例 3 原始的 DAEs 如下:

$$\begin{cases} x = g(t), \\ y = x', \\ z = y'. \end{cases} \quad (6)$$

这里的 g 是一个给定的平滑函数, $f = (x - g(t), y - x', z - y')^T = 0$ 则定义在一个 (t, Y) $x, y, z = (t, x', y, y', z)$ 的空间中。简单地计算一下方程和变量的数量, 可以得出自由度 $d = 2$ 。但实际上只有一条解路径存在, 也就是 $x = g(t)$, $y = g'(t)$, $z = g''(t)$, 所以 $d = 0$ 。大多数关于 (t, Y) 满足 $f = 0$ 的解都是不相容的。如果给式 (6) 的第一个方程增加一个 x' 的方程, 则 $f = (x - g(t), x' - g'(t), y - x', z - y')^T = 0$ 而 (t, Y) 不变, 所以可以得到一个 $d = 1$ 的系统; 反之, 如果给第 2 个方程增加一个 y' 的方程, 则 f 变为 $f = (x - g(t), y - x', y' - x'', z - y')^T = 0$, (t, Y) 变为 $(t, x, x', x'', y, y', z)$, 所以可以得到 $d = 2$ 。上述几种情况实际上都处于同一个空间, 未经调整的 DAEs 求解也不需要初值; 而对第 1 种调整, 要获得一个唯一的解, 就需要给定 x 在初始时刻 $t = t_0$ 的初值; 对第 2 种调整, 就需要指定 x 和 y 在 $t = t_0$ 时刻的初值。

所以, 相容初始化条件的概念对 DAEs 非常重

要。可以将式(5)的一个相容初始点定义成一个标量 τ , 以及一个用索引 (j, l) 在有限集 J 上检索的标量 ξ_{jl} 的集合, 使得 $t = \tau$ 的邻域存在式(5)的一个唯一解, 这里 x_j 的第 l 个导数对每一个 J 中 (j, l) 的在 $t = \tau$ 处取值为 $\xi_{jl}^{[15]}$ 。

1.2 初始化变量选择

DAEs 的相容初始化条件经过验证, 固定的初值和自由度都得到确定后, 还有一个非常重要地问题需要解决, 那就初值变量的选择问题, 这里可以通过一个例子来加以说明。

例 4 一个简单的 DAEs 如下:

$$\begin{cases} f_1(x'_1, x'_2) = 0, \\ f_2(x_2) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

这里 x'_1 和 x'_2 是 x_1 和 x_2 关于时间的导数。

式(7)表示的 DAEs 包含了一个微分方程和一个代数方程。出现一个微分方程暗示这个系统只有一个动态自由度, 只需要为一个变量赋给初值。但事实上, 微分方程的数量和动态自由度的值只在特定的系统中才匹配。即使是这样, 假定式(7)只需要一个初始条件, 那么该给哪一个变量指定初值呢? 对这样一个小型的系统, 很明显不可能将初始条件指定给 x_2 , 因为 x_2 的值已经被式(7)的第 2 个方程确定了; 式(7)也没有显式地出现变量 x_1 , 因此需要指定初值的只有 x'_1 或 x'_2 ; 而 x_2 已经固定, 所以最终确定需要初始化的只有 x'_1 。显然, 错误地指定初值必然会导致求解和仿真的失效。

从上述讨论可看出, DAEs 初始相容性需要解决的问题应包含 4 个方面: (1) 首先确定 DAEs 是否满足相容初始化条件; (2) 若满足相容初始化条件, 则需要确定具有固定初值的变量及其初值; (3) 确定 DAEs 的自由度, 也就是需要指定初值的变量个数; (4) 在确定自由度的基础上, 分析哪些变量可以指定初值, 合理地选择需要初始化的变量。

当然, 不是所有的 DAEs 都同时存在上述 4 个问题, 有的可能没有固定初值的变量, 有的甚至自由度为 0。前 3 个问题可以通过结构化分析解决,

在系统结构化分析过程中完成, 这也是大多数初始相容性研究的重点, 而且大多数关于初始相容性的研究也只解决了前 3 个问题。对于最后一个问题, 则还需进一步分析变量与方程之间的关系才能确定。本文将使用 DM 分解的方法来解决这个问题。

