Адаптивные композиционные решатели ОДУ на основе полуявных алгоритмов

Д. Н. Бутусов, В. Ю. Островский, В. Ю. Мартынов, Д. О. Пестерев, В. Г. Рыбин Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина) dnbutusov@etu.ru

Аннотация. В статье рассматриваются алгоритмы управления шагом интегрирования в композиционных фрактальных решателях ОДУ. Представлено несколько способов оценки локальной погрешности, включая новый метол коммутационного анализа ошибки, основанный на особых свойствах полуявных методов. Экспериментально показано, что при применении предложенных алгоритмов, производительность адаптивных композиционных решателей превосходит производительность композиционных решателей, использующих стандартные способы управления шагом. Приводятся результаты вычислительных экспериментов, демонстрирующие возможность сохранения геометрических свойств решателя фрактального при использовании коммутационного способа оценки локальной погрешности интегрирования в алгоритме управления шагом.

Ключевые слова: композиционные решатели ОДУ; фрактальные методы; полуявное интегрирование; адаптивное управление шагом; хаотические системы; мемристивная цепь

І. Введение

Компьютерное моделирование непрерывных динамических систем, описываемых обыкновенными уравнениями (ОДУ), дифференциальными требует применения методов численного интегрирования. Наиболее распространенные решатели ОДУ, такие как экстраполяционные методы и методы Рунге-Кутты, обычно используют алгоритмы адаптивного управления шагом для повышения производительности. Однако при моделировании некоторых динамических требуются численные методы интегрирования сособыми свойствами [1]. Такие методы обычно называют симметричными, геометрическими или обратимыми интеграторами [2]. В работе [3] было показано, что для получения адекватной дискретной модели и сохранения фазового объема при долгосрочном моделировании некоторые хаотические системы требуют использования симметричных интеграторов. Среди известных способов повышения порядка точности только композиционные схемы позволяют сохранить геометрические свойства опорного метода.

Таким образом, разработка алгоритмов управления шагом композиционных решателей ОДУ является актуальной задачей. Наиболее распространенные явные

способы оценки локальной погрешности нарушают свойство обратимости [4]. Ряд таких явных алгоритмов управления шагом для геометрических интеграторов были предложены в работах [4-6], однако с ограниченной оценкой производительности и лишь для гамильтоновых систем. Неявные алгоритмы, основанные на «текущей» и «последующей» информации о локальной погрешности, были введены в работах [7, 8]. Однако, при моделировании хаотических систем только фрактальные композиционные полуявные методы могут показывать численную эффективность, сравнимую с явными одношаговыми методами Рунге-Кутты [3]. В настоящем исследовании сравнивается несколько алгоритмов управления шагом, основанных на различных подходах оценки локальной погрешности.

В качестве экспериментальных результатов приводятся графики вычислительной эффективности различных методов, а также оценка времени, на котором сохраняется свойство обратимости решателей.

II. ТЕСТОВЫЕ СИСТЕМЫ

Для вычислительных экспериментов были выбраны простейшая цепь с мемристором [9] и трехмерная хаотическая система С. Буали [10]. Простейшая мемристивная схема состоит всего из трех элементов и может быть описана следующей системой ОДУ:

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = \gamma x - \beta y(z^2 - 1) \\ \dot{z} = -y - \alpha z + yz \end{cases}$$
 (1)

Параметры системы $\alpha = 0.6$, $\beta = 0.5$, $\gamma = 0.33$ соответствуют хаотическому режиму колебаний.

Математическая модель системы Буали состоит из трех уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x} = \alpha x (1 - y) - \beta z \\ \dot{y} = -\gamma y (1 - x^2) \\ \dot{z} = \mu x \end{cases}$$
 (2)

где $\alpha = 3$, $\beta = 2.2$, $\gamma = 1$, $\mu = 0.001$. При этих параметрах система имеет одну точку равновесия и порождает странный аттрактор, представляющий собой поверхность с двумя равными двойными петлями, соединенными парой траекторий [10].

III. ФРАКТАЛЬНЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МЕТОДЫ

Пусть Φ_h есть функция приращения опорного обратимого метода и $\delta_1, \dots, \delta_s$ — вещественные числа, сумма которых равна 1. Композиция функций приращения с шагами интегрирования $\delta_1 h, \delta_2 h, \dots, \delta_s h$ называется композиционным методом ψ_h и записывается как

$$\psi_h = \Phi_{\delta,h} \circ \dots \circ \Phi_{\delta,h},$$

Целью композиции является повышение порядка точности конечно-разностной схемы с сохранением желаемых геометрических свойств опорного метода, в том числе обратимости [1]. На рис. 1 показана динамика внутренних шагов для 7-стадийного композиционного метода 6-го порядка.

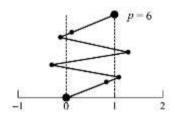


Рис. 1. График динамики внутреннего шага для схемы s7or6

Традиционно для вычисления коэффициентов δ используется формула, предложенная X. Йошидой [11]. Однако композиционные методы Йошиды обладают плохой устойчивостью и низкой вычислительной эффективностью. В [12] М. Сузуки предложил модифицированный метод вычисления коэффициентов δ :

$$\delta_c = -\frac{(s-1)^{1/(n+1)}}{s - (s-1)^{1/(n+1)} - 1},$$

$$\delta_s = \frac{1}{s - (s-1)^{1/(n+1)} - 1}$$
(3)

где s — конечное число стадий композиционной схемы, например, $s=3,\,5,\,7...;\,n$ — порядок точности опорного метода; δ_c — коэффициент центральной стадии и δ_s — коэффициенты других стадий.

Описанный подход позволяет построить композиционный решатель ОДУ произвольного порядка точности с нечетным числом стадий. Для повышения порядка точности схемы интегрирования процедура

повторяется путем разбиения каждой стадии на этапы с теми же коэффициентами δ . По этой причине методы получили название фрактальных.

Рассмотрим пятистадийный (s5or4) и семистадийный (s7or4) фрактальные алгоритмы четвертого порядка точности, основанные на опорном методе второго порядка. Значения коэффициентов для метода s5or4 вычисляются как:

$$\delta_3 = -\frac{4^{1/3}}{4 - 4^{1/3}}$$

$$\delta_{1,2,4,5} = \frac{1}{4 - 4^{1/3}}$$
(4)

Аналогично, коэффициенты s7or4 метода имеют вид:

$$\delta_4 = -\frac{6^{1/3}}{6 - 6^{1/3}}$$

$$\delta_{1,2,3,5,6,7} = \frac{1}{6 - 6^{1/3}}$$
(5)

IV. АЛГОРИТМЫ УПРАВЛЕНИЯ ШАГОМ

В данном разделе изложены алгоритмы управления шагом фрактальных решателей. Все описанные подходы используют общую идею изменения значения шага в зависимости от найденной оценки локальной погрешности решения. В общем виде алгоритмы управления шагом реализуют следующую последовательность действий:

- 1. Расчет решения системы с текущим значением шага.
 - 2. Оценка локальной погрешности.
- 3. Вычисление нового значения шага на основе оценки локальной погрешности по формуле [1]:

$$h_{new} = 0.94h \left(0.65 \frac{tol}{err}\right)^{\frac{1}{2k-1}}$$
 (3)

где h_{new} — новое значение шага интегрирования, h — текущее значение шага, tol — требуемая абсолютная или относительная точность, err — значение локальной погрешности, 2k — порядок точности композиционной схемы.

4. Алгоритм перестает выполняться при выполнении условия $err \le tol$ или при достижении определенного числа итераций.

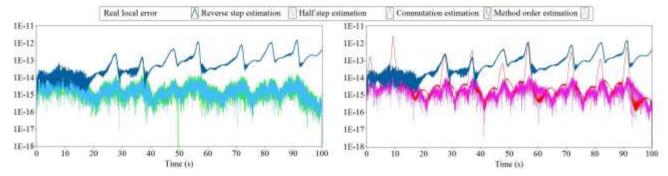


Рис. 2. Оценка точности различных способов оценки локальной погрешности

Можно заметить, что наиболее важным этапом в алгоритме управления шагом является оценка локальной погрешности. В нашем исследовании мы рассматриваем четыре различных подхода для оценки локальной погрешности.

