УДК 519.622.2

SADEL – библиотека «сверхточных» решателей для программного комплекса ПА10 (SADEL-PA10)

Д.М. Жук, В.Б. Маничев, М.К. Сахаров

МГТУ имени Н.Э.Баумана,

zhuk@bmstu.ru, manichev@bmstu.ru, max.sfn90@gmail.com

Аннотация **— Библиотека SADEL на языке Си для «сверхточных» решателей систем ОДУ-ДАУ и ЛАУ является практическим результатом многолетних научно-исследовательских работ авторов и является математическим ядром платформы компьютерного моделирования динамических процессов для разнородных (multi-physics, multi-discipline) технических систем и объектов (программный комплекс ПА10 (SADEL-PA10)), превосходящей подобные зарубежные программные продукты MATLAB-SIMULINK, Maple-MapleSim, C-Library NAG в части решения жестких систем ОДУ и плохообусловленных систем ЛАУ. Базовое внедрение ПА10 (SADEL-PA10) – это математическое и компьютерное моделирование динамических систем и объектов при проектировании изделий микроэлектроники, наноэлектроники и мехатроники. Приведены результаты сравнительного тестирования библиотеки.**

Ключевые слова **— математическое моделирование, компьютерное моделирование, системы инженерного анализа, динамические системы, обыкновенные дифференциальные уравнения, дифференциально-алгебраические уравнения, линейные алгебраические уравнения, методы интегрирования.**

I. Введение

В статье используется следующая терминология:

Математическая модель – система обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) или дифференциально-алгебраических уравнений (ДАУ), отображающая функционирование моделируемой динамической системы с требуемой достоверностью и точностью.

Математическое моделирование (modelling) – процесс получения математических моделей на основе фундаментальных законов физики, химии и т.п.

Компьютерная модель – алгоритмическая и программная реализация математической модели.

Компьютерное моделирование (simulation) – процесс получения результатов математического и компьютерного моделирования.

Жесткие системы ОДУ - системы ОДУ со степенью жесткости более 10^6.

Плохообусловленные системы линейных алгебраических уравнений (ЛАУ) - системы ЛАУ с числом обусловленности более 10^6.

Достоверность компьютерного моделирования – соответствие результатов компьютерного моделирования заведомо истинным (обычно экспериментальным) результатам.

Точность компьютерного моделирования – степень отклонения результатов достоверного моделирования от истинных, заведомо точных результатов.

Математическая точность (accuracy) – относительная погрешность нормы векторов решения систем ОДУ-ДАУ и ЛАУ.

Компьютерная точность (precision) – количество верных значащих цифр в компьютерных вычислениях.

«Сверхточное» решение систем ОДУ-ДАУ и ЛАУ - применение методов получения «сверхточных» (extra precision) решений, реализованных в пакетах прикладных математических программ, а также в библиотеках математических программ и описанных в документации на соответствующие пакеты и библиотеки: Maple (http://maplesoft.com - метод Software Floating Point (SFP метод)), MATLAB (http://mathworks.com - метод Variable Precision Arithmetic (VPA метод)), Mathematica (http://wolfram.com - метод Arbitrary Precision Arithmetic (APA метод)), методы библиотеки Intel для "сверхточных" десятичных вычислений (IEEE 754-2008 Decimal Floating-Point for Intel® Architecture Processors [1]).

Библиотека SADEL (Sets of Algebraic and Differential Equations solvers Library) разработана как библиотека «сверхточных» решателей для жестких систем ДАУ и плохообусловленных систем ЛАУ [2].

Главным недостатком реализации вычислительных методов, используемых для анализа динамических процессов при проектировании и управлении в известных программных комплексах моделирования динамических систем, является возможная выдача ошибочных результатов компьютерных вычислений для жестких систем ОДУ и плохообусловленных систем ЛАУ без предупреждения пользователей об их недостоверности. Разработка программной системы ПА10 (SADEL-PA10) направлена на устранение указанного недостатка [2, 3].

II. Обоснование принципов разработки библиотеки SADEL

Численное решение дифференциальных уравнений во многих численных методах их решения сводится к многократному численному решению соответствующих систем алгебраических уравнений [4]. Высокий порядок таких систем и необходимость их многократного решения в процессе математического моделирования предъявляют жесткие требования к эффективности применяемых численных методов решения систем ОДУ-ДАУ и ЛАУ. Эффективность численных методов решения таких уравнений включает в себя два аспекта:

1) точность получаемых решений данных уравнений;

2) затраты машинного времени и оперативной памяти на получение решений.

