

Достоверность численного моделирования непрерывных динамических систем

11, ноябрь 2015

Маничев В. Б.

УДК: 621.382.82.001

Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

vladimir.manichev@gmail.com

Введение

Развитие современной промышленности опирается на широкое использование инновационных технологий и, в первую очередь, информационных технологий. Это позволяет значительно повысить сложность и, как результат, эффективность реализуемых объектов. Создание объектов высокой и сверхвысокой сложности невозможно без использования средств автоматизированного проектирования, базирующихся на математическом моделировании создаваемых объектов. Ошибки и неточности в компьютерных инженерных вычислениях при математическом и компьютерном моделировании проектируемых сложных и опасных технических объектов (ядерная энергетика, авиационная промышленность, космическая промышленность и др.) могут стать причиной отказов техники, аварий и катастроф, что показано, например, в трудах профессора СПбГУ Петрова Ю.П. [1,2]. Проведенное им исследование показало, что традиционные и повсеместно используемые методы инженерных компьютерных расчетов не всегда и не для всех объектов дают надежные результаты. Результаты расчетов могут не соответствовать реальному поведению моделируемых объектов и это может быть причиной многих аварий и даже катастроф. Одной из причин этих аварий и катастроф является недостаточно полное исследование проблемы зависимости численных решений уравнений от неизбежной на практике неточности в задании их коэффициентов. Для реальных объектов эти коэффициенты не могут идеально точно соответствовать значениям, заданным при проектировании и расчетах. Отклонения неизбежны, при этом в ходе эксплуатации спроектированного изделия его параметры могут испытывать такие изменения, в результате которых поведение изделия может не соответствовать расчетному и привести к авариям. Главным недостатком вычислительных методов, используемых для инженерного анализа непрерывных динамических процессов при проектировании и управлении и реализованных в лучших зарубежных программных системах, является возможность получения ошибочных результатов без предупреждения пользователей об их недостоверности при невысоких заданных требованиях к математической точности конечных результатов численного решения систем ОДУ, моделирующих

непрерывные динамические системы. Например, в программе моделирования непрерывных динамических систем MATLAB-SIMULINK математическая точность решения систем ОДУ по умолчанию равна $\text{eps}=0,001$. Поскольку параметры математических моделей непрерывных динамических систем и, следовательно, коэффициенты соответствующих систем ОДУ получены, как правило, экспериментально с невысокой математической точностью, то и требования к математической точности результатов решения систем ОДУ будут невысокими. Кроме того, следует учитывать технологический разброс параметров и вариации параметров в ходе эксплуатации проектируемых изделий.

В статье обосновывается применение AL-устойчивых (Абсолютно (Absolute) устойчивых строго в левой (Left) полуплоскости комплексной области устойчивости методов решения систем ОДУ (или $A(\pi/2)$ - устойчивых методов), направленное на получение достоверных и корректных результатов моделирования непрерывных динамических систем при невысоких требованиях к конечной математической точности результатов численного моделирования.

Математическая постановка задачи

Математическое и численное моделирование непрерывных динамических систем основано на решении систем ОДУ-ДАУ (обыкновенные дифференциальные уравнения - дифференциально-алгебраические уравнения), моделирующих состояние и поведение таких систем. При математическом моделировании непрерывных динамических процессов во многих реальных технических системах и объектах состояние этих систем и объектов обычно рассматривают в пространстве **дифференциальных переменных** или в пространстве **«переменных состояния»** с получением в явном аналитическом виде производных этих переменных по времени, но этого недостаточно для достоверного и точного математического моделирования разнородных технических систем и объектов, так как любой дифференциальной переменной состояния для некоторых таких объектов, как правило, соответствует алгебраическая переменная. Например, в электрике и электронике переменным состоянием, напряжениям на емкостях и токам через индуктивности, соответствуют алгебраические переменные, токи через емкости и напряжения на индуктивностях; в механике переменным состоянием, скоростям тел определенной массы, соответствуют алгебраические переменные, силы инерции, и т.п. Поэтому состояние таких динамических систем и объектов следует рассматривать в пространстве **дифференциально-алгебраических переменных**. Основным физическим свойством алгебраических переменных является возможность идеального скачка значения этих переменных в бесконечно малый отрезок времени, в то время, как для дифференциальных переменных состояния, такие скачки не возможны. Поэтому общепринятое приведение систем ДАУ к системам ОДУ в нормальной форме Коши с преобразованием алгебраических переменных в дифференциальные переменные состояния может быть физически недостоверно, и полученная таким образом математическая модель динамических процессов в вышеупомянутых технических системах и объектах будет физически не достоверна. Такие динамические си-

