

## АДЕКВАТНОСТЬ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПРИ ИМИТАЦИОННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ СРЕДСТВАМИ ИСМА<sup>1</sup>

Е. А. Новиков (Красноярск), Ю. В. Шорников (Новосибирск)

Достоверность машинных экспериментов при имитационном моделировании непрерывных систем связана не только с валидностью модели и процесса, но и с организацией численных экспериментов. Например, интегрирование модели Гира [3] схемой Рунге-Кутты низкого порядка даже при достаточно малом шаге приводит к неудовлетворительным результатам. В случае нежестких задач вопрос о выборе метода и шага интегрирования решается достаточно просто. Для жестких задач эта проблема имеет свои особенности. Общая теория применения явных и неявных методов для решения жестких систем приведена в [1,6]. Здесь показано решение данной проблемы средствами ИСМА [2].

Особенностями ИСМА являются следующие факторы: смешанное описание динамических систем, т. е. одновременное использование дифференциальных уравнений и структурных схем; учет разрывов первого рода в правой части системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ); явные методы переменного порядка, шага и с переменным числом стадий для численного анализа жестких и нежестких систем ОДУ и др.

Класс исследуемых объектов в ИСМА ограничен системами ОДУ с запаздыванием

$$\dot{x} = f[x(t), x(t - \Theta), t], \quad t > 0, \quad x(0) = x_0, \quad (1)$$

где  $x \in R^n$  – вектор состояния;  $x(t) = \psi(t)$  при  $t \in [-\Theta, 0)$ ;  $t$  – независимая переменная;  $\psi(t)$  –  $m$ -мерная вектор-функция запаздывания,  $m \leq n$ ;  $\Theta = \{\tau_1, \dots, \tau_m\}^T$  – вектор чистых запаздываний;  $f = \{f_1, \dots, f_n\}^T$  – нелинейная вектор-функция, удовлетворяющая условию Липшица;  $x_0 = \{x_{01}, \dots, x_{0n}\}^T$  – вектор начальных условий.

Инструментальная среда ИСМА реализована с учётом простоты описания математических моделей и ориентирована на предметного пользователя. Переход от математической модели к ее компьютерному описанию происходит переписыванием правой части либо во встроенном редакторе ИСМА, либо в любом другом процессоре, допускающем текстовый формат данных. Языковой процессор ИСМА интерпретирует введенные данные и придает им соответствующие типы, спецификации и т.д. В результате трудоемкость перехода к компьютерной модели существенно снижается. В качестве примера рассмотрим уже упомянутую модель химической кинетики, предложенную Гиром [3]:  $x'_1 = 1000x_1x_3 - 0.01x_1$ ,  $x'_2 = 2500x_2x_3$ ,  $x'_3 = 0.013x_1 - 1000x_1x_2 - 2500x_2x_3$ ,  $x_1(0) = x_2(0) = 1$ ,  $x_3(0) = 0$ . На рис. 1. в текстовом редакторе ИСМА представлена компьютерная модель. На рис. 2 графическим интерпретатором GRIN в системе ИСМА показаны результаты расчетов.

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №05-01-00579-а).

```

Хим_кн-ки_жесткость.diff
//Гир/1969/пример жёсткой системы из
// химической кинетики, метод Мёрсона h=10-4, Tk=0.1

      x1' = 1000*x1*x3-0.0138*x1;
      x2' = 2500*x2*x3;
      x3' = 0.013*x1-1000*x1*x2-2500*x2*x3;
// При начальных условиях:
x1=1;x2=1;x3=0;

```

Рис. 1. Текстовый интерфейс ИСМА

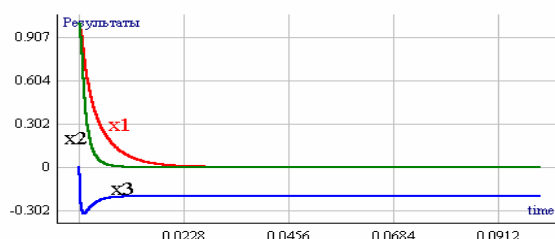


Рис.2. Графическая интерпретация решения

Текстовое или языковое описание подмножества динамических систем из класса (1) ориентировано на задачу Коши для неавтономных систем ОДУ:

