

Особенности численного моделирования гибридных систем в ИСМА*

Ю.В. Шорников, Д.Н. Достовалов, М.С. Денисов

Новосибирский государственный технический университет, Россия

e-mail: shornikov@inbox.ru, dostovalov.dmitr@mail.ru, miha.x56@gmail.com

Рассматриваются вопросы спецификации и эффективного численного анализа гибридных систем (ГС) высокой размерности в инструментальной среде ИСМА. Предложен алгоритм выбора шага интегрирования с учетом динамики событийной функции ГС. Выполнен сравнительный анализ численных схем для решения жестких гибридных задач высокой размерности.

Ключевые слова: Гибридная система, локализация точек переключения, высокая размерность, алгоритмическое задание системы ОДУ.

1. Введение

Важной проблемой в компьютерном анализе моделей механических, электроэнергетических, химических и др. систем, представленных в терминологии гибридных систем (ГС), является обнаружение смены режимов. В работе описан алгоритм выбора шага интегрирования, в котором наряду с точностью и устойчивостью численной схемы учитывается динамика событийной функции ГС. Оригинальный метод локализации точек переключения основывается на доказанной теореме. Системы большой размерности, как правило, обладают свойством жесткости. Здесь рассматривается применение явных методов переменного порядка и полуявных схем с замораживанием матрицы Якоби к жестким задачам высокой размерности. Описанные методы и алгоритмы реализованы и протестированы в среде моделирования гибридных систем ИСМА [1], разработанной авторами.

2. Обнаружение событий гибридных систем

Рассмотрим режим односторонней ГС в виде задачи Коши с ограничениями

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad g(y, t) < 0, \quad (1)$$

где $f: R \times R^N \rightarrow R^N$ — известная непрерывная вектор-функция, y_0 — решение в начальной точке t_0 , $g: R \times R^N \rightarrow R^S$, $S \leq N$ — известная непрерывная событийная вектор-функция или нелинейный предохранитель.

Любой нелинейный предохранитель можно привести к линейному виду добавлением фазовой переменной $x = g(y, t)$. В результате задачу (1) можно переписать в виде

$$y' = f(y), \quad x' = \frac{\partial g}{\partial y} f(y) + \frac{\partial g}{\partial t}, \quad x < 0.$$

*Работа поддержана грантом РФФИ 11-01-00106-а.

Особое внимание следует обратить на выбор метода интегрирования. Полностью неявный метод использовать нельзя, потому что он требует вычисления $f(y)$ в потенциально опасной области, где модель может быть не определена. Ниже приводится доказательное обоснование предпочтительности явных схем. Поэтому здесь будем использовать явные методы с решением $y_{n+1} = y_n + h_{n+1}\varphi_n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Тогда событийная динамика описывается соотношением $g_{n+1} = g(y_n + h_{n+1}\varphi_n, t_n + h_{n+1})$. Разлагая g_{n+1} в ряд Тейлора и, учитывая линейность $g(y, t)$, получаем зависимость g_{n+1} от прогнозируемого шага h_{n+1} :

$$g_{n+1} = g_n + h_{n+1} \left(\frac{\partial g_n}{\partial y} \varphi_n + \frac{\partial g_n}{\partial t} \right). \quad (2)$$

Теорема. Выбор шага по формуле

$$h_{n+1} = (\gamma - 1) \frac{g_n}{\frac{\partial g_n}{\partial y} \varphi_n + \frac{\partial g_n}{\partial t}}, \quad (3)$$

где $\gamma \in [0, 1)$, обеспечивает поведение событийной динамики как устойчивой линейной системы, решение которой приближается к поверхности $g(y, t) = 0$ асимптотически.