стемы следует моделировать в пространстве дифференциально-алгебраических переменных. Следует отметить, что в задачах химической кинетики и небесной механики, алгебраические переменные обычно не нужны, но значения производных дифференциальных переменных требуется вычислять с такой же точностью, как и значения дифференциальных переменных [3]. Поэтому сформулирована наиболее общая постановка задачи решения систем ДАУ в **расширенном пространстве дифференциально-алгебраических переменных** без преобразований исходных систем ДАУ, которая имеет вид

$$F(X, PX, Y, t) = 0. \quad (1)$$

Здесь X – вектор координатного базиса дифференциальных переменных состояния размерностью m ; $PX = dX/dt$ – вектор производных дифференциальных переменных состояния по времени размерностью m ; Y – вектор алгебраических переменных полного координатного базиса дифференциально-алгебраических переменных размерностью k ; F – вектор-функция размерностью $(m+k)$. Заданы согласованные начальные условия $X_0 = X(0)$, $Y_0 = Y(0)$ и отрезок интегрирования $[0, T_k]$.

Выбор методов решения систем ОДУ-ДАУ

Поскольку явные методы решения систем ОДУ и ДАУ не являются универсальными и не отвечают требованиям устойчивости при решении с переменным шагом интегрирования жестких систем ОДУ, то в качестве базовых методов интегрирования для моделирования непрерывных динамических систем и объектов рекомендуется выбирать неявные методы интегрирования [4,5]. Неявные методы решения систем ОДУ сводятся к итерационному решению систем нелинейных алгебраических уравнений. При программной реализации этих методов следует выделить два основных типа погрешностей численного решения систем ОДУ – глобальная погрешность (или качественная ошибка) и локальная погрешность (или количественная ошибка). Программисты основное внимание уделяют получению гарантированной математической локальной точности, хотя главное, конечно, это получение качественно достоверного и корректного численного решения, а это связано с устойчивостью численного решения систем ОДУ-ДАУ.

В теоретическом плане свойства систем ОДУ-ДАУ и методов их решения рассматриваются применительно к линейным неоднородным системам ОДУ вида

$$dX/dt = AX + G(t), \quad (2)$$

где A – постоянная действительная матрица размером $m \times m$; $G(t)$ – известная вектор-функция времени t .

Если метод интегрирования будет непригоден для решения системы (2), то он будет непригоден и для решения системы (1). Обозначим определитель матрицы A через $\det(A)$. Спектр собственных значений – это множество всех собственных значений λ_i матрицы A ; $i = 1, 2, \dots, m$. В общем случае, λ_i – комплексные величины, т. е. $\lambda_i = \text{Re}(\lambda_i) + j\text{Im}(\lambda_i)$, где $j = \sqrt{-1}$. Если собственные значения λ_i различны, то аналитическое решение системы

(2) можно представить в виде суммы отдельных фундаментальных решений однородной системы ОДУ с матрицей A и частного решения неоднородной системы (2):

$$X(t) = \sum_{i=1}^m c_i e^{\lambda_i t} X_i + Z(t). \quad (3)$$

Здесь c_i – постоянные величины; X_i – собственный вектор матрицы A , соответствующий собственному значению λ_i ; $Z(t)$ – частное решение системы (2).

В общем случае при решении разнообразных систем ДАУ вида (1) можно выделить пять базовых классов задач для фундаментальных решений (3) линейных однородных систем ОДУ, показанных на рис. 1 и требующих применения различных неявных методов решения систем ОДУ.