Быстрый рост производительности вычислительной техники (особенно производительности процессоров компаний Intel и NVIDIA и современных суперкомпьютеров) в последнее время выдвигает на первый план проблему получения достоверности и точности получаемых решений. Причем должна быть обеспечена гарантия получения требуемой достоверности и точности выдаваемых инженерам-проектировщикам результатов компьютерных расчетов и математического моделирования, т.к. ошибки в принятии проектных решений для промышленных изделий и объектов, основанных на этих результатах, стоят очень дорого. При этом надо учесть следующее:

1. Большинство инженеров-проектировщиков не являются специалистами в численных методах и программах для решения различных математических уравнений, поэтому требуемая достоверность и точность должна быть обеспечена для параметров решателей этих уравнений, рекомендуемых для этих решателей по умолчанию.

2. При базовом, начальном математическом моделировании реальных технических систем и объектов не требуется высокая математическая точность выдаваемых пользователю результатов, т.к. параметры математических моделей этих изделий и объектов получены, как правило, экспериментально с невысокой математической точностью. Поэтому заданная математическая точность конечных результатов моделирования по умолчанию может быть невысокой, но она должна быть гарантировано обеспечена. Большинство алгоритмов моделирования сводится к многократному решению систем ЛАУ, которое необходимо получать уже с компьютерной точностью. Аналитически эту проблему не разрешить, например, теоретически умножение квадратной матрицы с постоянными коэффициентами на обратную равно единичной матрице, но для плохо обусловленных матриц при вычислении на компьютере единичную матрицу мы не получим.

В наших работах [2, 3, 5] было показано, что для гарантии получения качественно корректного и достоверного решения систем ОДУ численный метод решения систем ОДУ должен быть AL-устойчивым, т.е. абсолютно (A) устойчивым строго в левой (Left) полуплоскости комплексной плоскости устойчивости методов численного решения систем ОДУ. Программная реализация AL-устойчивых методов в конечном итоге сводится к многократному решению соответствующих систем ЛАУ на каждом шаге численного интегрирования, что, как правило, приводит к нескольким тысячам и более обращений к программе-решателю систем ЛАУ на всем заданном отрезке численного интегрирования. AL-устойчивые методы 2-го и 4-го порядков точности были реализованы в программе DMAN [6]. Решение большого количества тестовых и практических задач математического и компьютерного моделирования динамических систем с помощью этой программы показало, что для получения качественно корректного решения разнообразных систем ОДУ необходимо на всех шагах численного интегрирования обеспечить решение соответствующих тысяч разнообразных систем ЛАУ с гарантированной точностью в 15 верных значащих цифр для всех элементов вектора решений систем ЛАУ, т.е. с удвоенной точностью выполнения простых арифметических операций и элементарных математических функций для типа double представления вещественных чисел алгоритмического языка Си (именно с этой точностью вычисляются все элементы матриц коэффициентов этих тысяч разнообразных систем ЛАУ).

Тестирование показало, что в известных программах-решателях систем ЛАУ эта задача не решена. Итерационные численные методы решения систем ЛАУ не решают эту проблему, т.к. не могут гарантировать указанную выше точность получаемых решений для всех элементов вектора решений систем ЛАУ [7]. Нам удалось решить эту проблему с помощью точных, прямых численных методов решения систем ЛАУ и вышеуказанных методов получения «сверхточных» (extra precision) решений, реализованных в математических пакетах и библиотеках программ [2].

III. Программа решения систем ДАУ

В известных программах-решателях систем ОДУ-ДАУ используются три классические постановки задач решения систем ОДУ-ДАУ.

1) Нормальная форма Коши в координатном базисе переменных состояния (явная форма):

$$dX / dt = F(X, t) \quad ,$$

где X - вектор дифференциальных переменных координатного базиса переменных состояния размерностью

m. F - вектор-функция правых частей системы ОДУ размерностью m. t - независимая переменная (обычно – время).

Заданы начальные условия $X_0=X(0)$ и отрезок интегрирования $t=[0,TK]$, TK – заданный временной отрезок интегрирования.

2) Дифференциально-алгебраическая форма разных индексов в полном координатном базисе (полуявная форма):

$$\begin{cases} dX/dt = F(X,Y,t) \\ G(X,Y) = 0 \end{cases},$$

где Y - вектор алгебраических переменных полного координатного базиса размерностью k. G - вектор-функция размерностью k. Заданы согласованные начальные условия: $X_0=X(0)$ $Y_0=Y(0)$ и отрезок интегрирования $t=[0,TK]$.