2 DM 分解

DM 分解方法根据一个方程系统的简单二部图的最大匹配, 可以规范化地将该系统分解为 3 个有明显区别的部分, 分别是过约束的部分, 欠约束的部分和完全约束的部分^[16]。值得注意的是, 虽然每一个简单二部图都可能存在多个最大匹配, 但从本质上来讲, DM 分解考虑了简单二部图所有的最大匹配。经过 DM 分解后, 得到的过约束部分主要由所有可能的最大匹配都未曾包含(也可以称为暴露)的方程子集确定。类似的, 得到的欠约束部分主要由所有可能的最大匹配都未曾包含的变量子集确定。为了构造这些集合, 需要对所有可能的最大匹配进行枚举, 这可以从一个未曾被匹配的节点开始, 通过寻找交替路径来完成。

为了便于操作, 可以将系统的简单二部图沿着最大匹配替换为一个有向图, 只需要从一个最大匹配 M 开始, 用有向边替换无向边。首先, 将所有被最大匹配 M 覆盖的边都用有向边替换, 这些有向边都从变量节点 V_v 指向方程节点 V_e , 而未被最大匹配 M 覆盖的边则用反方向的有向边替换。然后, 为了确定过约束的部分, 从未被最大匹配 M 覆盖的方程节点出发, 所有顺着这个方向的边都能到达的方程节点和变量节点就构成了系统的过约束部分。其次, 确定系统欠约束部分的方式与确定过约束部分的方式是对称的。因此, 采用类似的方法, 只需要从未被最大匹配 M 覆盖的变量节点出发, 所有逆着这个方向的边都能到达的变量节点和方程节点就构成了系统的欠约束部分。最后, 方程系统中剩下的节点, 包括剩下的方程节点和变量节点就构成了系统的完全约束部分。

例 5 可以用一个简单二部图表示式(8)所示

的方程系统。

$$\begin{cases} 0 = f_1(y_1), \\ 0 = f_2(y_1, y_2), \\ 0 = f_3(y_1, y_2), \\ 0 = f_4(y_2, y_3, y_4), \\ 0 = f_5(y_4, y_5), \\ 0 = f_6(y_3, y_4, y_5), \\ 0 = f_7(y_5, y_6, y_7). \end{cases} \quad (8)$$

根据该方程系统的简单二部图可以得到一个最大匹配, 如图 1 所示。

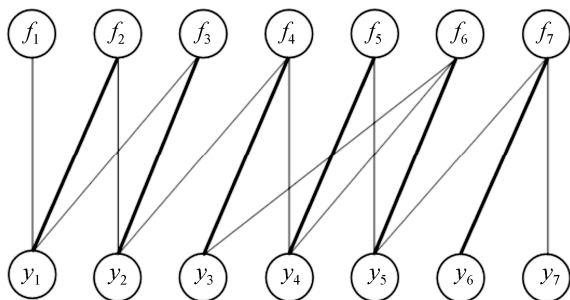


图 1 方程系统(8)的简单二部图
Fig. 1 Bipartite graph of equation (8)

然后, 从变量节点出发, 将图 1 最大匹配中的所有无向边替换为有向边, 剩下的所有无向边则用相反方向的有向边替换。得到的有向图见图 2。

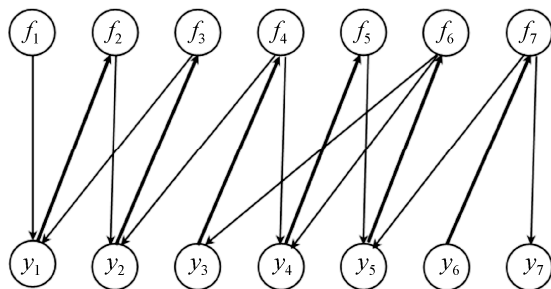


图 2 方程系统(8)的有向图
Fig. 2 Directed graph of equation (8)