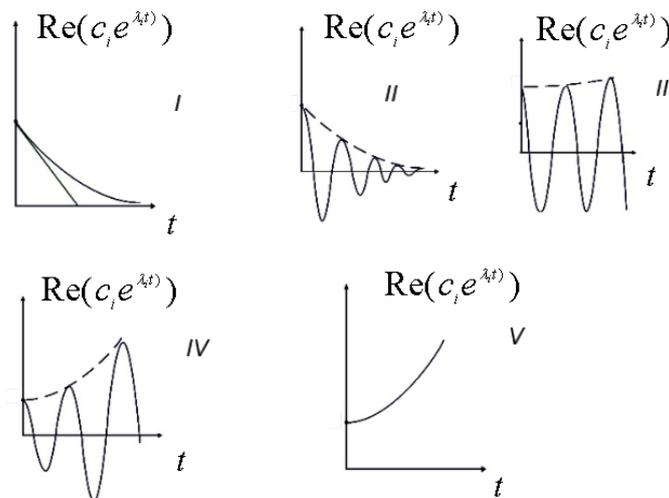


Рис. 1. Пять базовых классов для фундаментальных решений линейных однородных систем ОДУ (2)

Классический контроль локальной погрешности интегрирования обеспечит точность решения, а для контроля полной глобальной погрешности интегрирования необходимо обеспечить устойчивость методов интегрирования. Чтобы гарантировать получение качественно корректного решения для вышеуказанных классов задач метод интегрирования должен быть устойчивым для устойчивых систем ОДУ (I, II классы задач) и должен быть неустойчивым для неустойчивых систем ОДУ (IV, V классы задач). Поэтому необходимо, чтобы методы интегрирования были АЛ-устойчивыми, т.е. абсолютно устойчивыми строго в левой полуплоскости комплексной плоскости устойчивости методов интегрирования (рис. 2).

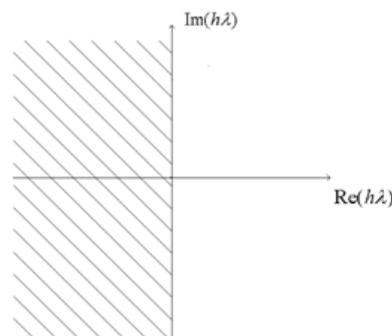


Рис. 2. АЛ-область (или А-($\pi/2$)-область) абсолютной устойчивости методов численного решения систем ОДУ

При невысоких требованиях к точности решения систем ОДУ данная область абсолютной устойчивости гарантирует сохранение качественно верного решения при увеличении шага интегрирования в плоскости $h\lambda$, так как при невысокой точности интегрирования шаг интегрирования может стать таким большим, что не АL-устойчивые методы интегрирования могут получать неверные траектории решения. Требованию АL-устойчивости отвечают неявные одношаговые методы интегрирования Рунге-Кутты [6].

Алгоритмы и программы решения систем ДАУ

На основе вышеизложенного разрабатывается библиотека математических программ на языке C-SADEL (Sets of Algebraic and Differential Equations solvers Library) для достоверного и надежного решения систем ЛАУ и ОДУ-ДАУ [7]. Системы ДАУ решаются в расширенном координатном базисе и не требуют преобразования исходных систем ДАУ общего вида (1). Алгоритмы для реализации неявных одношаговых методов интегрирования типа Рунге-Кутты основаны на совместном решении систем нелинейных алгебраических уравнений $F(X, Y, PX, t_i) = 0$ для решаемой системы ДАУ вида (1) и систем линейных алгебраических уравнений (ЛАУ) для методов интегрирования $H(X, PX, h_i) = 0$, сформированных на соответствующих стадиях методов интегрирования, относительно дифференциально-алгебраических переменных X , Y и производных дифференциальных переменных PX . Были разработаны DAbs формулы (как развитие AbTc методов Бутчера [6]) для S-стадийных неявных методов решения систем ДАУ вида (1) в расширенном координатном базисе:

$$H_{ii}(PX_{ii}, X_{ii}, X_{i-1}, PX_{i-1}, h_i) = h_i \sum_{j=1}^s d_{ij} PX_j - \sum_{j=1}^s a_{ij} X_j - b_{ii} X_{i-1} - h_i c_{ii} PX_{i-1} = 0$$

$$X_i = X_s, PX_i = PX_s, ii = 1, \dots, s, t_i = t_s. \tag{4}$$

Здесь s – число стадий соответствующего одношагового метода; h_i – i -ый шаг интегрирования; d_{ij} , a_{ij} , b_{ii} , c_{ii} – параметры метода. На основе этих формул были разработаны и реализованы три метода интегрирования:

- M1 – А-устойчивый одностадийный неявный метод первого порядка точности;
- M2 – АL-устойчивый одностадийный неявный метод второго порядка точности;
- M3 – АL-устойчивый двухстадийный неявный метод четвертого порядка точности.

На рисунках 3 и 4 показана работа алгоритмов данных методов на очередном i -м шаге интегрирования.

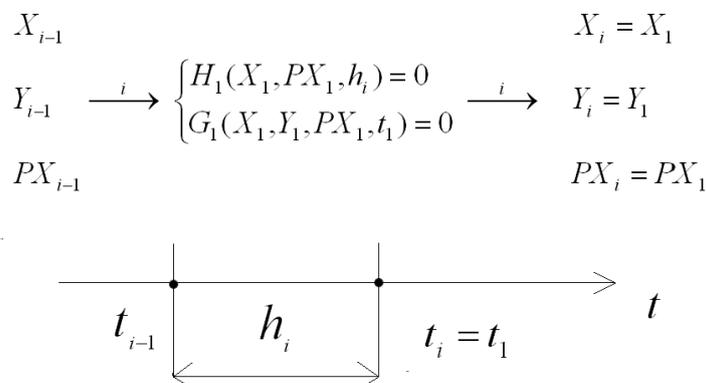


Рис. 3. i -ый шаг интегрирования для неявных одностадийных одношаговых методов первого и второго порядка точности (методы M1 и M2 – число стадий S=1)

ТЕСТ 2. Линейная электрическая схема (high Q filter circuit (рис. 5) с многопериодным решением, которая моделируется системой ОДУ 5-го порядка с известным аналитическим решением.

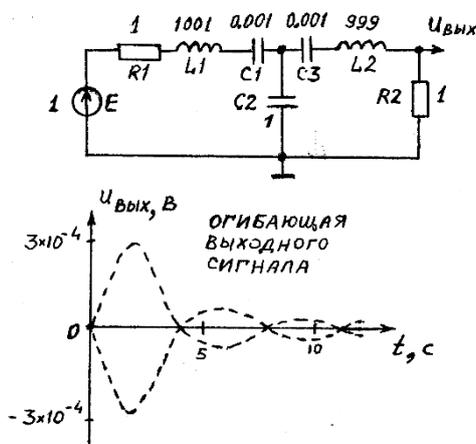


Рис. 5. Тест 2 – высокодобротный фильтр

Для данной схемы известно соответствующее аналитическое решение для исходных значений параметров этой схемы, показанных на рис.5. Были введены 6 масштабных коэффициентов K_t , K_u , K_i , K_R , K_C , K_L для соответствующих переменных и параметров схемы. При этом размерности для каждой переменной и параметра схемы следующие: время t [$с \cdot K_t$]; напряжение u [$В \cdot K_u$]; ток i [$А \cdot K_i$]; сопротивление R [$Ом \cdot K_R$]; емкость C [$Ф \cdot K_C$]; индуктивность L [$Гн \cdot K_L$]. Масштабные коэффициенты K_t , K_u и K_i задаются произвольно. Другие коэффициенты рассчитываются по формулам

$$K_R = K_u / K_i; K_C = K_t \cdot K_i / K_u; K_L = K_t \cdot K_u / K_i.$$

«Трудность» теста определит разброс абсолютных численных значений переменных, при этом характер переходных процессов не должен изменяться при любых значениях масштабных коэффициентов, т.к. они изменяются согласованно.

