

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ РЕШЕНИЯ ВЫРОЖДЕННЫХ СИСТЕМ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ НА ПРИМЕРЕ ИДЕНТИФИКАЦИИ ВИРИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ РЕАЛЬНОГО ГАЗА¹⁾

© 2024 г. А. Г. Викулов^{1,*}

¹125993 Москва, Волоколамское шоссе, 4, Московский авиационный ин-т, Россия
*e-mail: vikulovag81@gmail.com

Поступила в редакцию 06.06.2023 г.
Переработанный вариант 05.03.2024 г.
Принята к публикации 05.04.2024 г.

Для проведения термодинамического расчета цикла в двухфазной области необходимо уравнение состояния рабочего тела, в качестве которого используется вириальное уравнение с неизвестными функциями температуры. Построена вырожденная система алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов, которые являются значениями вириальных функций на дискретной температурной сетке. На основе метода регуляризации разработан вариационно-итерационный алгоритм решения вырожденной системы уравнений. Проведен вычислительный эксперимент, подтверждающий работоспособность метода. Библ. 12. Фиг. 8.

Ключевые слова: система алгебраических уравнений, вырожденная матрица, метод регуляризации, уравнение состояния, реальный газ, вириалькоэффициенты.

DOI: 10.31857/S0044466924070024, **EDN:** xjbxff

ВВЕДЕНИЕ

Задачи математической физики формулируются в виде дифференциальных уравнений в частных производных. При их решении вариационными методами получают системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ):

$$Au = f \tag{1}$$

с квадратной матрицей A порядка n в левой, вектором f в правой частях и искомым вектором u . Кроме того, постановки многих физических задач имеют вид СЛАУ. Особую трудность представляют собой СЛАУ с большим количеством неизвестных. Во-первых, появляются вычислительные ошибки округления, во-вторых, постановка задачи может приводить к СЛАУ с матрицей в левой части, близкой к вырожденной.

Из-за ошибок округления в левой части уравнения (1) вместо матрицы A появляется матрица $A + \Delta$, в правой части вместо вектора f — вектор $f + \delta$. Тогда вместо уравнения (1) получается уравнение (см. [1])

$$(A + \Delta)u = f + \delta \Leftrightarrow A_\delta u_\delta = f_\delta, \tag{2}$$

где $A_\delta = A + \delta$ — приближенная матрица в левой части, $f_\delta = f + \delta$ — приближенный вектор в правой части, u_δ — приближенное решение. Ошибки округления тем меньше, чем меньше число обусловленности матрицы A . Если определитель матрицы A очень мал, то матрица близка к вырожденной. В этом случае возникает задача нахождения единственного решения, которая относится к существенно некорректным и требует регуляризации [2]. Если же определитель матрицы A заметно больше нуля, то решение системы (2) единственное, но для приближенно заданного вектора в правой части

¹⁾Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (код проекта 23-49-10060).

и, возможно, матрицы в левой части задача нахождения приближенного решения может быть плохо обусловленной — решение неустойчиво — и также требовать регуляризации.

В [3] разработана методика регуляризации решения плохо обусловленных и вырожденных СЛАУ на основе интервальных оценок. Наличие погрешностей в исходных данных и ошибок округления приводит к тому, что точное решение систем уравнений с неточными правой и левой частями может не иметь смысла. Интервальные оценки решения позволяют избежать этой трудности, так как гарантируют принадлежность решения определенному множеству. Задача решается методом регуляризации путем минимизации сглаживающего функционала на заданных интервалах.

В [4], [5] сформулированы условия регуляризуемости сдвигом СЛАУ (1) с комплексной квадратной матрицей порядка n в левой, комплексным вектором $f \in C^n$ в правой частях и искомым вектором $u \in C^n$. В [6], [7] эти условия дополнены новыми, справедливость которых доказана в виде теоремы со вспомогательными леммами. Семейство СЛАУ [6]

$$(A + \lambda B)u = f, \quad (3)$$

где B — произвольная квадратная матрица порядка n с комплексными элементами, $\lambda \in C$ — комплексный параметр, является регуляризацией сдвигом системы (1), если СЛАУ (2) имеет единственное решение u_λ при достаточно малых $|\lambda| > 0$ и решение u_λ сходится при $\lambda \rightarrow 0$ к некоторому решению СЛАУ (1) в случае ее разрешимости. Если матрица A обратима, то и матрица $A + \lambda B$ обратима для любой матрицы B и достаточно малых $|\lambda| > 0$, и для точного решения u СЛАУ (1) справедлива оценка [6]

$$\|u_\lambda - u\| = O(\lambda). \quad (4)$$

Если матрица A необратима, то не при всех $f \in C^n$ СЛАУ (1) разрешима, и в случае разрешимости СЛАУ (1) и однозначной разрешимости СЛАУ (3) может не иметь места оценка (4). Поэтому в [3]— [6] выделяются пары матриц A , B , для которых семейство СЛАУ (2) является регуляризацией сдвигом системы (1).

На основе метода регуляризации [2] разработаны прикладные методики нахождения приближенного решения плохо обусловленных и вырожденных СЛАУ, возникающих при формулировке задач геофизики [8, 9].

В настоящей работе на основе метода регуляризации разработана итерационно-вариационная методика решения вырожденных систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений. Она применена для идентификации вириального уравнения состояния реального газа, коэффициенты которого неизвестны.

Для вычисления работы и изменения энтропии в термодинамическом процессе двухфазной смеси из жидкости и влажного пара необходимо уравнение состояния, связывающее между собой давление, удельный объем и температуру, или экспериментальные данные, аппроксимируемые приближенной зависимостью между параметрами состояния на ограниченных интервалах. Зная изменение энтропии в термодинамическом процессе, по hs -диаграмме влажного пара данного вещества можно найти изменение энтальпии в этом процессе.

Существование критической точки, в которой равны удельные объемы жидкой v' и газовой v'' фаз двухфазной смеси на нижней и верхней пограничных кривых [10],

$$v = v'' = v_{cr},$$

говорит о непрерывности газообразного и жидкого состояний вещества в отличие от твердой фазы, имеющей принципиальные различия с газом и жидкостью. Математическое выражение этого факта заключается в возможности описания жидкой и газовой фаз единым уравнением состояния.

Диаграммы состояния реального вещества в газообразной и жидкой фазах заметно отличаются от диаграмм состояния идеального газа, поэтому не описываются уравнением состояния идеального газа. Окончательного ответа на вопрос об уравнении состояния реального газа до сих пор нет. Однако существуют приближения, с той или иной точностью описывающие термодинамические процессы реального вещества.