- Оценка методом половинного шага (HSE): этот классический метод оценивает локальную погрешность на шаге как разность между двумя параллельными решениями, полученными с шагами h и h / 2.
- 2. Оценка на основе обращенного шага (RSE): этот метод оценивает локальную погрешность как разность между решением, полученным с шагом h, и «обратным» решением, рассчитанным с отрицательным значением шага -h.
- 3. Оценка по методу коммутаций (СЕЕ): локальная погрешность оценивается как разность между решениями одного порядка точности, но с различными матрицами коммутаций опорных методов [13].
- Оценка на основе метода другого порядка (МОЕ): локальную погрешность рассчитывается как разность между двумя параллельными решениями, полученными парой методов разного порядка точности. В нашем исследовании основной метод строился по схеме s7or4, а вспомогательный – по схеме s7or6.

V. Результаты эксперимента

Целью нашего исследования являлся поиск наилучшего способа оценки локальной погрешности для адаптивного управления шагом при моделировании хаотических систем (1) и (2). При этом использовались следующие параметры моделирования: время моделирования t = 40, максимальный шаг интегрирования $h_{max} = 1$, минимальный шаг интегрирования $h_{min} = 0.001$. Заданная точность численного решения tol изменялась в диапазоне от 10^{-5} до 10-10. В качестве опорного метода использовался полуявный метод CD [13] фрактальными c коэффициентами Сузуки [12].

Первый эксперимент был направлен на исследование способов оценки погрешности с точки зрения близости получаемых значений к реальным значениям локальной

погрешности (рис. 2). Можно заметить, что оценка по методу СЕЕ показывает наилучшие результаты, и можно ожидать, что данный метод покажет высокую эффективность.

На следующем этапе исследовалась вычислительная эффективность адаптивных фрактальных решателей с различными алгоритмами управления шагом. На рис. 3 показаны графики эффективности, отражающие взаимосвязь между достигаемой точностью и временем расчета.

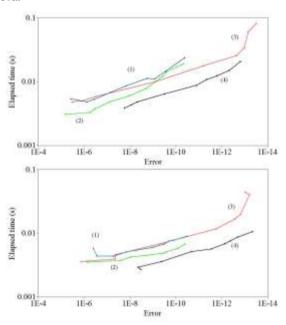


Рис. 3. Графики производительности при моделировании мемристивной цепи и системы Буали с помощью адаптивного фрактального решателя с оценкой локальной ошибки интегрирования (1) — методом RSE, (2) — методом HSE, (3) — методом СЕЕ, (4) — методом МОЕ

Из рис. З видно, что адаптивный фрактальный решатель с оценкой локальной ошибки методом МОЕ показывает наилучший результат. Тем не менее, метод оценки локальной погрешности на основе коммутаций так же эффективен, позволяя моделировать систему (1) с наибольшей точностью. Решатели, использующие оценки HSE и RSE занижают реальное значение локальной погрешности и показывают меньшую эффективность.

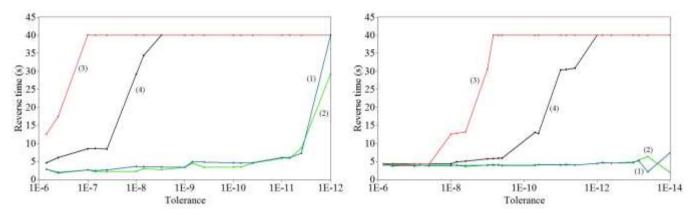


Рис. 4. Графики обратимости при решении систем (1) и (2) фрактальными адаптивными решателями с оценкой локальной погрешности: (1) – методом RSE, (2) – методом HSE, (3) – методом CEE, (4) – методом MOE