Система ОДУ в нормальной форме Коши для этого теста имеет вид

$$\begin{aligned} kt &= 1, ku = 1, ki = 1, \\ kr &= ku / ki, kc = kt \cdot ki / ku, kl = kt \cdot ku / ki, \\ \begin{cases} dx_1 / dt = x_4 / 0.001 \cdot kc, \\ dx_2 / dt = x_5 / 0.001 \cdot kc, \\ dx_3 / dt = (x_4 - x_5) / kc, \\ dx_4 / dt = (ku - x_1 - x_3 - kr \cdot x_4) \cdot / 1001 \cdot kl, \\ dx_5 / dt = (-x_2 + x_3 - kr \cdot x_5) / 999 \cdot kl; \end{cases} \\ x_1(0) &= 0, x_2(0) = 0, x_3(0) = 0, x_4(0) = 0, x_5(0) = 0, \\ t &\in [0, 12560kt]. \end{aligned}$$

ТЕСТ 3. Нелинейная жесткая система ОДУ, имеющая локально-неустойчивое решение:

$$\begin{aligned} dx_1 / dt &= x_2, \\ dx_2 / dt &= MU \cdot (1 - x_1^2) \cdot (x_1 + x_2); \\ x_1(0) &= 2, x_2(0) = 0, t \in (0, 3). \end{aligned}$$

Сравнение программ было проведено для значения «трудности» $MU = 10^6$.

ТЕСТ 4. Нелинейная жесткая система ОДУ для математического моделирования процессов реального лазера:

$$\begin{aligned} dx_1 / dt &= -x_1 \cdot (\alpha \cdot x_2 + \beta) + \gamma, \\ dx_2 / dt &= x_2 \cdot (p \cdot x_1 - \sigma) + \tau \cdot (1 + x_1), \\ x_1(0) &= -1, x_2(0) = 0, t \in (0, 10^6), \\ \alpha &= 1,5 \cdot 10^{-18}, \beta = 2,5 \cdot 10^{-6}, \gamma = 2,1 \cdot 10^{-6}, \\ p &= 0,6, \sigma = 0,18, \tau = 0,016. \end{aligned}$$

Сравнение решателей ОДУ было проведено для параметров реального работающего лазера.

ТЕСТ 5. Тестовая задача 5 является примером задачи, в которой есть функции, имеющие разрывы производных этих функций по времени (пилообразный входной сигнал на рис. 6). Необходимо выполнить численное интегрирование дифференциальных уравнений емкостного делителя напряжения из 2-х последовательно соединенных конденсаторов $C1$ и $C2$, когда емкость конденсатора $C2$ является функцией напряжения на обкладках этого конденсатора и на делитель напряжения подается пилообразный входной сигнал от 0В до 1В (толстые линии на рис. 6) с периодом $t1=1$ сек.

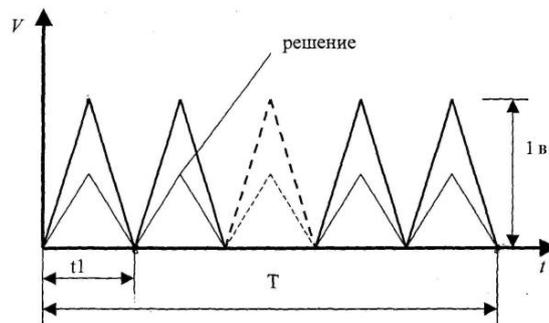


Рис. 6. Входной сигнал емкостного делителя напряжения

Математическая модель этой тестовой задачи - система ОДУ вида (1) из трех уравнений:

$$\begin{cases} C1(dU_{C1}(t)/dt) - i(t) = 0, \\ C1(0,5 - U_{C2}(t)) \times (dU_{C2}(t)/dt) - i(t) = 0, \\ U_{C1}(t) + U_{C2}(t) - V(t) = 0. \end{cases} \quad (5)$$

относительно трех переменных $U_{C1}(t)$, $U_{C2}(t)$, $i(t) = i_{C1}(t) = i_{C2}(t)$.