Промежуточным приближением между уравнениями состояния идеального и реального газов является уравнение Ван-дер-Ваальса. Более точное приближение к уравнению состояния реального газа получено методами статистической физики и носит название вириального уравнения [10]:

$$pv = RT \left(1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n+1} \frac{\beta_n}{v^n} \right), \quad (5)$$

где $\beta_n = \beta_n(T)$ — вириальные коэффициенты, являющиеся функциями только температуры. Чем больше удельный объем, тем меньшее количество коэффициентов необходимо учитывать в вириальном уравнении. При $v \rightarrow \infty$ уравнение (5) совпадает с уравнением состояния идеального газа, и вириальные коэффициенты не требуются.

Вириальные функции $v_n(T)$ определяются экспериментально, а задача их вычисления имеет характер обратной. Так как функции $v_n(T)$ зависят только от температуры, то при постоянном давлении $p = p_c = \text{const}$ удельный объем является функцией только температуры. Возьмем при постоянном давлении p_c частичную сумму коэффициентов, ограниченную N первыми слагаемыми вириального уравнения (5):

$$p_c v(p_c, T) = RT \left(1 - \sum_{n=1}^N \frac{n}{n+1} \frac{\beta_n(T)}{v^n(T)} \right). \quad (6)$$

Для определения N функций $\beta_n(T)$ необходимы N линейно независимых режимов $v_c(T) = v(p_c, T)$, где $n = 1, 2, \dots, N$; $c = 1, 2, \dots, N$. Линейная независимость режимов проверяется по значению определителя Грама, который должен быть отличен от нуля [1]:

$$\det \begin{pmatrix} (v_1, v_1) & (v_1, v_2) & \dots & (v_1, v_N) \\ (v_2, v_1) & (v_2, v_2) & \dots & (v_2, v_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (v_N, v_1) & (v_N, v_2) & \dots & (v_N, v_N) \end{pmatrix} \neq 0, \quad (7)$$

где скалярные произведения функций $v_c(T)$ вычисляются в гильбертовом пространстве квадратично интегрируемых функций $L_2(T_{\min}, T_{\max})$:

$$(v_c, v_n)_{L_2} = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} v_c(T) v_n(T) dT.$$

Перепишем вириальное уравнение (6) в виде системы алгебраических уравнений относительно функций $\beta_n(T)$:

$$\sum_{n=1}^N \frac{n}{n+1} \frac{\beta_n(T)}{v^n(T)} = 1 - \frac{p_c v_c(T)}{RT}, \quad c = 1, 2, \dots, N.$$

В течение термодинамического процесса температура меняется во времени. Введем временную сетку, и определим значения температуры от времени в точках этой сетки:

$$T_j = T(\tau_j), \quad j = 0, 1, 2, \dots, M. \quad (8)$$

Для фиксированного значения температуры удельный объем постоянен:

$$v_{cj} = v_c(T_j) = \text{const}.$$

Поэтому для каждого значения температуры (8) получается система линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов $\beta_{nj} = \beta_n(T_j)$:

$$\sum_{n=1}^N \frac{n}{n+1} \frac{\beta_n(T_j)}{v^n(T_j)} = 1 - \frac{p_c v_c(T_j)}{RT_j}, \quad c = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, M,$$

или

$$\sum_{n=1}^N \frac{n}{n+1} \frac{\beta_{nj}}{v_j^n} = 1 - \frac{p_c v_{cj}}{RT_j}, \quad c = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, M. \quad (9)$$

Поскольку все коэффициенты при искомым β_{nj} имеют не нулевое значение, ранг основной матрицы в системе (9) равен рангу расширенной матрицы, и, по теореме Кронекера—Капелли, эта система совместна. Ранг матрицы равен числу неизвестных N , следовательно, система имеет единственное решение [11]. Однако в силу специфики задач идентификации, связанной с использованием экспериментальной информации в правой — а в данном случае и в левой — частях, определитель основной матрицы может быть очень мал, что при наличии ошибок вычисления может затруднить решение системы уравнений стандартными методами.

Для насыщенного пара давление однозначно определяется температурой $p = p(T)$. Так как функции $\beta_n(T)$ зависят только от температуры, то, если исключить степень сухости, удельный объем будет только функцией температуры: $v = v[p(T), T] = v(T)$. Этого можно добиться, рассматривая состояние жидкости или пара на линии насыщения. Поэтому будем считать удельный объем равным удельному объему сухого насыщенного пара на линии насыщения: $v(T) = v''(T)$. Уравнение состояния с частичной суммой приобретает вид:

$$p(T)v[p(T), T] = RT \left(1 - \sum_{n=1}^N \frac{n}{n+1} \frac{\beta_n(T)}{v^n(T)} \right).$$

На введенной временной сетке для фиксированного значения температуры удельный объем постоянен:

$$v_j = v[p(T_j), T_j] = v(T_j) = v'_j + v''_j = \text{const}, \quad j = 1, 2, \dots, M.$$

а совокупность коэффициентов ВЕТА_n не изменяется в зависимости от температуры — каждый коэффициент однозначно определен единственным значением температуры.

Отсюда следует, что в области насыщенного пара система линейных алгебраических уравнений является общей для всех температур, и коэффициенты β_n не зависят от температур:

$$\sum_{n=1}^M \frac{n}{n+1} \frac{\beta_n}{v^n[p(T_j), T_j]} = 1 - \frac{p(T_j)v[p(T_j), T_j]}{RT_j}, \quad j = 1, 2, \dots, M,$$

или

$$\sum_{n=1}^M \frac{n}{n+1} \frac{\beta_n}{v_j^n} = 1 - \frac{p_j v_j}{RT_j}, \quad j = 1, 2, \dots, M. \quad (10)$$

В векторной форме система (10) принимает вид уравнения (1), если положить

$$A = \{A_{jn}\} = \left\{ \frac{n}{n+1} \frac{\beta_n}{v_j^n} \right\}, \quad u = \{\beta_j\}, \quad f = \left\{ 1 - \frac{p_j v_j}{RT_j} \right\}, \quad j = 1, 2, \dots, M, \quad n = 1, 2, \dots, M.$$