图 2 中未被最大匹配覆盖的方程节点只有一个, 那就是 f_1 。从 f_1 出发, 沿着有向边 (f_1, y_1) , (y_1, f_2) , (f_2, y_2) 和 (y_2, f_3) 所能到达的所有节点就构成了式(8)所示方程系统的过约束部分, 包括方程节点 (f_1, f_2, f_3) 和变量节点 (y_1, y_2) 。图 2 中未被最大匹配覆盖的变量节点也只有一个, 那就是 y_7 。从变量节点 y_7 出发, 逆着有向边 (y_7, f_7) 和 (f_7, y_6) 所能到达的

所有节点就构成了式(8)所示方程系统的欠约束部分, 包括变量节点 (y_6, y_7) 和方程节点 (f_7) 。最后, 图 2 中剩下的节点, 包括方程节点 (f_4, f_5, f_6) 和变量节点 (y_3, y_4, y_5) 就构成了式(8)所示方程系统的完全约束部分。式(8)所示方程系统 DM 分解的最终结果如图 3 所示。

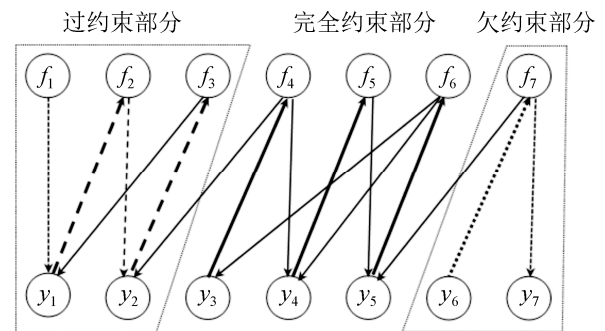


图 3 方程系统(8)的 DM 分解图
Fig. 3 Directed graph of equation (8) by DM decomposition

显然, 根据上述分析的结果, 方程系统的欠约束部分存在自由变量, 所以需要初始化的变量就位于分解后的欠约束部分中。对于 DAEs 来说, 对结构化分析后得到的方程系统进行 DM 分解, 可以找出其欠约束部分, 需要初始化的变量就存在于欠约束部分中。

3 基于 DM 分解选择初始化变量

根据前面的分析, 为了寻找 DAEs 中需要初始化的变量, 只要对结构化分析后得到增广的方程系统进行 DM 分解, 通过 DM 分解找出其中的欠约束部分即可。对 DAEs 的结构化分析, 找出了其中存在的结构化奇异子集, 并对这样的方程子集进行了微分, 通过微分引入了新的变量。根据文献[16]的分析, 这样的结构化奇异方程子集实际上就是 DAEs 中的过约束部分。而结构化分析则通过微分, 引入新的变量消除了 DAEs 中的这些结构化奇异子集, 消除了这种过约束限制。因此, 相容的 DAEs 经过结构化分析后得到的增广的方程系统必然是行满秩的, 也就不存在过约束的方程子集。对这样的增广系统进行 DM 分解后, 得到的结果中只存

在欠约束部分和完全约束部分, 或者其中之一, 不会出现过约束部分。

3.1 初始化变量选择策略

定理 1 如果式(5)表示的 DAEs 是相容的, 经过结构化分析后得到的增广系统 A 的自由度为 d 。若 $d=0$, 则对 A 进行 DM 分解后, 只存在完全约束部分; 若 $d>0$, 则对 A 进行 DM 分解后, 必然存在欠约束部分。

证明: 因为式(5)表示的 DAEs 是相容的, 所以经过结构化分析得到的增广方程系统 A 必然是行满秩的, 不存在过约束的方程子集, 因此不存在冲突的方程。

(1) 若 A 的自由度 $d=0$, 则 A 中的方程数量与变量的数量相等, 所以必然存在一个关于方程节点的完全匹配覆盖了所有方程节点和变量节点。因此 A 经过 DM 分解后不存在暴露的方程节点或变量节点, 这样的方程系统显然是完全约束的;