Аналитическое решение этой задачи (в модели все переменные рассматриваются безразмерными) для конденсатора $C2$ при начальных условиях $U_{C1}(0) = 0$ и $U_{C2}(0) = 0$ имеет вид:

для напряжения

$$U_{C2}(t) = C1 + C2(0) - \sqrt{(C1 + C2(0))^2 - 2 \cdot C1 \cdot V(t)};$$

для тока

$$i_{C2}(t) = \frac{C1 \cdot (0,5 - U_{C2}(t))}{\sqrt{(C1 + C2(0))^2 - 2 \cdot C1 \cdot V(t)}}.$$

Численное решение для напряжения и тока на конденсаторе $C2$ должно совпадать с аналитическим решением. С учетом результатов, опубликованных в работе [7-9], в таблице 1 приведено итоговое сравнение решателей систем ОДУ из вышеупомянутой библиотеки SADEL, из известных библиотек и пакетов математических программ, а также добавлены результаты решения данных «трудных» тестов при невысоких требованиях к точности интегрирования ($\text{eps}=0.001$) с помощью пакетов моделирования электронных схем и динамических систем NI-Multisim, Cadence-OrCAD-PSPICE, SYMICA и OpenModelica.

Таблица 1. Итоговое сравнение решателей систем ОДУ и результаты решения тестов

Программа-решатель систем ОДУ	ТЕСТЫ				
	ТЕСТ 1	ТЕСТ 2	ТЕСТ 3	ТЕСТ 4	ТЕСТ 5
	«Трудность» MU=1e9	«Трудность» $Kt=1, Ki=1,$ $Ku=0.01$	«Трудность» MU=1e6	Параметры реального лазера	$C2 = (0.5 - u_{C2}(t))$
SADEL 2012	+	+	-++	-++	+
<i>NAG C-Library 2012</i>	-	-	-	+	нд
<i>IMSL C-Library 2011</i>	-	-	-	-	нд
Mathcad 2010	-	-++	+	+	нд
MATLAB 2012	-	-++	-++	+	нд
Maple 2008	-	+	-++	-++	нд
Mathematica 2012	-	+	+	+	нд
SPICE-Multisim 12.0	-	-++	-+	-+	-+
OrCAD- PSPICE 16.6	-	-+	-	-	+
SPICE-SYMICA 2014	нд	-+	нд	нд	+
OpenModelica 2014	-	-	-	-	+

Знак (+) означает корректное решение теста методом, рекомендуемым для решения жестких систем ОДУ, с точностью $\text{eps}=0.001$.

Знак (-) означает не корректное решение теста методом, рекомендуемым для решения жестких систем ОДУ, с параметрами по умолчанию без предупреждения пользователя, и отказ при попытке получения верного решения.

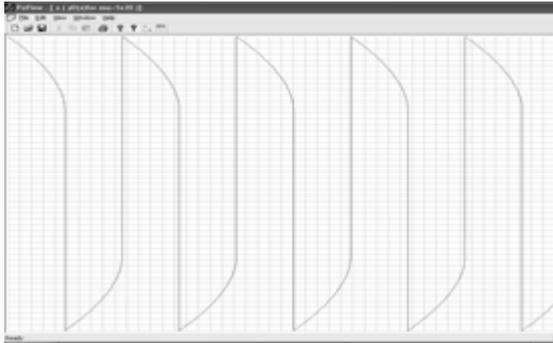
Знак (-+) - не корректное решение теста методом, рекомендуемым для решения жестких систем ОДУ, с параметрами по умолчанию без предупреждения пользователя, и получение корректного решения путем настройки соответствующих методов и параметров интегрирования и увеличения времени счета.

Знак (-++) - не корректное решение теста методом, рекомендуемым для решения жестких систем ОДУ, с параметрами по умолчанию без предупреждения пользователя, и получение корректного решения путем настройки только параметра заданной точности метода интегрирования и увеличения времени счета.

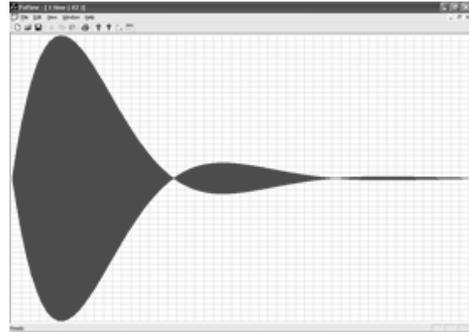
нд – нет данных.