Для определения M коэффициентов β_j необходимы M линейно независимых измерений $v_j = v[p(T_j)]$, где $j = 1, 2, \dots, M$. Линейная независимость измерений проверяется по значению определителя Грама (7), который должен быть отличен от нуля [1]. Скалярные произведения функций $v(T_j)$ вычисляются в гильбертовом пространстве квадратично интегрируемых функций $L_2(T_{\min}, T_{\max})$:

$$(v_j, v_n)_{L_2} = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} v_j v_n dT = v_j v_n (T_{\max} - T_{\min}) = v(T_j) v(T_n) (T_{\max} - T_{\min});$$

$$j = 1, 2, \dots, M; \quad n = 1, 2, \dots, M.$$

1. РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ИДЕНТИФИКАЦИИ

В практических задачах в силу погрешности исходных данных вместо точного значения правой части f уравнения (1), где $f \in F$, $u \in U$; $F, U \in R$ ($F = R^n$, $U = R^m$, m не обязательно равно n) — метрические пространства, — известно ее приближенное значение f_δ , которое может принадлежать множеству $R_A = AD_A$, не являющемуся компактом. В этих случаях нельзя строить приближенное решение уравнения (7) по формуле $u_\delta = A^{-1}f_\delta$, так как обратный оператор $A^{-1}f_\delta$ может быть не определен, а решение u_δ — не единственным и не принадлежать заданному компактному D_A . По этой причине решение u_δ не является корректным по Тихонову, и вводится понятие квазирешения $u_\delta \in U$, а метод подбора при условии компактности множества U позволяет найти квазирешение (псевдо-решение), минимизирующее норму разности левой и правой частей [2]:

$$\rho_F = (Au_\delta, f) = \inf_{u \in U} \rho_F(Au, f).$$

Если U — компакт, то квазирешение существует для любого $f \in F$ и если, кроме того, $f \in AU$, то квазирешение $u_\delta = u$. Квазирешение может быть и не одно — в этом случае под квазирешением понимается любой элемент из множества квазирешений.

Уравнение

$$Au = f_\delta, \quad (11)$$

с приближенно заданной правой частью f_δ , принадлежащей области значений R_A оператора A , не являющейся компактом, называется существенно некорректным (существенно некорректной задачей), а его квазирешение — условно корректным по Тихонову. В существенно некорректных задачах исключается последнее из четырех условий применимости метода наименьших квадратов — условие единственности решения [1], — но остается возможность минимизации нормы разности левой и правой частей уравнения (11) и, следовательно, квадратичного функционала

$$Fu = \|Au - f_\delta\|^2.$$

Поскольку исходная система (1) может не иметь точного решения, то можно найти лишь квазирешение u_μ , принадлежащее множеству векторов Q , удовлетворяющих условию

$$\inf_{u \in U} \|Au - f\| = \mu \geq 0, \Rightarrow \|Au - f\| \leq \mu. \quad (12)$$

Для уравнения (11) с приближенно заданной правой частью квазирешение u_δ принадлежит множеству векторов Q_δ , удовлетворяющих условию

$$\inf_{u \in U} \|Au - f_\delta\| = \mu_\delta \geq 0, \Rightarrow \|Au - f_\delta\| \leq \mu_\delta. \quad (13)$$

Из неравенств треугольника

$$\begin{aligned} \|Au - f_\delta\| &\leq \|Au - f\| + \|f - f_\delta\|, \\ \|Au - f\| &\leq \|Au - f_\delta\| + \|f_\delta - f\|, \end{aligned}$$

с учетом (12), (13) следуют неравенства

$$\begin{aligned} \|Au - f_\delta\| &\leq \mu_\delta \leq \mu + \delta, \\ \|Au - f\| &\leq \mu \leq \mu_\delta + \delta, \end{aligned}$$

из которых

$$\begin{aligned} |\mu - \mu_\delta| &\leq \delta, \\ \|Au - f_\delta\| &\leq \mu_\delta + 2\delta. \end{aligned} \quad (14)$$

Пусть D_A — совокупность всех квазирешений системы (1). Нормальным относительно элемента u_μ решением (нормальным решением) системы (1) называется квазирешение u_0 с минимальной нормой $\|u_0 - u_\mu\|$ [2]:

$$\|u_0 - u_\mu\| = \inf_{u \in D_A} \|u - u_\mu\|.$$

Для любой системы вида (1) нормальное решение существует и единственно. Приближение \tilde{u}_δ к нормальному решению u_0 принадлежит множеству векторов \tilde{Q}_δ , удовлетворяющих условию (14).

Произвольный вектор \tilde{u}_δ из множества \tilde{Q}_δ неустойчив к малым изменениям правой части уравнения (11), поэтому необходимо ограничить множество \tilde{Q}_δ дополнительным условием в виде минимума стабилизирующего квадратичного функционала (стабилизатора) [2]

$$\Omega_0 = \inf_{u \in \tilde{Q}_\delta} \Omega[u].$$

Поскольку нормальное решение является квазирешением, последовательность элементов, сходящаяся к нормальному решению в пространстве U ($D_A \subset U$), одновременно сходится и в пространстве F (как, например, в методе наименьших квадратов для линейного оператора A):

$$u \rightarrow u_0, \quad Au \rightarrow Au_0 = f_0 \approx f.$$

Поэтому стабилизатор Ω выбирается в виде квадрата расстояния между элементами $u, u_0 \in D_A \subset U$:

$$\Omega(u) = \rho_U^2(u, u_0) = \|u - u_0\|^2. \quad (15)$$

Тогда по аналогии с методом наименьших квадратов вариационный метод определения приближения \tilde{u}_δ к нормальному квазирешению u_0 будет основываться на минимизации квадратичного функционала, состоящего из двух слагаемых: квадрата нормы разности левой и правой частей уравнения (11) — сходимости в пространстве F — и стабилизатора Ω в виде квадрата нормы разности приближенного и нормального квазирешений, умноженного на нормирующий множитель γ , — сходимости в пространстве U [2]:

$$Mu = \|Au - f_\delta\|^2 + \gamma\Omega(u) = \rho_F^2(Au, f_\delta) + \gamma\Omega(u), \quad (16)$$

где $\gamma > 0$ — параметр регуляризации. Параметр регуляризации однозначно определяется по уравнению, следующему из нестрогого неравенства (14) [2]:

$$\|Au(\gamma) - f_\delta\|^2 = \mu_\delta + 2\delta. \quad (17)$$

С учетом (15) квадратичный функционал (16) запишется в виде

$$\begin{aligned} Mu &= \rho_F^2(Au, f_\delta) + \gamma\rho_U^2(u, u_0) = \|Au - f_\delta\|^2 + \gamma\|u - u_0\|^2 = \\ &= (Au - f_\delta, Au - f_\delta) + \gamma(u - u_0, u - u_0) = \\ &= (Au, Au) - 2(Au, f_\delta) + (f_\delta, f_\delta) + \gamma(u, u) - 2\gamma(u, u_0) + \gamma(u_0, u_0). \end{aligned} \quad (18)$$