Доказательство. Подставляя (3) в (2), имеем $g_{n+1} = \gamma g_n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Преобразовав рекуррентно данное соотношение, получим $g_{n+1} = \gamma^{n+1} g_0$. Поскольку $\gamma < 1$, имеет место $g_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Кроме того, из условия $\gamma \geq 0$ следует, что функция g_n не меняет знак. Следовательно, при $g_0 < 0$ условие $g_n < 0$ будет выполняться для всех n . Тогда событийная функция никогда не пересечет потенциально опасную область $g(y_n, t_n) = 0$, что завершает доказательство теоремы.

2.1. Контроль событийной функции в алгоритме интегрирования

Рассмотрим алгоритм выбора шага интегрирования с учетом динамики событийной функции на примере двухстадийного метода второго порядка точности [2]

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2, \quad k_1 = h_{n+1} f(y_n), \quad k_2 = h_{n+1} f(y_n + \beta k_1)$$

с параметрами $p_1 = p_2 = 0.5$, $\beta = 1$.

Пусть решение y_n в точке t_n вычислено с шагом h_n . Кроме того, известны значения стадий k_1 и k_2 и определена величина следующего шага по точности и устойчивости $h_{n+1}^p = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})]$, где h^{ac} — шаг по точности, h^{st} — шаг по устойчивости. Шаг h^{ac} по точности определяется по формуле $h^{ac} = q_1 h_n$, где q_1 является решением уравнения $q_1^2 \|k_2 - k_1\| = \varepsilon$. Здесь $\|\cdot\|$ — некоторая норма в R^N , ε — требуемая точность интегрирования. Шаг h^{st} по устойчивости задается выражением $h^{st} = q_2 h_n$, в котором q_2 определяется из соотношения $q_2 v_{n,2} = 2$. Оценка максимального собственного числа матрицы Якоби $v_{n,2}$ вычисляется по формуле

$$v_{n,2} = 2 \max_{1 \leq i \leq N} \frac{|(k_2 - k_1)_i|}{|(k_2 - k_1)_i|}.$$

Тогда управление шагом интегрирования с учетом точности, устойчивости и динамики событийной функции можно выполнить по следующему алгоритму.

Шаг 1. Вычисляется $f_n = f(y_n, t_n)$.

Шаг 2. Вычисляются $g_n = g(y_n, t_n)$, $\frac{\partial g_n}{\partial y} = \frac{\partial g(y_n, t_n)}{\partial y}$, $\frac{\partial g_n}{\partial t} = \frac{\partial g(y_n, t_n)}{\partial t}$.

Шаг 3. Вычисляется шаг h_{n+1}^g по формуле (3), причем $\varphi_n = f_n$.

Шаг 4. Вычисляется новый шаг $h_{n+1} = \min(h_{n+1}^g, h_{n+1}^p)$.

Шаг 5. Выполняется следующий шаг интегрирования.

2.2. Тестирование алгоритма

В качестве тестового примера рассмотрим классическую задачу моделирования системы двух резервуаров [3]. Событием в системе считается открытие/закрытие клапана, управляющего потоком жидкости. Будем фиксировать моменты первого и десятого событий ГС, соответствующих открытию выпускного клапана второго бака. Известно, что точное время первого открытия составляет $t_1^* = 303.13$, а десятого — $t_{10}^* = 2669.9$ [3]. В табл. 1. приведены результаты решения в различных системах моделирования ГС.

Таблица 1. Моменты обнаружения событий

Система моделирования	1-е событие (t_1)	10-е событие (t_{10})
MATLAB/Taylor	303.127	2669.9
SIMULINK/StateFlow	303.76	2670.5
GPROMS	303.13	2669.87
DYMOLA	303.126	2669.88
SHIFT	302.3	2666.1
AnyLogic	303.129	2669.91
MVS	303.127	2669.87
ИСМА	303.128	2669.88

Из сравнения результатов видно, что худшие показатели получены в системах SIMULINK с использованием метода Дорманда-Принса и SHIFT с применением метода Рунге-Кутты 4-го порядка. Анализ средствами ИСМА с включенным алгоритмом обнаружения показывает более качественные результаты, что обусловлено учетом событийной функции, а также точности и устойчивости вычислений при выборе шага интегрирования.

