

Численное моделирование гибридных систем методом Рунге—Кутты второго порядка точности*

Е. А. НОВИКОВ

Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, Россия

e-mail: novikov@icm.krasn.ru

Ю. В. ШОРНИКОВ

Новосибирский государственный технический университет, Россия

e-mail: shornikov@inbox.ru

The control inequality for stability of the explicit two-phase Runge—Kutta method is obtained. For hybrid systems with the event function the control algorithm for modeling step is developed.

Введение

Для многих технических задач характерны события, которые при моделировании процессов обыкновенными дифференциальными уравнениями приводят к разрывам в первых производных от фазовых переменных. Такие комбинированные дискретно-непрерывные системы называют гибридными системами, или системами с переключением, или негладкими системами. События срабатывают в моменты времени, которые соответствуют нулям некоторой алгебраической событийной функции. Известно, что все существующие способы поиска точек разрыва склонны к сбоям, когда событие происходит в окрестности особых точек модели, где правая часть системы ОДУ не определена. Ошибки происходят из-за того, что существующие алгоритмы слепо пересекают границу особых областей, проверяя вероятное переключение события после его свершения. Во многих случаях проблема усугубляется жесткостью и большой размерностью рассматриваемой задачи. Алгоритм обнаружения смены состояния, представленный здесь, обходит это ограничение, используя строго построенный экстраполяционный полином, который применяется при выборе шага интегрирования. За счет этого проверка возможной смены состояния осуществляется до численного интегрирования. Это позволяет избежать вычисление правой части ОДУ в потенциально опасных областях.

При решении задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности в ряде случаев возникает необходимость применения алгоритмов на основе явных методов. Алгоритмы интегрирования на основе неявных или полуявных формул, как правило, используют обращение матрицы Якоби, что в данном случае есть отдельная трудоемкая задача. В такой ситуации предпочтительнее применять алгоритмы на основе явных формул, если жесткость задачи позволяет за разумное время получить приближение к решению.

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 08-01-00621) и Президентской программы “Ведущие научные школы РФ” (грант № НШ-3431.2008.9).

© Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, 2008.

Современные алгоритмы на основе явных методов в большинстве своем не приспособлены для решения жестких задач по следующей причине. Обычно алгоритм управления шагом интегрирования строится на контроле точности численной схемы. Это естественно, потому что основной критерий — точность нахождения решения. Однако при применении алгоритмов интегрирования на основе явных формул для решения жестких задач этот подход приводит к потере эффективности и надежности, потому что на участке установления вследствие противоречивости требований точности и устойчивости шаг интегрирования раскачивается. В лучшем случае это вызывает множество возвратов (повторных вычислений решения), а шаг выбирается значительно меньше допустимого. Этого можно избежать, если наряду с точностью контролировать и устойчивость численной схемы.

В настоящее время выделяют два подхода к контролю устойчивости [1, 2]. Первый связан с оценкой максимального собственного числа матрицы Якоби f_y через ее норму с последующим контролем (наряду с точностью) неравенства $\|hf_y\| \leq D$ [1], где положительная постоянная D зависит от размера области устойчивости. Очевидно, что для явных методов, где матрица Якоби не участвует в вычислительном процессе, это приводит дополнительно к ее нахождению и, следовательно, к значительному увеличению вычислительных затрат. Второй подход основан на оценке максимального собственного числа λ_{\max} матрицы Якоби степенным методом через приращения правой части системы дифференциальных уравнений с последующим контролем неравенства $|h\lambda_{\max}| \leq D$ [2]. Во всех рассмотренных ситуациях такая оценка фактически не вызывает увеличения вычислительных затрат [3]. Следует отметить, что в [2, 3] предполагается наличие в явном методе не менее трех стадий.

Цель данной работы — построение метода типа Рунге—Кутты второго порядка точности с контролем точности и устойчивости для решения гибридных систем, в том числе жестких.