Пусть функционал (18) принимает минимальное значение в $\tilde{Q}_\delta \subset D_A$ для элемента u_0 . Для любого другого элемента $u \in \tilde{Q}_\delta$

$$u = u_0 + tv, \quad (19)$$

где t — произвольное действительное число, $v \in \tilde{Q}_\delta$ — произвольный элемент из множества \tilde{Q}_δ , значение функционала больше:

$$Mu = M(u_0 + tv) \geq Mu_0, \quad (20)$$

причем, равенство выполняется для элемента $u = u_0$. Вычислим значение функционала (18) с учетом выражения (19):

$$\begin{aligned} M(u_0 + tv) &= (A(u_0 + tv), A(u_0 + tv)) - 2(A(u_0 + tv), f_\delta) + (f_\delta, f_\delta) + \\ &+ \gamma((u_0 + tv), (u_0 + tv)) - 2\gamma((u_0 + tv), u_0) + \gamma(u_0, u_0) = \\ &= (A(u_0 + tv), A(u_0 + tv)) - 2(A(u_0 + tv), f_\delta) + (f_\delta, f_\delta) + \\ &+ \gamma(u_0, u_0) + 2\gamma t(u_0, v) + \gamma t^2(v, v) - 2\gamma(u_0, u_0) - 2\gamma t(v, u_0) + \gamma(u_0, u_0) = \\ &= (A(u_0 + tv), A(u_0 + tv)) - 2(A(u_0 + tv), f_\delta) + (f_\delta, f_\delta) + \gamma t^2(v, v). \end{aligned} \quad (21)$$

Для линейного оператора A

$$\begin{aligned} M(u_0 + tv) &= (Au_0 + tAv, Au_0 + tAv) - 2(Au_0 + tAv, f_\delta) + (f_\delta, f_\delta) + \gamma t^2(v, v) = \\ &= (Au_0, Au_0) + t(Au_0, Av) + t(Av, Au_0) + t^2(Av, Av) - 2(Au_0, f_\delta) - 2t(Av, f_\delta) + \\ &+ (f_\delta, f_\delta) + \gamma t^2(v, v) = (Au_0, Au_0) + 2t(Au_0, Av) + t^2(Av, Av) - 2(Au_0, f_\delta) - \\ &- 2t(Av, f_\delta) + (f_\delta, f_\delta) + \gamma t^2(v, v). \end{aligned} \quad (22)$$

Из (20) следует, что функционал Mu приобретает минимальное значение при $t = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}M(u_0 + tv) &= [2(Au_0, Av) + 2t(Av, Av) - 2(Av, f_\delta) + 2\gamma t(v, v)]_{t=0} = \\ &= 2(Au_0, Av) - 2(Av, f_\delta) = 2(Au_0 - f_\delta, Av) = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Если R_A плотно в F , то для линейного оператора A по теореме о плотности [1] следует, что единственным элементом, ортогональным к произвольному элементу $Av \in F$, является нулевой элемент:

$$Au_0 - f_\delta = 0.$$

Таким образом, минимум квадратичного функционала (18) соответствует нормальному решению уравнения (11).

Для произвольного элемента $\tilde{u}_\delta \neq u_0$, являющегося приближением к нормальному решению, параметр $t \neq 0$ и определяется из уравнения (23):

$$\begin{aligned} 2(A\tilde{u}_\delta, Av) + 2t(Av, Av) - 2(Av, f_\delta) + 2\gamma t(v, v) &= 0, \\ (A\tilde{u}_\delta, Av) + t(Av, Av) - (Av, f_\delta) + \gamma t(v, v) &= 0, \\ (A\tilde{u}_\delta - f_\delta, Av) &= -t[(Av, Av) + \gamma(v, v)], \\ (A\tilde{u}_\delta - f_\delta, Av) &= -t(\|Av\|^2 + \gamma\|v\|^2), \\ t &= -\frac{(A\tilde{u}_\delta - f_\delta, Av)}{\|Av\|^2 + \gamma\|v\|^2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Поскольку $v \in \tilde{Q}_\delta$, которое согласно (17) формируется из элементов вида $Au - f_\delta$, можно считать

$$v = A\tilde{u}_\delta - f_\delta. \quad (25)$$

Тогда из (24), (25) имеем

$$t = -\frac{(Av, v)}{\|Av\|^2 + \gamma\|v\|^2}.$$

При итерационном поиске нормального решения

$$u_{n+1} = u_n + t_n v_n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (26)$$

где

$$v_n = Au_n - f_\delta, \quad (27)$$

$$t_n = -\frac{(Av_n, v_n)}{\|Av_n\|^2 + \gamma\|v_n\|^2}, \quad (28)$$

а параметр регуляризации согласно (17) находится из условия

$$\|Au_{n+1}(\gamma) - f_\delta\|^2 = \mu_\delta + 2\delta$$

или с учетом (26), (28)

$$\begin{aligned} \left\| A \left(u_n - \frac{(Av_n, v_n)}{\|Av\|^2 + \gamma_n \|v\|^2} v_n \right) - f_\delta \right\|^2 &= \mu_\delta + 2\delta, \\ \left\| Au_n - \frac{(Av_n, v_n)}{\|Av\|^2 + \gamma_n \|v\|^2} Av_n - f_\delta \right\|^2 &= \mu_\delta + 2\delta, \\ \left\| v_n - \frac{(Av_n, v_n)}{\|Av\|^2 + \gamma_n \|v\|^2} Av_n \right\|^2 &= \mu_\delta + 2\delta, \\ \left\| \left(\|Av_n\|^2 + \gamma_n \|v_n\|^2 \right) v_n - (Av_n, v_n) Av_n \right\|^2 &= (\mu_\delta + 2\delta) \left(\|Av_n\|^2 + \gamma_n \|v_n\|^2 \right). \end{aligned} \tag{29}$$

В преобразовании (21) используется только симметрия скалярного произведения, а в преобразовании (22) — симметрия скалярного произведения и линейность оператора A , поэтому в отличие от теоремы о минимуме квадратичного функционала [1], на которой основывается стандартная группа прямых вариационных методов, не требуется положительность и, тем более, положительная определенность оператора A . Поскольку симметрия является свойством скалярного произведения, то методика (26)–(28) вариационно-итерационного метода регуляризации применима к любому линейному оператору A и, в частности, к линейному матричному оператору.

Если оператор A нелинеен, то производная функционала (21) равна

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} M(u_0 + tv) &= \frac{d}{dt} \left[\|A(u_0 + tv)\|^2 - 2(A(u_0 + tv), f_\delta) + (f_\delta, f_\delta) + \gamma t^2(v, v) \right]_{t=0} = \\ &= \left[\frac{d}{dt} \|A(u_0 + tv)\|^2 - 2 \frac{d}{dt} (A(u_0 + tv), f_\delta) + 2\gamma t(v, v) \right]_{t=0} = \\ &= \frac{d}{dt} (A(u_0 + tv), A(u_0 + tv))_{t=0} - 2 \frac{d}{dt} (A(u_0 + tv), f_\delta)_{t=0} = \\ &= \left(\frac{dA(u_0 + tv)}{dt} v, A(u_0 + tv) \right)_{t=0} + \left(A(u_0 + tv), \frac{dA(u_0 + tv)}{dt} v \right)_{t=0} - 2 \left(\frac{dA(u_0 + tv)}{dt} v, f_\delta \right)_{t=0} = \\ &= 2 \left(\frac{dA(u_0 + tv)}{dt} v, A(u_0 + tv) \right)_{t=0} - 2 \left(\frac{dA(u_0 + tv)}{dt} v, f_\delta \right)_{t=0} = \\ &= 2 \left(A(u_0 + tv) - f_\delta, \frac{dA(u_0 + tv)}{dt} v \right)_{t=0} = 2 \left(Au - f_\delta, \frac{dAu}{dt} v \right)_{t=0} = 0. \end{aligned} \tag{30}$$

Если R_A плотно и имеет непрерывные производные dAu/dt в F , то для нелинейного оператора A по теореме о плотности следует, что единственным элементом, ортогональным к произвольному элементу $(dAu/dt)v \in F$, является нулевой элемент

$$Au_0 - f_\delta = 0.$$

Следовательно, минимум квадратичного функционала (18) соответствует нормальному решению уравнения (11).