(2) 若 A 的自由度 $d>0$, 则 A 中的方程数量少于变量的数量, 所以必然存在一个关于方程节点的完全匹配覆盖了所有方程节点和部分变量节点。因此 A 经过 DM 分解后不存在暴露的方程节点, 但存在暴露的变量节点。根据 DM 分解的过程, 从暴露的变量节点出发, 必然可以得到增广系统 A 的欠约束部分。

综上, 定理 1 得证。

如果相容 DAEs 进行结构化分析后得到的是一个自由度 $d=0$ 的增广系统, 显然就不会存在过约束部分, 也就不会有需要初始化的变量, 因而也就不需要进行 DM 分解了; 而如果得到的是一个自由度 $d>0$ 增广系统, 则需要初始化的变量就存在于 DM 分解后的欠约束部分中。

所以, 根据定理 1 可以得出 DAEs 的初始化变量选择策略: 首先确定结构化分析后得到的增广系统的自由度 d , 若 $d>0$ 则进行 DM 分解; 然后根据分解的结果确定需要初始化的变量。

3.2 初始化变量选择实例与分析

这里用一个简单的实例展示基于 DM 分解初始化变量选择过程。

例 6 对简单的物理摆进行建模, 可以得到一个 3-指标的 DAEs 系统, 如下式所示:

$$\begin{cases} x'' - 2x\lambda = 0, \\ y'' - 2y\lambda - g = 0, \\ x^2 + y^2 - L^2 = 0. \end{cases} \quad (9)$$

对式(9)进行结构化分析可以得到一个增广的方程系统, 如下式所示:

$$\begin{cases} f_1: x'' - 2x\lambda = 0, \\ f_2: y'' - 2y\lambda - g = 0, \\ f_3: x^2 + y^2 - L^2 = 0, \\ f_4: xx' + yy' = 0, \\ f_5: x'^2 + xx'' + y'^2 + yy'' = 0. \end{cases} \quad (10)$$

这是一个 5 个方程 $\{f_1, f_2, f_3, f_4, f_5\}$ 和 7 个变量 $\{x, x', x'', y, y', y'', \lambda\}$ 构成的增广系统, 自由度 $d=2>0$, 需要对 2 个变量进行初始化。所以, 需要使用 DM 分解来划分这个增广的方程系统, 然后根据分解的结果来确定需要初始化的变量。

根据式(10)所示的增广系统可以得到由方程节点和变量节点构成的简单二部图, 如图 4 所示。在图 4 中可以得到该系统的简单二部图关于方程节点 $\{f_1, f_2, f_3, f_4, f_5\}$ 的一个最大匹配 $M=\{(f_1, x''), (f_2, y), (f_3, x), (f_4, x'), (f_5, y')\}$, 在图 4 中用粗线进行了标识。

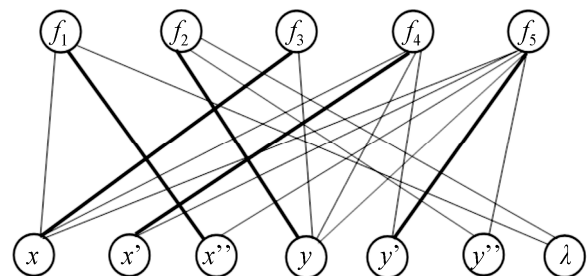


图 4 增广系统(10)的简单二部图
Fig. 4 Bipartite graph of augmented system (10)

为了找出需要初始化的变量, 就需要找出增广系统中欠约束的部分, 因此对图 4 进行 DM 分解。

首先将图 4 转换为一个有向图, 将 M 中所有的匹配边替换为从方程节点指向变量节点的有向边, 剩余的边则替换为反向的有向边, 如图 5 所示。

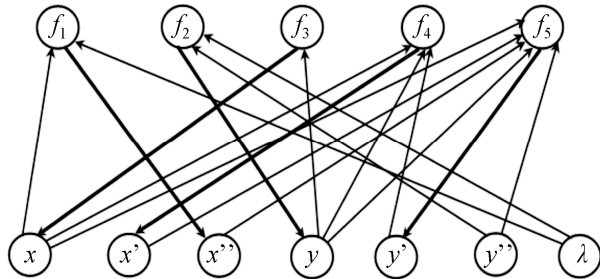


图 5 增广系统(10)的有向图

Fig. 5 Directed graph of augmented system (10)