Корректное решение тестов 1-5, полученное с помощью разработанных программ, приведено на рис. 7.

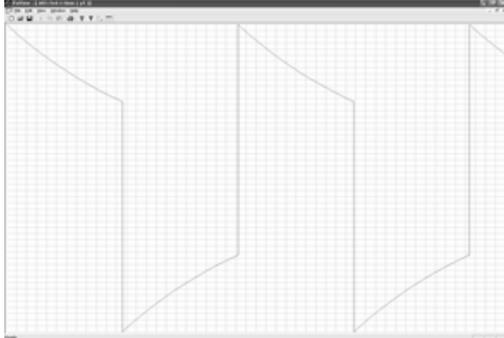
ТЕСТ 1



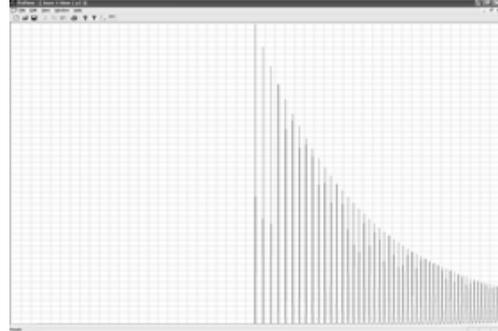
ТЕСТ 2



ТЕСТ 3



ТЕСТ 4



ТЕСТ 5

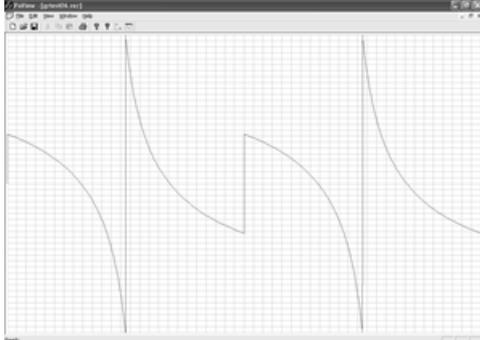
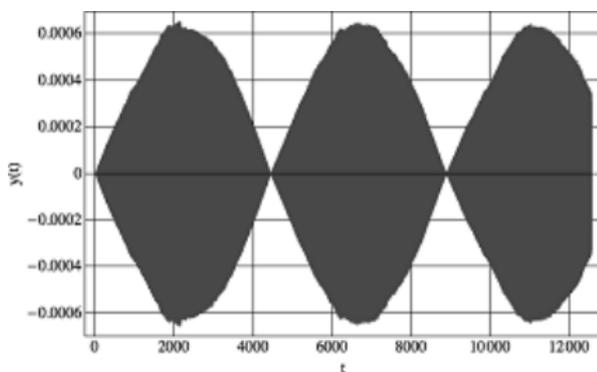
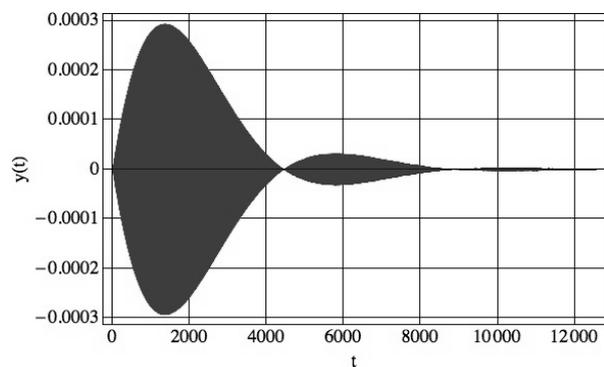


Рис. 7. Корректное решение ТЕСТОВ 1-4 при $TOL = 0.001$, – методы M2 и M3 из Си библиотеки SADEL

На рис. 8 представлен результат качественно неверного (не корректного) решения теста 2 неявным методом BDF из библиотеки C-Library NAG (а).