Для произвольного элемента $\tilde{u}_\delta \neq 0$, являющегося приближением к нормальному решению, параметр $t \neq 0$ и определяется из уравнения (30):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} M(\tilde{u}_\delta + tv) &= 2 \left(Au - f_\delta, \frac{dAu}{dt} v \right) + 2\gamma t(v, v) = 0, \\ t &= - \frac{\left(Au - f_\delta, \frac{dAu}{dt} v \right)}{\gamma(v, v)} = - \frac{\left(\frac{dA(u_0 + tv)}{dt} v, v \right)}{\gamma \|v\|^2}. \end{aligned}$$

При итерационном поиске нормального решения

$$u_{n+1} = u_n + t_n v_n, \quad n = 1, 2, \dots, \tag{31}$$

где

$$v_n = Au_n - f_\delta,$$

параметр t определяется из уравнения (30):

$$t_n = - \frac{\left(\frac{dA(u_n + t_n v_n)}{dt} v_n, v_n \right)}{\gamma_n \|v_n\|^2},$$

а параметр регуляризации согласно (17) находится из условия

$$\|A(u_n + t_n (\gamma_n) v_n) - f_\delta\|^2 = \mu_\delta + 2\delta$$

или с учетом (28)

$$\|A(u_n + t_n (\gamma_n) v_n) - f_\delta\|^2 = \mu_\delta + 2\delta. \quad (32)$$

Если оператор $A = A_\delta$ в левой части уравнения (11) задан приближенно, как и правая часть $f = f_\delta$:

$$A_\delta u = f_\delta, -$$

то полученные соотношения полностью сохраняются как для линейного, так и для нелинейного оператора A в уравнении.

Во избежание комплексных значений параметра регуляризации расстояние между функциями $u, u_0 \in D_A \subset U$ в выражении (15) стабилизатора Ω должно быть мнимым:

$$\Omega(u) = \rho_U^2(u, u_0) = i^2 \|u - u_0\|^2.$$

Тогда квадратичный функционал (13) принимает вид

$$Mu = \|Au - f_\delta\|^2 + \gamma \Omega(u) = \rho_F^2(Au, f_\delta) + i^2 \gamma \|u - u_0\|^2,$$

а в уравнениях (29), (30) параметр регуляризации γ_n умножается на i^2 . После определения действительного параметра регуляризации на каждой итерации n используется исходная форма функционала со стабилизатором (15), и все полученные уравнения сохраняются:

$$\begin{cases} \rho_U(u, u_0) = \|u - u_0\| \\ \rho_U(u, u_0) = i \|u - u_0\| \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \Omega(U) = \rho_U^2(u, u_0) = \|u - u_0\|^2 \\ \Omega(U) = \rho_U^2(u, u_0) = i^2 \|u - u_0\|^2 \end{cases},$$

где стабилизатор в мнимом метрическом пространстве U используется для вычисления действительного параметра регуляризации γ_n , а стабилизатор в действительном пространстве U — для вычисления действительного параметра итерационного процесса t_n .

2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

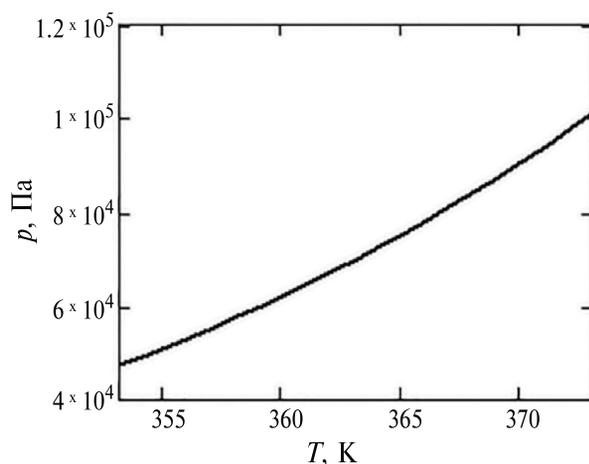
Для вычислительного эксперимента возьмем воду и водяной пар в интервале температуры от 80 до 100°C.

Давление влажного пара однозначно определяется его температурой (см. фиг. 1), а удельный объем связан со степенью сухости влажного пара соотношением [10]

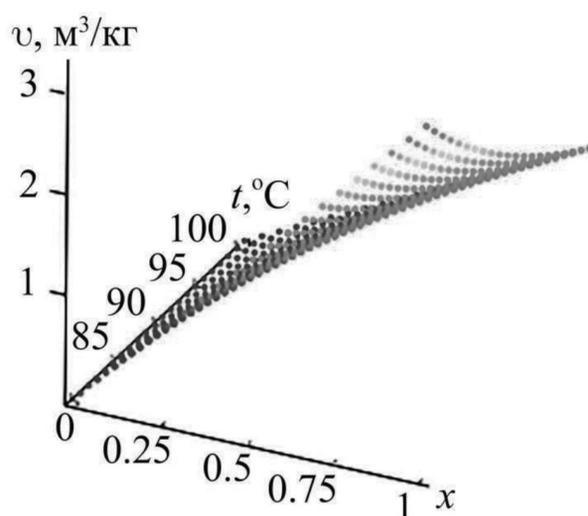
$$v = v' + x(v'' - v').$$

Поскольку удельные объемы сухого насыщенного пара и жидкости на линии насыщения также зависят от температуры, то удельный объем влажного пара является функцией температуры и степени сухости (см. фиг. 2).

Чтобы исключить степень сухости из уравнения состояния для вычисления вириальных функций, можно использовать одно из двух состояний: жидкость на линии насыщения левее критической точки при $x = 0$ (см. фиг. 3), сухой насыщенный пар на линии насыщения правее критической точки при



Фиг. 1. Распределение давления влажного пара от температуры.