3. Спецификация и исследование моделей высокой размерности

Особенности моделирования систем высокой размерности в ИСМА рассмотрим на примере задачи проникновения помеченных радиоактивной меткой антител в пораженную опухолью ткань организма, сформулированной лабораторией Akzo Nobel Central Research [4]:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad y \in R^{2N}, \quad 0 \leq t \leq 20, \quad (4)$$

где функция f определяется формулами:

$$f_{2j-1} = \alpha_j \frac{y_{2j+1} - y_{2j-3}}{2\Delta\zeta} + \beta_j \frac{y_{2j-3} - 2y_{2j-1} + y_{2j+1}}{(\Delta\zeta)^2} - ky_{2j-1}y_{2j}, \quad f_{2j} = -ky_{2j}y_{2j-1}, \quad (5)$$

где

$$\alpha_j = 2(j\Delta\zeta - 1)^3 c^2, \quad \beta_j = (j\Delta\zeta - 1)^4 c^2, \quad \Delta\zeta = \frac{1}{N}, \quad y_{-1}(t) = \varphi(t), \quad (6)$$

$$y_{2N+1} = y_{2N-1}, \quad g \in R^{2N}, \quad g = (0, v_0, 0, v_0, \dots, 0, v_0)^T.$$

Функция $\varphi(t)$ имеет вид:

$$\varphi(t) = \begin{cases} 2, & t \in [0, 5], \\ 0, & t \in (5, 20]. \end{cases}$$

Подходящими значениями для параметров k , v_0 и c являются $k = 100$, $v_0 = 1$ и $c = 4$.

3.1. Компьютерная модель в ИСМА

Задача (4) — (6) характеризуется тем, что существует непосредственная зависимость между индексом дифференциального уравнения и его правой частью. Компьютерная модель системы, записанная на языке LISMA+, являющимся расширением языка LISMA [5], представлена на рис. 1.

```

N = 200; k = 100; C2 = 16;
phi = 2;

i = [1-200];
j = [2-199];

array y[400];

y[2*i - 1] = 0;
y[2*i] = 1;

macro alpha[i] = 2*pow(i/N - 1, 3)/C2;
macro beta[i] = 2*pow(i/N - 1, 4)/C2;

y[1]' = alpha[1]*(y[3] - phi)*N/2 +
        beta[1]*(phi - 2*y[1] + y[3])*N*N - k*y[1]*y[2];
y[2]' = -k*y[2]*y[1];
y[399]' = -k*y[400]*y[399];
y[400]' = -k*y[399]*y[400];

y[2*j-1]' = alpha[j]*(y[2*j + 1] - y[2*j - 3])*N/2 +
            beta[j]*(y[2*j-3] - 2*y[2*j-1] + y[2*j+1])*N*N - k*y[2*j-1]*y[2*j];
y[2*j]' = -k*y[2*j]*y[2*j-1];

change_phi [TIME >= 5] is
    phi ^= 0;
from init;

```

Инициализация счетчика

Объявление массива переменных

Инициализация массива (начальные условия ОДУ)

Явное задание правых частей ОДУ

Алгоритмическое задание правых частей ОДУ

Рис. 1. Компьютерная модель на языке LISMA+

Второй особенностью задачи является ее гибридность, обусловленная существованием разрыва первого рода функции $\varphi(t)$. Соответственно, система может находиться в одном из двух непрерывных режимов. Переключение происходит при $t \geq 5$ ($pr_1: g(t) = t \geq 5$).