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (2)$$

где  $y$  и  $f$  – гладкие вещественные  $n$ -мерные вектор-функции;  $t$  – независимая переменная. Библиотека методов численного интегрирования включает не только классические схемы типа Рунге–Кутты разного порядка точности

$$y_{s+1} = y_s + \sum_{i=1}^m p_i k_i, \quad k_i = hf(t_s + h \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}, y_s + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad (3)$$

но и оригинальные современные методы решения задач разной степени жесткости [1]. Можно выделить две основные причины, которые приводят к трудностям при применении явных методов к жестким задачам. Первая вызвана противоречием между точностью и устойчивостью численной схемы на участке установления. Следствием этого является раскачивание шага интегрирования, что, как правило, заканчивается аварийной остановкой машины. Этого можно избежать контролем устойчивости численной схемы с помощью неравенства [1]

$$\max_{1 \leq i \leq n} \left| \sum_{j=1}^m b'_{ij} k_j^i \right| / \left| \sum_{j=1}^m b''_{ij} k_j^i \right| \leq C, \quad (4)$$

где постоянная  $C$  ограничивает интервал устойчивости (3), а коэффициенты  $b'_{ij}$  и  $b''_{ij}$ ,  $1 \leq j \leq n$ , выбираются такими, чтобы левая часть неравенства (4) давала оценку максимального собственного числа матрицы Якоби системы (2) степенным методом.

Согласно [1] такое неравенство при  $m > 2$  можно построить всегда без дополнительных вычислений правой части системы ОДУ.

Вторая причина ограниченного применения явных методов связана с тем, что области устойчивости известных численных схем слишком малы. Данной проблеме посвящено много работ (см., например, библиографию в [1] и [6]). В [1] предложен алгоритм расчета коэффициентов многочленов устойчивости методов (3), при которых они имеют не только расширенную область устойчивости, но заданную, естественно, разумную конфигурацию. Там же построен программный комплекс автоматического построения методов (3) с заданными областями устойчивости. Результатом работы данного комплекса является программа, в которой реализован алгоритм переменного порядка, шага и с переменным числом стадий. В состав алгоритма включены методы с выбранными областями устойчивости. В данной программе выбор порядка, шага и числа стадий осуществляется с помощью неравенства для контроля устойчивости (4). В случае нежесткой задачи выбирается минимально возможное по точности число стадий.

Дополнительное улучшение свойств устойчивости достигается за счет согласования областей устойчивости основной численной формулы (3) и промежуточных (внутренних) численных схем  $y_{s,i} = y_s + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j$ . Заметим, что использование методов с согласованными областями устойчивости приводит к тому, что ни одна стадия  $k_i$  формулы (3) не вычисляется в точке  $t_{s+1}$ . Это может приводить к понижению надежности расчетов при быстрых изменениях решения, характерных для переходного участка в случае решения жестких задач. Поэтому для контроля точности вычислений применяется два неравенства. Предварительная оценка точности осуществляется проверкой неравенства  $\| \sum_{j=1}^m r'_j k_j \| \leq \varepsilon$ , а окончательное решение принимается контролем неравенства  $\| \sum_{j=1}^m r''_j k_j + r''_{m+1} h f(t_{s+1}, y_{s+1}) \| \leq \varepsilon$ , где  $\| \cdot \|$  – некоторая норма в  $R^n$ ;  $\varepsilon$  – требуемая точность интегрирования, а постоянные  $r'_j$  и  $r''_j$  выбираются таким образом, чтобы левые части данных неравенств давали оценку ошибки схемы (3) [1]. Применение двух неравенств для контроля точности вычислений позволяет не только повысить надежность расчетов, но и увеличить быстродействие алгоритма интегрирования благодаря устранению повторных вычислений решения. Следует отметить, что второе неравенство нарушается либо при резком изменении характера поведения решения, либо при прохождении разрывов в коэффициентах функции  $f$ . Поэтому контроль точности осуществляется фактически без увеличения вычислительных затрат.