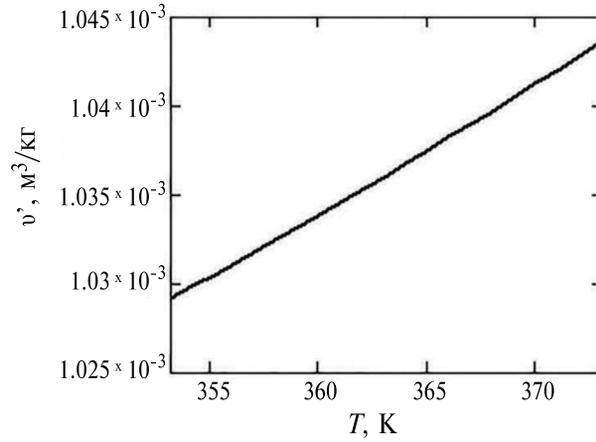
Фиг. 2. Распределение удельного объема влажного пара от температуры и степени сухости.

$x = 1$ (см. фиг. 4). Так как объем жидкости мал, удобнее производить расчеты для сухого насыщенного пара. Найденные вириальные коэффициенты будут справедливы и в области влажного пара, где изобара совпадает с изотермой.

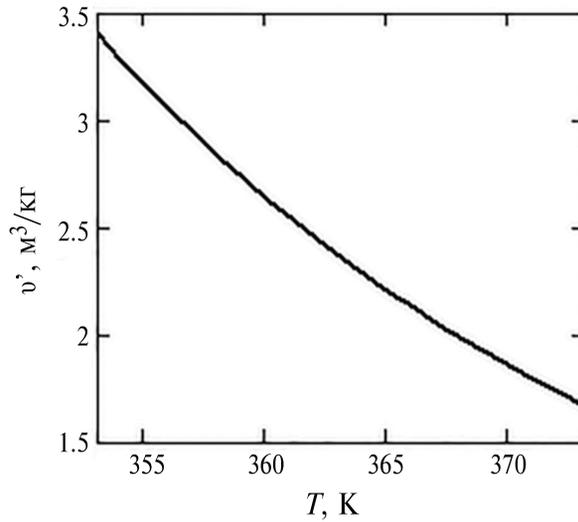
Непосредственное вычисление определителя для системы алгебраических уравнений (10) показывает, что его значение практически равно нулю, поэтому решение системы нуждается в регуляризации. Параметр регуляризации и функция итерационного процесса в зависимости от номера итерации показаны на фиг. 5, 6, а сравнение табличного распределения давления от температуры и расчетного, найденного по уравнению состояния (5), см. фиг. 7. Удовлетворительное визуальное совпадение достигается уже на третьей итерации, но с ростом числа итераций уменьшается значение невязки между расчетным и табличным распределениями.

Для вычислительного эксперимента возьмем воду и водяной пар в интервале температуры от 80 до 100°C [12]:

$$t = \begin{pmatrix} 80 & 81 & 82 & 83 & 84 & 85 & 86 & 87 & 88 & 89 & 90 \\ 91 & 92 & 93 & 94 & 95 & 96 & 97 & 98 & 99 & 100 \end{pmatrix}^T \text{ } ^\circ\text{C}.$$



Фиг. 3. Распределение удельного объема жидкости на линии насыщения от температуры.



Фиг. 4. Распределение удельного объема сухого насыщенного пара на линии насыщения от температуры.

Количество расчетных точек равно

$$M = 21.$$

Рассчитаем абсолютные температуры

$$j = 0, 1, \dots, M - 1, \quad T_j = t_j + 273.15 \text{ К.}$$

Давление влажного пара однозначно определяется его температурой (фиг. 1) [12]:

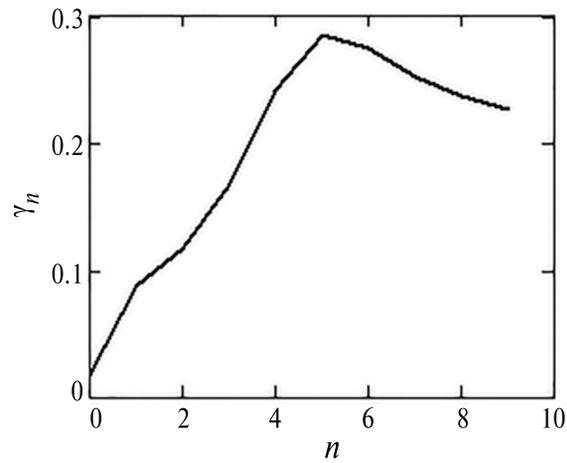
$$p = (4.7359 \ 4.9310 \ 5.1328 \ 5.3415 \ 5.5572 \ 5.7803 \ 6.0107 \ 6.2488 \ 6.4947 \ 6.7486 \ 7.0108 \\ 7.2814 \ 7.5607 \ 7.8488 \ 8.1460 \ 8.4525 \ 8.7685 \ 9.0943 \ 9.4301 \ 9.7760 \ 10.1325)^T \cdot 10^4 \text{ Па.}$$

Удельный объем связан со степенью сухости влажного пара соотношением [10]