从图 5 可以得到, 未被最大匹配 M 覆盖的变量节点包括 y'' 和 λ , 分别从这两个变量节点出发, 沿着有向边的方向所能到达的所有方程节点和变量节点就构成了这个增广的方程系统的欠约束部分。从变量节点 y'' 出发, 沿着有向边可以得到一个变量节点集 $V_{v1} = \{x, x', x'', y, y', y''\}$; 从变量节点 λ 出发, 沿着有向边可以得到另一个变量节点集 $V_{v2} = \{x, x', x'', y, y', \lambda\}$ 。从变量节点 y'' 和 λ 通过有向边都能到达所有的方程节点, 因此整个增广方程系统是一个欠约束系统。

根据分析的结果, 可以有效地选择需要初始化的变量。由于变量节点 y'' 和 λ 彼此不可达, 因此变量节点集 V_{v1} 和 V_{v2} 关于这个 DAEs 的变量初始化是互补的; 而同一个变量节点集中的变量由于是可达的, 因此关于变量的初始化是互斥的, 即同一个变量节点集中的变量不应同时被选中作为初始化的变量。而 $d=2$, 所以需要初始化的变量应该分别从这两个互补的变量节点集各选一个。显然, 变量 x 和 y 始终位于同一个变量节点集中, 所以这两个变量不应同时被选中, 这也正好说明了方程 f_3 的约束情况。

最后, 可以得到需要初始化的变量应该从 $\{x, \lambda\}, \{x', \lambda\}, \{x'', \lambda\}, \{y, \lambda\}, \{y', \lambda\}, \{y'', \lambda\}$ 这六组中选择, 其他组合都是错误的, 必然会导致求解和仿真的失效。分析过程与最终结果见表 1。

表 1 初始化变量选择

Tab. 1 Selection of initialization variables

暴露的变量节点	可达的变量节点	可选变量组合($d=2$)
y''	x, x', x'', y, y', y''	$\{x, \lambda\}, \{x', \lambda\},$ $\{x'', \lambda\}, \{y, \lambda\},$ $\{y', \lambda\}, \{y'', \lambda\}$
λ	$x, x', x'', y, y', \lambda$	$\{x, \lambda\}, \{x', \lambda\},$ $\{x'', \lambda\}, \{y, \lambda\},$ $\{y', \lambda\}, \{y'', \lambda\}$

从例 6 的分析过程和得到的结果可以看出, 采用 DM 分解的策略对 DAEs 结构化分析后得到的增广系统进行处理, 可以有效地确定需要进行初始化的变量, 避免选择错误的变量而导致 DAEs 系统求解和仿真的失效。简单地分析例 6 的初始化变量选择过程可以看出, 这个增广的方程系统需要初始化的变量有 2 个, 如果不加考虑和分析, 从 7 个变量中选择 2 个进行初始化, 可能的选择有 $7 \times 6 = 42$ 组, 这其中必然有许多是错误的。采用 DM 分解的策略, 可以确定需要进行初始化的变量只能从上述 6 组中选择, 极大地降低了选择地范围, 更有效的避免了错误的选择。最后需要说明的是, 尽管 DAEs 系统的二部图关于方程节点集的完全匹配不是唯一的, 但根据不同完全匹配得到的结果并不会影响对初始化变量的选择。