Неравенство вида (4) можно использовать для повышения эффективности известных явных численных методов как за счет контроля устойчивости, так и за счет построения на их основе алгоритмов переменного порядка и шага. В частности, в состав библиотеки методов системы ИСМА включены известные методы Мерсона [5] и Фельберга [4], соответственно четвертого и пятого порядков точности. Для каждого метода на основе тех же самых стадий построены численные формулы первого и второго порядков с расширенными областями устойчивости. С применением данных дополнительных численных схем построены алгоритмы интегрирования переменного порядка и шага с выбором наиболее эффективного метода на каждом шаге исходя из критерия устойчивости. В результате быстродействие методов Мерсона и Фельберга при решении жестких задач увеличилось соответственно в 14 и 20 раз. Следует отметить, что даже в случае нежестких задач за счет изменения порядка точности в процессе расчетов эффективность алгоритмов тоже возросла, хотя и не столь значительно.

В качестве примера конкретного алгоритма интегрирования изучим модифицированный метод Мерсона переменного порядка и шага, настроенный на эффективное решение жестких систем. Рассмотрим пятистадийный метод вида

$$\begin{aligned}
 y_{s+1} &= y_s + \sum_{i=1}^6 p_i k_i, \quad k_1 = hf(t_n, y_n); \quad k_2 = hf(t_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{3}k_1); \\
 k_3 &= hf(t_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{6}k_2); \quad k_4 = hf(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{8}k_1 + \frac{3}{8}k_3); \\
 k_5 &= hf(t_n + h, y_n + \frac{1}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3 + 2k_4).
 \end{aligned} \tag{5}$$

При значениях коэффициентов  $p_1 = p_5 = 1/6$ ,  $p_2 = p_3 = 0$ ,  $p_4 = 2/3$  численная формула (5) совпадает с методом Мерсона [5] и имеет четвертый порядок точности. Используя обозначения  $C'_s = \|2k_1 - 9k_3 + 8k_4 - k_5\|/150$ ,  $V_s = 6 \max_{1 \leq i \leq n} |(k_3 - k_2)_i / (k_2 - k_1)_i|$ , для контроля точности (5) можно использовать неравенство  $C'_s \leq \varepsilon$ , а для контроля устойчивости – следующее:  $V_s \leq C$  [1]. Постоянную  $C$  можно выбрать равной 3,5, т. е. равной длине интервала устойчивости. Если использовать набор коэффициентов  $p_1 = 5,248365568 \cdot 10^{-1}$ ,  $p_2 = 3,260928 \cdot 10^{-1}$ ,  $p_3 = 1,395154944 \cdot 10^{-1}$ ,  $p_4 = 9,5158272 \cdot 10^{-3}$  и  $p_5 = 3,93216 \cdot 10^{-5}$ , то численная формула (5) имеет первый порядок точности, а ее интервал устойчивости расширен до 50 по вещественной оси. Поэтому, если шаг выбирается из условия устойчивости, что имеет место на участке установления, то метод первого порядка будет примерно в 14 раз эффективнее метода Мерсона. Используя обозначения  $A'_s = 0,5(3 - 6c_2) \|k_2 - k_1\|$ ,  $A''_s = 0,5(3 - 6c_2) \|hf(t_{s+1}, y_{s+1}) - k_1\|$ , для контроля точности схемы первого порядка можно применять неравенства  $A'_s \leq \varepsilon$  и  $A''_s \leq \varepsilon$  при  $c_2 = 0,16$  [1].