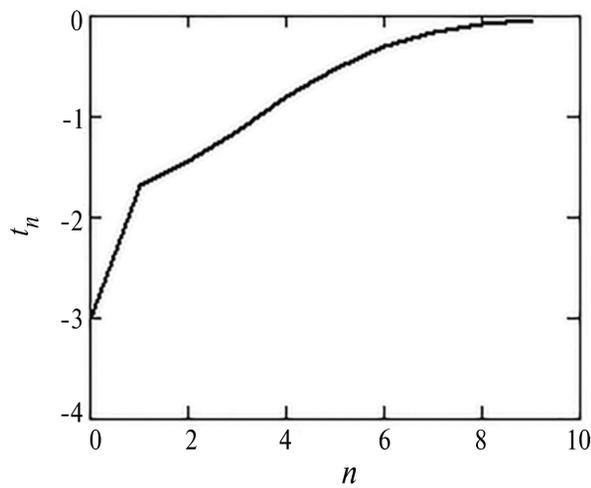
$$v = v' + x (v'' - v'),$$

где удельный объем жидкости

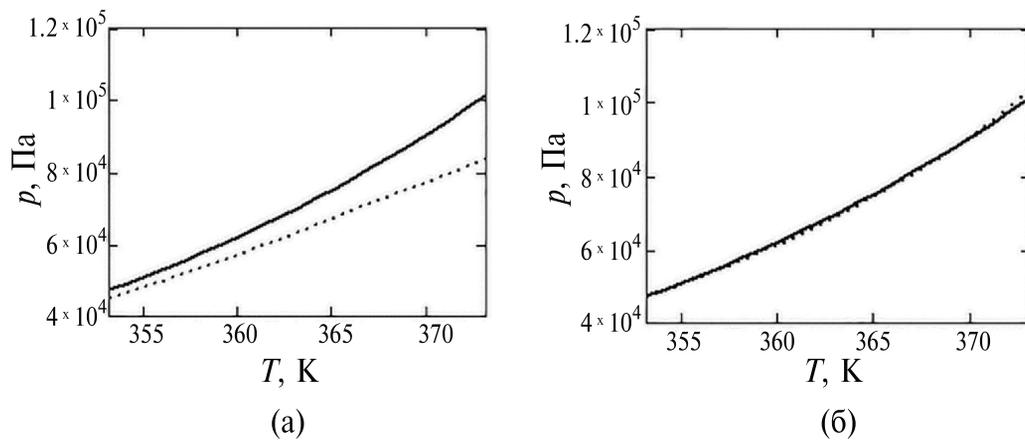
$$v' = (1.0292 \ 1.0299 \ 1.0305 \ 1.0312 \ 1.0319 \ 1.0326 \ 1.0333 \ 1.0340 \ 1.0347 \ 1.0354 \ 1.0361 \\ 1.0369 \ 1.0376 \ 1.0384 \ 1.0391 \ 1.0398 \ 1.0406 \ 1.0414 \ 1.0421 \ 1.0429 \ 1.0437)^T \cdot 10^{-4} \text{ м}^3/\text{кг}$$



Фиг. 5. Распределение параметра регуляризации $\gamma_n = \gamma(n)$ от номера итерации n .



Фиг. 6. Распределение функции итерационного процесса $t_n = t(\gamma_n) = t[\gamma(n)]$ от номера итерации n .



Фиг. 7. Распределение табличного (сплошная линия) и расчетного (пунктирная линия) распределений давления влажного пара в зависимости от температуры на итерации n : (а) $n = 1$; (б) $n = 10$.

и удельный объем сухого насыщенного пара

$$v'' = \begin{pmatrix} 3.4104 & 3.2839 & 3.1629 & 3.0471 & 2.9362 & 2.8300 & 2.7284 & 2.6309 & 2.5376 & 2.4482 & 2.3624 \\ 2.2801 & 2.2012 & 2.1256 & 2.0529 & 1.9832 & 1.9163 & 1.8520 & 1.7902 & 1.7309 & 1.6738 \end{pmatrix} \text{ м}^3/\text{кг}.$$

Поскольку удельные объемы сухого насыщенного пара и жидкости на линии насыщения также зависят от температуры (давления), то удельный объем влажного пара является функцией температуры (давления) и степени сухости (фиг. 2).

Чтобы исключить степень сухости из уравнения состояния для вычисления вириальных функций, можно использовать одно из двух состояний: жидкость на линии насыщения левее критической точки при $x = 0$ (фиг. 3), сухой насыщенный пар на линии насыщения правее критической точки при $x = 1$ (фиг. 4). Так как объем жидкости мал, удобнее производить расчеты для сухого насыщенного пара. Найденные вириальные функции будут справедливы и в области влажного пара, где изобара совпадает с изотермой.

Удельная газовая постоянная для воды

$$R = \frac{R_\mu}{\mu} = 461.30 \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}},$$

где молярная масса воды $\mu = 18.015 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, универсальная газовая постоянная $R_\mu = 8.31$ Дж/(моль·К). Вычислим вектор правых частей системы алгебраических уравнений (4.12):

$$j = 0, 1, \dots, M - 1, \\ f_j = 1 - \frac{p_j v_j}{RT_j},$$

и матрицу левых частей

$$j = 0, 1, \dots, M - 1, \quad n = 0, 1, \dots, M - 1, \\ A_{j,n} = \frac{n}{n + 1} \frac{1}{(v_j)^n}.$$

Непосредственное вычисление определителя для системы алгебраических уравнений (10) показывает, что его значение практически равно нулю, поэтому решение системы нуждается в регуляризации. Зададим начальное приближение для искоемых коэффициентов:

$$j = 0, 1, \dots, M - 1, \\ u_{0,j} = 1.$$

На каждой итерации i вычислим оператор Au и невязку v :

$$i = 1, \dots, N, \quad j = 0, 1, \dots, M - 1, \\ Au_{i-1,j} = \sum_{n=0}^{M-1} \frac{n}{n + 1} \frac{v_{i-1,n}}{(v_j)^n}, \\ v_{i-1,j} = Au_{i-1,j} - f_j.$$

Запишем уравнение (29) относительно неизвестного параметра регуляризации в пространстве $L_2 [T_0, T_{M-1}]$, рассчитывая интегральные суммы вместо определенных интегралов:

$$\sum_{k=1}^{M-1} \left\{ \left[\left(\sum_{j=1}^{M-1} (Av_{i-1,j})^2 (T_j - T_{j-1}) + i^2 \gamma \sum_{j=1}^{M-1} (v_{i-1,j})^2 (T_j - T_{j-1}) \right) v_{i-1,k} - \left(\sum_{j=1}^{M-1} Av_{i-1,j} v_{i-1,j} (T_j - T_{j-1}) \right) Av_{i-1,k} \right] (T_k - T_{k-1}) \right\} = \\ = (\mu_\delta + 2\delta) \left[\sum_{j=1}^{M-1} (Av_{i-1,j})^2 (T_j - T_{j-1}) + i^2 \gamma_{i-1} \sum_{j=1}^{M-1} (v_{i-1,j})^2 (T_j - T_{j-1}) \right]. \quad (33)$$

Зададим ошибки определения исходных данных $\delta = 0.1$, разрешимости уравнения $\mu_\delta = 0$, количество итераций $N = 10$, начальное приближение параметра регуляризации на каждой итерации $\gamma_{i-1} = 1$ и решим уравнение (33) численно.

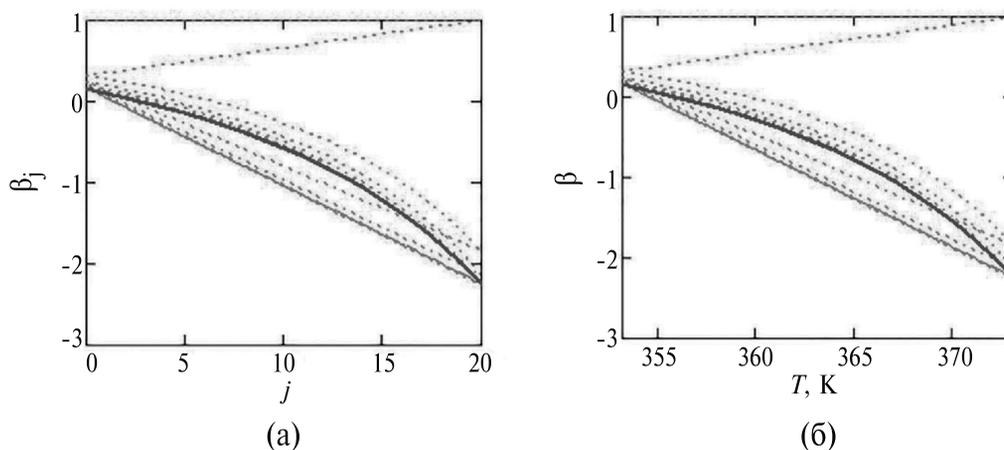
Затем по найденному параметру регуляризации вычислим функцию итерационного процесса (28):

$$t_{i-1} = \frac{\sum_{j=1}^{M-1} Av_{i-1,j}v_{i-1,j} (T_j - T_{j-1})}{\sum_{j=1}^{M-1} (Av_{i-1,j})^2 (T_j - T_{j-1}) + \gamma_{i-1} \sum_{j=1}^{M-1} (v_{i-1,j})^2 (T_j - T_{j-1})}. \quad (34)$$

Тогда новое приближение к искомым коэффициентам равно

$$u_{i,j} = u_{i-1,j} + t_{i-1}v_{i-1,j}. \quad (35)$$

Найденное распределение вириальных функций показано на фиг. 8.