4 结论

求解 DAEs 首先要解决初始相容性的问题, 通过结构化分析可以有效地验证其是否满足相容初始化条件, 然后确定初值固定的变量及其初值, 以及需要初始化的变量个数, 最后还需要选择合适的变量赋给初值。当然, 并不是所有的 DAEs 都同时存在这 4 个问题, 有的 DAEs 可能没有固定初值的变量, 有的甚至不需要对变量进行初始化。前 3 个问题都可以通过对 DAEs 进行结构化分析来解决, 但如何选择合适的变量进行初始化则需要进一步的分析。本文提出了一种基于 DM 分解的方法来解决这个问题。通过 DM 分解, 将 DAEs 结构化分析后得到的增广系统分解为完全约束部分和欠约束部分, 然后对欠约束部分变量进行分析, 可以快速确定需要初始化的变量, 避免了对初始化变量错误的选择。

参考文献:

- [1] Otter M. Multi-domain Modeling and Simulation[M]. Encyclopedia of Systems and Control. London: Springer London, 2015: 805-816.
- [2] Burge M, Gerdts M. A Survey on Numerical Methods for the Simulation of Initial Value Problems with sDAEs [M]. Surveys in Differential-Algebraic Equations IV. Springer International Publishing, 2017.
- [3] Pryce J D. Solving high-index DAEs by Taylor series[J]. Numerical Algorithms (S1017-1398), 1998, 19(1/4): 195-211.
- [4] 唐卷, 杨文强, 吴文渊, 等. 微分代数系统中分块快速指标约简的启发式算法[J]. 四川大学学报 (工程科学版), 2014, 46(4): 67-74.
Tang Juan, Yang Wenqiang, Wu Wenyuan, et al. A Heuristic Algorithm for Block Fast Index Reduction in Differential Algebraic Systems[J]. Journal of Sichuan University (Engineering Science Edition), 2014, 46(4): 67-74.
- [5] Qin Xiaolin, Tang Juan, Feng Yong, et al. Efficient index reduction algorithm for large scale systems of differential algebraic equations[J]. Applied Mathematics and Computation (S0096-3003), 2016, 277(3): 10-22.
- [6] Höger C. Faster Structural Analysis of Differential-Algebraic Equations by Graph Compression. IFAC-PapersOnLine (S2405-8963), 2015, 48(1): 135-140.
- [7] Scholz L, Steinbrecher A. Regularization of DAEs based on the Signature method[J]. Bit Numerical Mathematics (S0006-3835), 2016, 56(1): 319-340.
- [8] Scholz L, Steinbrecher A. Structural-algebraic regularization for coupled systems of DAEs[J]. BIT Numerical Mathematics (S0006-3835), 2016, 56(2): 777-804.
- [9] Pantelides C. The consistent initialization of differential-algebraic systems[J]. Siam Journal on Scientific Computing (S1064-8275), 1988, 9(2): 213-231.
- [10] Mattsson S E, Derlind G. Index reduction in differential-algebraic equations using dummy derivatives[J]. Siam Journal on Scientific Computing (S1064-8275), 1993, 14(3): 677-692.
- [11] Safdarnejad S M, Hedengren J D, Lewis N R, et al. Initialization strategies for optimization of dynamic systems[J]. Computers & Chemical Engineering (S0098-1354), 2015, 78(4): 39-50.
- [12] 李光远, 冯勇. 微分代数系统结构化分析[J]. 控制理论与应用, 2017, 34(8): 1019-1027.
Li Guangyuan, Feng Yong. Structural analysis for differential algebraic systems[J]. Control Theory & Applications, 2017, 34(8): 1019-1027.
- [13] Thota S. Initial value problems for system of differential-algebraic equations in Maple[J]. BMC Research Notes (S1756-0500), 2018, 11(1).
- [14] Estévez Schwarz, Diana, Lamour, René. A new approach for computing consistent initial values and Taylor coefficients for DAEs using projector-based constrained optimization[J]. Numerical Algorithms (S1017-1398), 2017, 78(2): 355-377.
- [15] Pryce J D. A simple structural analysis method for DAEs[J]. BIT Numerical Mathematics (S0006-3835), 2001, 41(2): 364-394.
- [16] Dulmage A L, Mendelsohn N S. Coverings of bipartite graphs[J]. Canadian Journal of Mathematics (S1496-4279), 1958, 10(4): 516-534.