3.2. Численный анализ

Для решения системы (4) — (6) применялись явные методы переменного порядка с контролем устойчивости (Рунге-Кутты-Фельберга (RK78ST) [6] и Дорманда-Принса (DP78ST) [7]), неявный метод (RADAU5), а также полуявные (m,k)-методы (МК22 [4] и МК21). Задача решалась при $N = (50, 100, 200, 400, 500)$. Таким образом, получены пять систем ОДУ, размерность которых варьируется от 100 до 1000 фазовых переменных. Зададим точность расчетов $\varepsilon = 10^{-4}$ и начальный шаг $h_0 = 10^{-9}$.

Эффективность алгоритмов оценивалась по трем критериям: количество вычисленных точек (КТ), число расчетов правой части (ПЧ) и затраченное время (ВР). Полученные зависимости вычислительных затрат от размерности системы приведены на рис. 2.

Анализируя полученные данные, можно сделать вывод, что наиболее эффективными являются полуявные (m,k)-методы МК21 и МК22. Они характеризуются небольшим

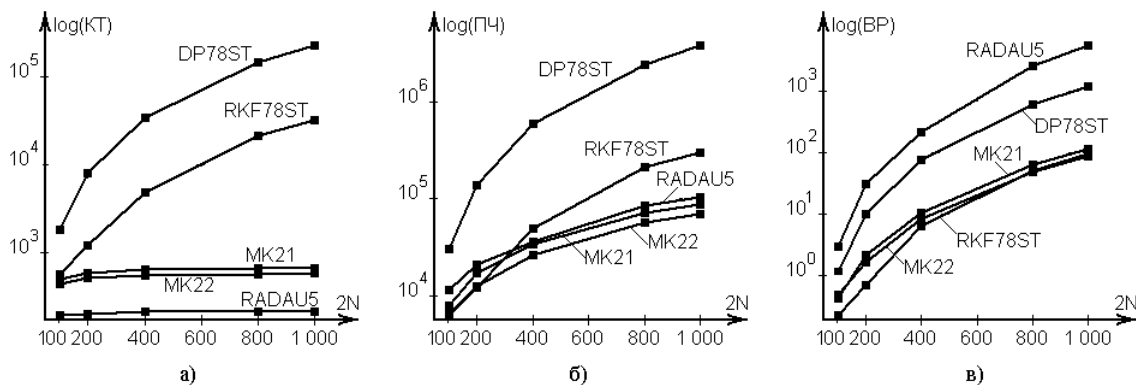


Рис. 2. Зависимость вычислительных затрат от размерности системы в логарифмическом масштабе

числом рассчитываемых точек и правых частей системы ОДУ, а благодаря замораживанию матрицы Якоби на поиск решения требуется значительно меньшее время по сравнению с неявным методом. Зависимость времени расчета от размерности системы для (m,k) -методов и метода Фельберга переменного порядка с контролем устойчивости близка к линейной.

Стоит также отметить, что использование явных методов переменного порядка с контролем устойчивости весьма эффективно на задачах средней размерности (до 500 уравнений). Однако время решения системы ОДУ явным методом в немалой степени зависит от жесткости системы вследствие ограниченной устойчивости численной схемы, и при определенных условиях зависимость времени расчета от размерности может носить экспоненциальный характер, как для метода DP78ST.

Применение неявных методов оправдано в случае задач небольшой размерности (до 200 уравнений). Из графика на рис. 2, в) видно, что метод RADAU5 характеризуется показательным ростом затрачиваемого времени при увеличении размерности системы. Учитывая малое число необходимых шагов и расчетов правой части, можно предположить, что такая неэффективность вызвана необходимостью декомпозиции матрицы Якоби. Отметим, что данная зависимость будет справедлива и для задач, степень жесткости которых отличается жесткости от системы (4) — (6). Это связано с тем, что неявные схемы L-устойчивы, и можно выбирать достаточно большой шаг интегрирования вне зависимости от текущей динамики изменения фазовых переменных.