Фиг. 8. Распределение вириальных функций: (а) — в зависимости от номера точки на равномерной температурной сетке; (б) — в зависимости от температуры.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Для термодинамического расчета цикла двухфазной смеси необходимо уравнение состояния, в качестве которого может быть использовано вириальное уравнение реального газа с неизвестными функциями температуры. Эти функции могут быть идентифицированы по табличным распределениям давления и удельного объема в зависимости от температуры. В двухфазной области изобара совпадает с изотермой, поэтому давление однозначно определяется температурой. Удельный объем жидкости зависит от температуры и степени сухости. Чтобы исключить последнюю, удобно пользоваться степенью сухости, равной 0 — жидкость — или 1 — пар. Поскольку объем жидкости мал, удобнее пользоваться данными для сухого насыщенного пара. В результате получается система алгебраических уравнений с неизвестными вириальными коэффициентами, которые являются значениями вириальных функций на дискретной температурной шкале. Определитель системы очень мал, поэтому ее решение нуждается в регуляризации.
2. Минимизируя сглаживающий функционал метода регуляризации А. Н. Тихонова, как это делается в методе наискорейшего спуска для стандартного квадратичного функционала, можно выразить функцию итерационного процесса через параметр регуляризации, который определяется по задаваемому значению невязки левой и правой части. В результате, получается итерационно-вариационный метод, который может применяться как для линейного, так и нелинейного матричного оператора A в системе алгебраических уравнений $Au = f$.

3. Проведенный вычислительный эксперимент для воды в диапазоне температуры от 80 до 100^oC и степени сухости $x = 1$ подтвердил регуляризирующие свойства метода, позволившего определить вириальные функции температуры в указанном интервале из системы алгебраических уравнений с нулевым определителем. Поскольку вириальные функции зависят только от температуры, они являются общими для всей двухфазной области ниже линии насыщения.
4. Рассмотренная задача относится к существенно некорректным, и имеет решение, условно корректное по Тихонову. Регуляризирующим условием отбора решения является требование одновременной сходимости правой части и квазирешения в соответствующих гильбертовых пространствах к правой части исходного уравнения и его нормальному квазирешению. Стабилизатор сглаживающего функционала, отвечающий за сходимость квазирешения, рассчитывается в мнимом метрическом пространстве для определения на каждой итерации действительного параметра регуляризации, и в действительном пространстве для вычисления функции итерационного процесса, зависящей от параметра регуляризации.
5. Разработанный метод отличается тем, что не требует обратимости оператора в левой части и допускает неразрешимость и вырожденность уравнения $Au = f$ с приближенно заданными правой и левой частями, позволяя находить приближение к его нормальному решению итерационно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ректорис К.* Вариационные методы в математической физике и технике: Пер. с англ. М.: Мир, 1985. 590 с.
2. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 285 с.
3. *Джураев Х. Ш., Хасидов Я.* Об одном регуляризирующем алгоритме получения приближений к нормальному решению вырожденных систем линейных алгебраических уравнений // Молодой ученый. 2021. № 14. 6 с.
4. *Морозов В. А., Назимов А. Б.* О необходимых и достаточных условиях регуляризуемости вырожденных систем линейных алгебраических уравнений методом сдвига // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1986. Т. 26. № 9. 1283 с.
5. *Морозов В. А., Назимов А. Б.* К проблеме регуляризации систем линейных алгебраических уравнений // Докл. АН СССР. 1986. Т. 286. № 3. 286 с.
6. *Морозов В. А., Мухамадиев Э. М., Назимов А. Б.* О проблеме регуляризации сдвигом вырожденных систем линейных алгебраических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47. № 12. 1971 с.
7. *Морозов В. А., Мухамадиев Э. М., Назимов А. Б.* К проблеме регуляризации сдвигом вырожденных систем линейных алгебраических уравнений // Докл. АН. 2008. Т. 419. № 4. 454 с.
8. *Барлиани А. Г.* Модифицированный алгоритм Тихонова для решения вырожденных систем уравнений // Гео-Сибирь. 2010. Т. 1. № 1. 120 с.
9. *Колотов И. И., Лукьяненко Д. В., Степанова И. Э., Ягола А. Г.* О единственности решения систем линейных алгебраических уравнений, к которым редуцируются обратные линейные задачи гравиметрии и магнитометрии: локальный случай // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2023. Т. 63. № 8. 1317 с.
10. *Кириллин В. А., Сычев В. В., Шейдлин А. Е.* Техническая термодинамика. М.: Наука, 1979. 512 с.
11. *Калиткин Н. Н.* Численные методы. М.: Наука, 1978. 512 с.
12. *Ривкин С. Л., Александров А. А.* Термодинамические свойства воды и водяного пара: Справочник. 2-е изд. М.: Энергоатомиздат, 1984, 80 с.

REGULARIZATION OF THE SOLUTION OF DEGENERATE SYSTEMS OF ALGEBRAIC EQUATIONS BY THE EXAMPLE OF IDENTIFICATION OF THE VIRIAL EQUATION OF STATE OF A REAL GAS

A. G. Vikulov^{a,*}

^a125993 Moscow, Volokolamskoye Highway 4, Moscow Aviation Institute, Russia

*e-mail: vikulovag81@gmail.com

Received June 6, 2023

Revised March 5, 2024

Accepted April 5, 2024

Abstract. To carry out the thermodynamic calculation of the cycle in the two-phase region, an equation of state of the working fluid is necessary, as which a virial equation with unknown temperature functions is used. A degenerate system of algebraic equations is constructed with respect to unknown coefficients, which are the values of virial functions on a discrete temperature grid. Based on the regularization method, a variational iterative algorithm for solving a degenerate system of equations has been developed. A computational experiment has been conducted to confirm the efficiency of the method.

Keywords: system of algebraic equations, degenerate matrix, regularization method, equation of state, real gas, virial coefficients.