Рассмотрим заключительную часть экспериментов, посвященную оценке изменения геометрических свойств фрактальных конечно-разностных схем при обращении решения. График обратимости показывает, насколько может быть обращено решение ОДУ, прежде разойдется с «прямым» решением более чем на заданный предел точности (1%). Горизонтальная ось графика соответствует заданной обратимости точности моделирования. Для адаптивного управления шагом при обратном решении ОДУ требуется иная формула расчета нового шага, поэтому мы упростили процедуру обращения решения путем использования уже рассчитанного массива шагов. Графики обратимости при решении систем (1) и (2) показаны на рис. 4. Можно заметить, что фрактальный решатель с оценкой погрешности на основе метода СЕЕ превосходит другие алгоритмы по обратимости. Вторым является метод, оценивающий локальную ошибку методом МОЕ. Возможной причиной этого является тот, что оба параллельных решателя, используемых в алгоритме СЕЕ, имеют близкие области устойчивости в отличие от решателей метода МОЕ. При отрицательных шагах может наблюдаться плохая сходимость алгоритма МОЕ, и, как следствие, нарушение обратимости. Два других алгоритма управления шагом не могут быть эффективно использованы при обращении решения и не сохраняют геометрических свойств композиционных схем.

VI. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены теоретические И практические особенности применения адаптивных фрактальных решателей ОДУ, основанных полунеявном интегрировании. Были описаны несколько методов оценки локальной погрешности. Экспериментально исследована вычислительная эффективность полуявных фрактальных решателей. Наилучшую производительность показали решатели, использующие оценку локальной погрешности на основе разности между методов различного порядка точности и решатели с оценкой ошибки методом коммутаций. Для изучения эффективности адаптивных фрактальных решателей при обращении решения были введены графики обратимости. Показано, что метод оценки локальной погрешности на основе коммутационного анализа является перспективным

способом управления шагом фрактальных полуявных решателей хаотических ОДУ.

Список литературы

- [1] Hairer E., Lubich C., Wanner G. Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. Springer Science & Business Media, 2006. V. 31.
- [2] Kahan W, Li R.C. Composition constants for raising the orders of unconventional schemes for ordinary differential equations. *Mathematics of Computation of the American Mathematical Society*, 1997, V. 66, no. 219, pp. 1089-1099. DOI: 10.1090/S0025-5718-97-00873-9
- [3] Butusov D.N., Goryainov S.V., Andreev V.S., Barashok K.I., Kozak M.N. Fractal Composition ODE Solvers Based on Semi-implicit Methods *Proc. XXI IEEE International Conference on Soft Computing and Measurements (SCM)*, Saint Petersburg, 2018.
- [4] Hairer E., Gustaf S. Explicit, time reversible, adaptive step size control. SIAM Journal on Scientific Computing, 2005, V. 26, no. 6, pp. 1838-1851. DOI: 10.1137/040606995.
- [5] Huang W., Leimkuhler B. The adaptive Verlet method. SIAM Journal on Scientific Computing, 1997, V. 18., no. 1, pp. 239-256. DOI: 10.1137/S1064827595284658.
- [6] Holder T., Leimkuhler B., Reich S. Explicit variable step-size and timereversible integration. *Applied Numerical Mathematics*, 2011, V. 39, no. 3-4, pp. 367-377. DOI: 10.1016/S0168-9274(01)00089-7.
- [7] Hut P., Makino J., McMillan S. Building a better leapfrog. The Astrophysical Journal, 1995, no. 443, pp. L93-L96. DOI: 10.1086/187844.
- [8] Stoffer D. Variable steps for reversible integration methods. *Computing*, 1995, V. 55, no. 1, pp. 1-22. DOI: 10.1007/BF02238234.
- [9] Muthuswamy B., Chua L. O. Simplest chaotic circuit. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 2010, V. 20, no. 05, pp. 1567-1580. DOI: 10.1142/S0218127410027076.
- [10] Bouali S. A 3D Strange Attractor with a Distinctive Silhouette. The Butterfly Effect Revisited. *arXiv preprint arXiv:1311.6128*, 2013.
- [11] Yoshida H. Construction of higher order symplectic integrators. *Physics Letters A*, 1990, V. 150, no. 5-7, pp. 262-268. DOI: 10.1016/0375-9601(90)90092-3.
- [12] Suzuki M. Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations. *Physics Letters A*, 1990, V. 146, no. 6, pp. 319-323. DOI: 10.1016/0375-9601(90)90962-N.
- [13] Butusov, D. N., T. I. Karimov, and V. Y. Ostrovskii. Semi-implicit ODE solver for matrix Riccati equation. *Proc. IEEE NW Russia Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering Conference (EIConRusNW)*, Saint Petersburg, 2016, pp. 168-172. DOI: 10.1109/EIConRusNW.2016.7448146.