1. Метод второго порядка точности

При численном решении задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

рассмотрим явный двухстадийный метод типа Рунге—Кутты вида [4]:

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2, \quad k_1 = hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + \beta k_1), \quad (2)$$

где y и f — вещественные N -мерные вектор-функции; t — независимая переменная; h — шаг интегрирования; k_1 и k_2 — стадии метода; p_1, p_2, β — числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (2). В случае неавтономной системы

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

схема (2) записывается в виде

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2, \quad k_1 = hf(t_n, y_n), \quad k_2 = hf(t_n + \beta h, y_n + \beta k_1).$$

Ниже для сокращения выкладок будем рассматривать задачу (1). Однако построенные методы можно применять для решения неавтономных задач.

Получим соотношения на коэффициенты метода (2) второго порядка точности. Для этого разложим стадии k_1 и k_2 в ряды Тейлора по степеням h до членов с h^3 включительно и подставим в первую формулу (2). В результате получим

$$y_{n+1} = y_n + (p_1 + p_2)hf_n + \beta p_2 h^2 f'_n f_n + 0.5\beta^2 p_2 h^3 f''_n f_n^2 + O(h^4),$$

где элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n , $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$, $f''_n = \partial^2 f(y_n)/\partial y^2$. Точное решение $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf + 0.5h^2 f' f + \frac{h^3}{6}(f'' f^2 + f'^2 f) + O(h^4),$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$. Пусть $y_n = y(t_n)$. Сравнивая полученные ряды для точного и приближенного решений до членов с h^2 , запишем условия второго порядка точности схемы (2), которые имеют вид

$$p_1 + p_2 = 1, \quad \beta p_2 = 0.5.$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_n схемы (2) можно записать следующим образом:

$$\delta_n = \frac{2 - 3\beta}{12} h^3 f'' f^2 + \frac{1}{6} h^3 f'^2 f + O(h^4).$$

Построим неравенство для контроля точности вычислений метода второго порядка. Для этого рассмотрим вспомогательную схему

$$y_{n+1,1} = y_n + k_1$$

первого порядка точности. С помощью идеи вложенных методов оценку ошибки $\varepsilon_{n,2}$ метода второго порядка можно найти по формуле

$$\varepsilon_{n,2} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = p_2(k_2 - k_1).$$

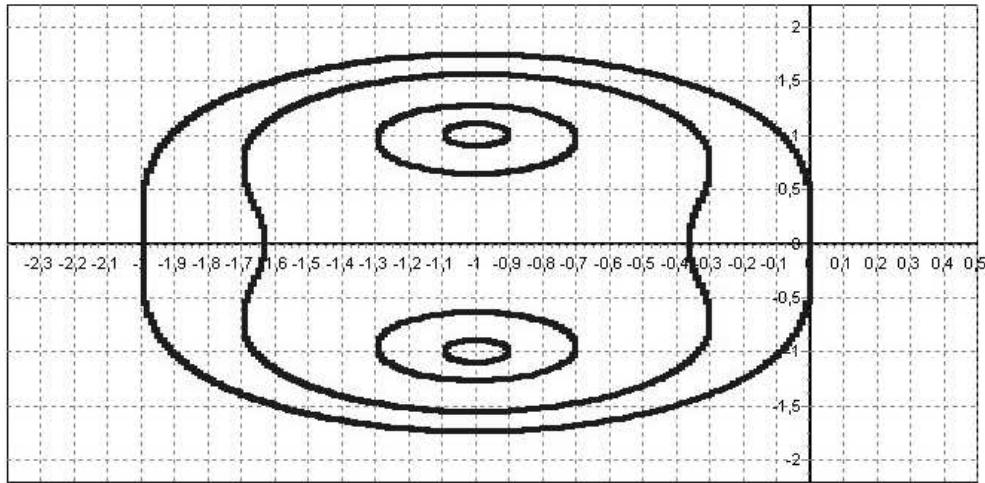
Для повышения надежности данной оценки выберем $\beta = 1$. Тогда стадия k_1 вычисляется в точке t_n , а k_2 — в точке t_{n+1} . Как показывают расчеты, использование производных решения в крайних точках шага приводит к более надежному неравенству для контроля точности вычислений. При $\beta = 1$ коэффициенты метода второго порядка определяются однозначно: $p_1 = p_2 = 0.5$, а локальная ошибка δ_n и неравенство для контроля точности вычислений имеют, соответственно, вид

$$\delta_n = -\frac{1}{12} h^3 f'' f + \frac{1}{6} h^3 f'^2 f + O(h^4), \quad 0.5 \|k_2 - k_1\| \leq \varepsilon,$$

где $\|\cdot\|$ — некоторая норма в R^N , ε — требуемая точность интегрирования.