а) метод BDF из библиотеки C-Library NAG



б) методы M2 и M3 из Си библиотеки SADEL

Рис. 8. Решение ТЕСТа 4 при $TOL = 0.001$

Предупреждений о некорректном решении в программе-решателе библиотеки C-Library NAG не было. Следует отметить, что тест 1 удалось корректно решить только с помощью описанных выше алгоритмов и программ.

Заключение

Разработка описанных в статье алгоритмов и программ-решателей систем ОДУ-ДАУ для библиотеки SADEL позволяет сделать следующие выводы.

1) Математические модели непрерывных динамических процессов в технических системах и объектах, состояние которых описывается как дифференциальными, так и алгебраическими переменными, желательно получать в расширенном дифференциально-алгебраическом координатном базисе переменных на основе фундаментальных физических и химических законов в форме неавтономных систем ДАУ, не разрешенных относительно производных, и решать эти системы без каких-либо эквивалентных математических преобразований и без приведения систем ДАУ к нормальной форме Коши.

2) Для достоверного и корректного решения систем ДАУ при невысоких требованиях к математической точности результатов следует использовать АL-устойчивые методы интегрирования. При использовании других методов интегрирования необходимо гарантировать устойчивость численного решения при увеличении шага интегрирования в случае невысоких значений параметра ϵ_{rs} или ограничивать максимальный размер шага интегрирования, но это может приводить к непроизводительным затратам машинного времени.

Дальнейшие исследования направлены на разработку эффективных методов и алгоритмов автоматического выбора шага интегрирования для АL-устойчивых неявных методов численного решения систем ОДУ-ДАУ высокой и сверхвысокой размерности.

Список литературы

- [1]. *Петров Ю.П.* Обеспечение достоверности и надежности компьютерных расчетов. СПб.: БХВ-Петербург. 2012. 160 с.
- [2]. *Петров Ю.П.* Записки профессора. СПб.: БХВ-Петербург. 2012. 176 с.
- [3]. *Норенков И.П., Трудоношин В.А., Федорук В.Г.* Метод формирования математических моделей для адаптируемых программных комплексов анализа радиоэлектронных схем / Радиотехника. 1986. № 9. С.67-72.
- [4]. *Хайпер Э., Норсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / Пер. с англ. И.А. Кульчицкой и С.С. Филиппова. Под ред. С. С. Филиппова. М.: Мир. 1990. 512 с. (Д. Hairer, S.P. Norsett, G. Wanner. Solving ordinary Differential Equations i Monstiff Problems)
- [5]. *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи: Пер. с англ. М.: Мир. 1999. 685 с.

- [6]. *Butcher J.C.* Numerical methods for ordinary differential equations. 2nd ed. John Wiley & Sons Ltd. 2008. 484 p.
- [7]. *Жук Д.М., Маничев В.Б., Сахаров М.К.* SADEL – библиотека «сверхточных» решателей для программного комплекса ПА10 (SADEL-PA10) // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем - 2012. Сборник трудов / под общ. ред. академика РАН А.Л. Стемпковского. М.: ИППМ РАН. 2012. С. 147-152. Режим доступа: <http://www.mes-conference.ru/data/year2012/pdf/D12.pdf> (дата обращения: 10.10.2015)
- [8]. *Маничев В.Б., Жук Д.М., Витюков Ф.А.* Метод математического тестирования программ анализа переходных процессов в САПР электронных схем // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем - 2014. Сборник трудов / под общ. ред. академика РАН А.Л. Стемпковского. М.: ИППМ РАН, 2014. Часть I. С. 83-88. Режим доступа: <http://www.mes-conference.ru/data/year2014/pdf/D005.pdf> (дата обращения: 10.10.2015)
- [9]. *Жук Д.М., Маничев В.Б., Ильницкий А.О.* Методы и алгоритмы решения дифференциально-алгебраических уравнений для моделирования систем и объектов во временной области. Часть 1. // Информационные технологии. 2010. №7. С. 16-24
- [10]. *Скворцов Л.М.* Явный многошаговый метод численного решения жестких дифференциальных уравнений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2007. Т. 47. № 6. С. 959-967.