3.3. Влияние погрешности в обнаружении событий

Рассмотрим решение, полученное неявным методом RADAU5. На рис. 3, а) представлено поведение гибридной компоненты ϕ . Видно, что данная функция обращается в 0 не при $t = 5$, а в момент времени $t = 5.0157$. В результате этого система переходит к другому состоянию с запаздыванием, что приводит к значительной глобальной погрешности, показанной на рис. 3, б) и в) (прерывистая линия соответствует решению, полученному неявным методом).

Данный пример наглядно демонстрирует неэффективность неявных методов при анализе гибридных систем высокой размерности. Для решения гибридной задачи неявным методом необходимо задействовать алгоритм точной локализации моментов переключения. Однако это негативно сказывается на производительности метода, поскольку

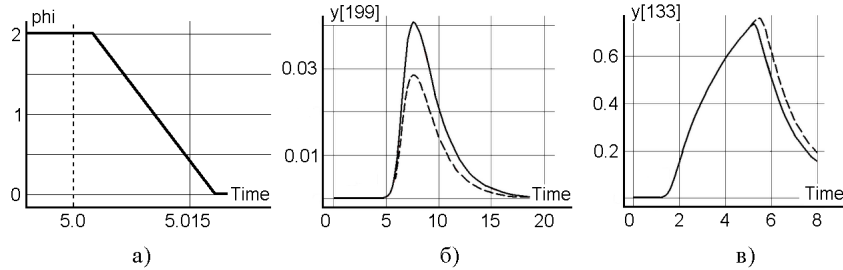


Рис. 3. Динамика гибридной компоненты ϕ (а) и фазовых переменных y_{199} (б), y_{133} (в), полученная неявным методом

ку увеличивается количество шагов, и соответственно возрастает число декомпозиций матрицы Якоби. С другой стороны, применение подобного алгоритма к явному методу не вызывает дополнительных вычислительных затрат.

4. Заключение

Оригинальный метод локализации точек переключения позволяет с высокой точностью обнаруживать моменты смены состояний ГС. Им легко дополнить существующие алгоритмы интегрирования на основе явных и полуявных схем. Использование переменного порядка точности и контроля устойчивости в алгоритмах на основе явных методов делает возможным их применение для решения жестких задач большой размерности. Высокая эффективность полуявных (m,k) -методов обеспечивается благодаря замораживанию матрицы Якоби. Также показано, что применение неявных методов для интегрирования гибридных систем без учета динамики событийной функции ведет к неверному глобальному решению.

Список литературы

- [1] Инструментальные средства машинного анализа / Ю.В. Шорников, В.С. Дружинин, Н.А. Макаров, К.В. Омельченко, И.Н. Томилов // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2005610126. М.: Роспатент, 2005.
- [2] Новиков Е.А., Шорников Ю.В., Уатай Б.У. Методы решения жестких задач, гибридные системы и их приложения. Алматы: Изд-во КБТУ, Казахстан, 2010.
- [3] KOWALEWSKI S. A Case Study in Toll-Aided Analysis of Discretely Controlled Continuous System: the Two Tank Problem // In Hybrid Systems V, Lecture Notes in Computer Science. Springer-Verlag. 1998. P. 78–102.
- [4] Новиков А.Е., Новиков Е.А., Шорников Ю.В. Аппроксимация матрицы Якоби в $(2,2)$ -методе решения жестких систем // Доклады АН ВШ РФ. 2008. №1(10). С. 31–44.
- [5] Программа языкового процессора с языка LISMA (Language of ISMA) / Ю.В. Шорников, И.Н. Томилов // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ №2007611024. М.: Роспатент, 2007.
- [6] Шорников Ю.В., Новиков Е.А. Контроль устойчивости метода Фельберга седьмого порядка точности // Вычислительные Технологии. 2006. Т. 11, № 4. С. 65–72.
- [7] Шорников Ю.В., Новиков Е.А. Контроль устойчивости метода Дорманда-Принса // СибЖИМ. 2007. №4(32). С. 95–103.