Теперь построим неравенство для контроля устойчивости (2) предложенным в [2] способом. Для этого рассмотрим вспомогательную стадию $k_3 = hf(y_{n+1})$. Заметим, что k_3 совпадает со стадией k_1 , которая применяется на следующем шаге интегрирования, и поэтому ее использование не приводит к дополнительным вычислениям правой части системы (1). Запишем стадии k_1 , k_2 и k_3 применительно к задаче $y' = Ay$, где A есть матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим

$$k_1 = X y_n, \quad k_2 = (X + X^2) y_n, \quad k_3 = (X + X^2 + 0.5X^3) y_n,$$



Область устойчивости метода второго порядка точности

где $X = hA$. Легко видеть, что

$$k_2 - k_1 = X^2 y_n, \quad 2(k_3 - k_2) = X^3 y_n.$$

Тогда согласно [3] оценку максимального собственного числа $v_{n,2} = h\lambda_{n \max}$ матрицы Якоби системы (1) можно вычислить по формуле

$$v_{n,2} = 2 \max_{1 \leq i \leq N} (|k_3^i - k_2^i| / |k_2^i - k_1^i|). \quad (3)$$

Область устойчивости метода второго порядка, полученная в инструментальной среде ИСМА [5], показана на рисунке.

Интервал устойчивости численной схемы (2) приблизительно равен двум. Поэтому для контроля ее устойчивости можно применять неравенство $v_{n,2} \leq 2$.

Полученную оценку (3) можно считать грубой потому что: 1) вовсе не обязательно максимальное собственное число сильно отделено от остальных; 2) в степенном методе применяется мало итераций; 3) дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (1). Поэтому здесь контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1} вычислим следующим образом. Новый шаг h^{ac} по точности определим по формуле $h^{ac} = q_1 h_n$, где h_n есть последний успешный шаг интегрирования, а q_1 , с учетом соотношения $k_2 - k_1 = O(h_n^2)$, задается уравнением $q_1^2 \|k_2 - k_1\| = \varepsilon$. Шаг h^{st} по устойчивости зададим формулой $h^{st} = q_2 h_n$, где q_2 , с учетом равенства $v_{n,2} = O(h_n)$, определяется из уравнения $q_2 v_{n,2} = 2$. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1}^{pro} вычисляется по следующей формуле:

$$h_{n+1}^{pro} = \max[h_n, \min(h^{acc}, h^{st})]. \quad (4)$$

Данная формула позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Именно наличие такого участка существенно ограничивает возможности применения явных методов для решения жестких задач.

2. Гибридная система

Рассмотрим задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad g(y, t) \leq 0, \quad (5)$$

где $g(y, t)$ — событийная функция, или нелинейный предохранитель. Поскольку многие модели, представляющие интерес, линейны, будем рассматривать их как наиболее важный класс событийных функций. Заметим, что любой нелинейный предохранитель можно привести к линейному виду добавлением дополнительной фазовой переменной $x = g(y, t)$. В результате задачу (5) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} y' &= f(y), \\ x' &= \frac{\partial g}{\partial y} f(y) + \frac{\partial g}{\partial t}, \\ x &\leq 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь принимается, что событийная функция линейна. Ниже для простоты будем предполагать, что исходная задача скалярная. Однако все приведенные ниже рассуждения распространяются на системы. 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 не определена. С другой стороны, явные методы известны плохой устойчивостью. Поэтому здесь будем использовать построенный выше метод (2) с контролем точности и устойчивости. В этом случае событийная динамика описывается соотношением

$$g_{n+1} = g(y_n + 0.5h_{n+1}^p[f_n + f_{n+\beta}], t_n + h_{n+1}^p), \quad (7)$$

где $f_n = f(y_n)$ и $f_{n+\beta} = f(y_n + \beta h f_n)$. Отметим, что функция $f_{n+\beta}$ вычисляется в потенциально опасной точке. Поэтому рассмотрим событийную функцию

$$g_{n+1} = g(y_n + h_{n+1}^p f_n, t_n + h_{n+1}^p), \quad (8)$$

записанную на решении, полученном явным методом Эйлера. Разлагая g_{n+1} в ряд Тейлора и учитывая линейность $g(y, t)$, имеем

$$g_{n+1} = g_n + h_{n+1}^p \left(\frac{\partial g_n}{\partial y} f_n + \frac{\partial g_n}{\partial t} \right), \quad (9)$$

где

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

В итоге получили зависимость g_{n+1} от прогнозируемого шага h_{n+1}^p .