В силу того, что интервал устойчивости численной формулы первого порядка в 14 раз больше, чем у метода четвертого порядка, переход с четвертого на первый порядок может сопровождаться увеличением шага в 14 раз. Заметим, что такое увеличение шага интегрирования осуществляется только за счет смены коэффициентов  $p_i, 1 \leq i \leq 6$  и не приводит к увеличению вычислительных затрат. Однако, как показывают расчеты, такой быстрый рост шага может приводить к невыполнению неравенства для контроля точности метода первого порядка. В результате осуществляется обратный переход. Чтобы избежать таких неоправданных переходов туда и обратно, в алгоритм интегрирования введена численная схема второго порядка точности. Переключение с первого порядка на четвертый и обратно осуществляется через посредство метода второго порядка. При коэффициентах  $p_1 = 3,77893665732 \cdot 10^{-1}$ ,  $p_2 = -9,30131004367 \cdot 10^{-1}$ ,  $p_3 = -2,03904914358 \cdot 10^{-2}$ ,  $p_4 = 1,51157466294$ ,  $p_5 = 6,1053167133 \cdot 10^{-2}$  схема (5) имеет второй порядок точности и максимальный интервал устойчивости, равный приблизительно 8,6. Переход с одной схемы на другую осуществляется по следующему правилу. При расчетах по схеме четвертого порядка нарушение неравенства  $V_s \leq 3,5$  вызывает переход на численную формулу второго порядка. При расчетах по методу первого порядка выполнение неравенства  $V_s \leq 8,6$  вызывает переключение на схему второго порядка. При расчетах по методу второго порядка выполнение неравенства  $V_s \leq 3,5$  означает переход на четвертый порядок, а нарушение неравенства  $V_s \leq 8,6$  вызывает переключение на первый порядок. Неравенства для контроля точности метода

второго порядка имеют вид  $0,17A'_s \leq \varepsilon$  и  $0,17A''_s \leq \varepsilon$ , где величины  $A'_s$  и  $A''_s$  заданы при описании метода первого порядка точности.

Применение алгоритмов переменного порядка и шага приводит к существенному повышению эффективности алгоритмов интегрирования. Однако в случае применения таких алгоритмов к жестким системам точность вычислений получается всегда лучше требуемой. Это связано с тем, что на участке установления шаг интегрирования по точности может быть выбран достаточно большим, потому что на данном участке производные решения малы, но он ограничен неравенством для контроля устойчивости. На участках установления нет смысла использовать численные формулы высокого порядка точности. Быстродействие можно повысить за счет применения методов низкого порядка, но с большими областями устойчивости. Поэтому дальнейшее повышение эффективности достигается за счет построения алгоритмов интегрирования не только с переменным порядком и шагом, но и с переменным числом стадий. Известно, что максимальный порядок точности  $m$ -стадийного метода типа Рунге–Кутты первого порядка точности равен  $2m^2$ . В результате на каждое вычисление правой части приходится  $2m$  единиц длины интервала устойчивости. Это означает, что если шаг ограничен по устойчивости, то с ростом  $m$  эффективность метода возрастает. В состав ИС-МА включены методы с адаптивной областью устойчивости [1]. В результате эффективность повысилась более чем в 200 раз.

#### Выводы

При численном решении задачи Коши для систем ОДУ средней жесткости можно применять явные методы с расширенными областями устойчивости. Эффективность таких методов достигается благодаря применению неравенства для контроля устойчивости, которое позволяет: 1) избежать неоправданных возвратов вследствие неустойчивости численной схемы; 2) выбирать максимально возможный шаг интегрирования; 3) организовать вычисления с переменным шагом, порядком и переменным числом стадий.

#### Литература

1. **Новиков Е. А.** Явные методы для жестких систем. – Новосибирск: Наука. Сиб. Предпр. РАН, 1997.– 195 с.
2. **Шорников Ю. В. и др.** Инструментальные средства машинного анализа. Свидетельство официальной регистрации программы для ЭВМ № 2005610126. – М.: © Роспатент, 2005.
3. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений/ Ред. Дж. Холл и Дж. Уатт. – М.: Мир, 1979.– 311с.
4. **Fhelberg E.** Klassische Runge-Kutta-Formeln funfter und siebenter Ordnung mit Schrittwertenkontrolle//Computing. – 1969. – No 4. – P. 93–106.
5. **Merson R. H.** An operational methods for integration processes//Proc. Symp. On Data Proc. Weapons Research Establishment. – Salisbury, Australia, 1957.
6. **Хайпер Э., Ваннер Г.** Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999. – 687с.