Теорема [6]. Выбор шага по формуле

$$h_{n+1}^p = (\gamma - 1)g_n / \left[\frac{\partial g_n}{\partial y} f_n + \frac{\partial g_n}{\partial t} \right], \quad (10)$$

где $\gamma \in [0, 1)$, обеспечивает поведение событийной динамики как устойчивой линейной системы, которая приближается к поверхности $g(y, t) = 0$. Кроме того, если $g(y_0, t_0) < 0$, то $g(y_n, t_n) \leq 0$ для всех n .

Доказательство. Подставив (10) в (9), имеем

$$g_{n+1} = \gamma g_n. \quad (11)$$

Преобразовав рекуррентно (11), получим

$$g_{n+1} = \gamma^{n+1} g_0.$$

Учитывая, что $\gamma < 1$, имеет место $g_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Кроме того, из соотношения $\gamma \geq 0$ следует, что функция g_n не меняет знака. Следовательно, при $g_0 < 0$ будет выполняться $g_n \leq 0$ для всех n . Тогда событийная функция никогда не пересечет потенциально опасную область $g(y_n, t_n) = 0$, что завершает доказательство. \square

Теперь сформулируем алгоритм интегрирования с учетом прогноза шага через событийную функцию. Пусть решение y_n в точке t_n вычислено с шагом h_n . Кроме того, известны значения стадий k_1 и k_2 метода (1), а также вспомогательной стадии k_3 с предыдущего шага. Тогда следующий шаг можно выполнить по определенному правилу.

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

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

Шаг 3. Вычисляется шаг h_{n+1}^p по формуле (10).

Шаг 4. Вычисляется новый шаг h_{n+1} по формуле

$$h_{n+1} = \min(h_{n+1}^p, h_{n+1}^{pro}),$$

где h_{n+1}^{pro} задан соотношением (4).

Шаг 5. Выполняется следующий шаг интегрирования.

Заключение

1. Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, потому что оценка максимального собственного числа матрицы Якоби системы (1) осуществляется через ранее вычисленные стадии и не приводит к росту числа вычислений функции f . Такая оценка получается грубой. Однако применение контроля устойчивости в качестве ограничителя на рост шага позволяет избежать негативных последствий грубоści оценки.

2. Предложенный способ прогноза шага через событийную функцию распространяется на все явные методы типа Рунге—Кутты, потому что при выборе шага используется только явный метод Эйлера.

Список литературы

- [1] SHAMPINE L.M. Implementation of Rosenbrok method // ACM Transaction on Mathematical Software. 1982. Vol. 8, № 5. P. 93–113.
- [2] НОВИКОВ Е.А., НОВИКОВ В.А. Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений // Докл. АН СССР. 1984. Т. 277, № 5. С. 1058–1062.
- [3] НОВИКОВ Е.А. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997. 197 с.
- [4] КНАУВ Л.В., ЛАЕВСКИЙ Ю.М., НОВИКОВ Е.А. Алгоритм интегрирования переменного порядка и шага на основе явного двухстадийного метода Рунге–Кутты // СибЖВМ. 2007. Т. 10, № 2. С. 177–185.
- [5] ШОРНИКОВ Ю.В., НОВИКОВ Е.А., СОЛОДОВНИКОВА М.В. Программа исследования областей устойчивости численных методов «RStable» // Инновации в науке и образовании. 2007. № 3(26). С. 36.
- [6] ESPOSITO J., KUMAR V., PAPPAS, G.J. Accurate event detection for simulating hybrid systems // Hybrid Systems: Computation and Control (HSCC). Vol. LNCS 2034. Springer–Verlag, 1998.

Поступила в редакцию 28 ноября 2007 г.