3) Дифференциально-алгебраическая форма в полном координатном базисе (неявная форма):

$$G(X, dX/dt, t) = 0, \tag{1}$$

где G - вектор-функция размерностью $m + k$. Заданы согласованные начальные условия и отрезок интегрирования.

Задача (1) была поставлена в полном координатном базисе Л. Петзольд в 1982 г. и была разработана знаменитая программа DASS (Differential Algebraic Systems Solver) на основе метода BDF (Backward Differential Formula) [14].

Задача решения систем ДАУ в расширенном координатном базисе была поставлена в статье [8]:

$$G(PX, X, Y, t) = 0, \tag{2}$$

где $PX=dX/dt$ - вектор производных дифференциальных переменных по времени для расширенного координатного базиса размерностью m. G - вектор-функция размерностью $m + k$. Заданы начальные условия $X_0=X(0)$ и отрезок интегрирования.

Решатель систем ДАУ в библиотеке SADEL решает системы ДАУ в расширенном координатном базисе именно в этой постановке. Были разработаны формулы S-стадийных неявных методов интегрирования систем ДАУ вида (2) в расширенном координатном базисе [9].

$$H_i(PX_{ii}, X_i, X_{n-1}, X_{n-1}, h_n) =$$

$$= h_n \sum_{j=1}^{s} d_{ij} PX_j - \sum_{j=1}^{s} a_{ij} X_j - b_i X_{n-1} - h_n c_i PX_{n-1} = 0$$

$$X_n = X_s, PX_n = PX_s, i = 1,\dots,s, t_n = t_s,$$

s – число стадий, h_n – n – *й шаг интегрирования*,

d_{ij}, a_{ij}, b_i, c_i – параметры метода.

На основе этих формул были разработаны и реализованы три метода интегрирования [6]:

M1 - A-устойчивый неявный метод Эйлера первого порядка точности;

M2 – AL-устойчивый неявный метод второго порядка точности;

M3 - AL-устойчивый неявный метод четвертого порядка точности.

На рис.1 и рис.2. показаны схемы работы алгоритмов для реализации этих методов, основанных на совместном решении систем нелинейных алгебраических уравнений G(X,Y,PX)=0 и систем линейных алгебраических уравнений H(X,PX)=0, сформированных на соответствующих стадиях методов интегрирования.

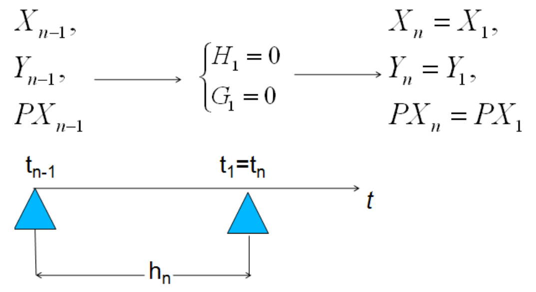

Рис. 1. Схема алгоритма неявных одностадийных одношаговых методов Эйлера и трапеций (M1 и M2 - число стадий *S*=1)

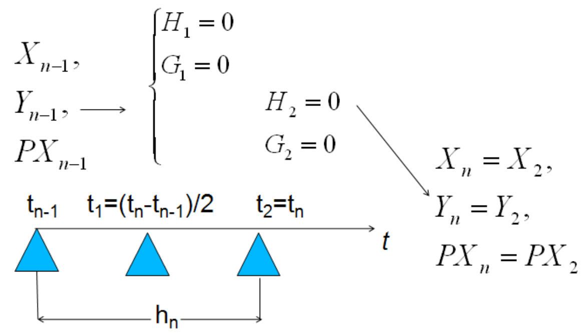

Рис. 2. Схема алгоритма неявных двухстадийных одношаговых методов (M3 - число стадий *S*=2)

IV. ПРОГРАММЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛАУ

Классические постановки задач решения систем ЛАУ получают решения для любых невырожденных систем ЛАУ и не гарантируют компьютерной точности получаемых решений, особенно для плохо обусловленных систем ЛАУ с числом обусловленности многим больше 1. Постановка задачи «сверхточного» решения систем ЛАУ в библиотеке SADEL отличается от классических требованием гарантированного получения решения с точностью в 15 верных значащих цифр (удвоенная точность double precision на языке Си) для всех элементов вектора решений систем ЛАУ.

Были разработаны 3 программы решения систем ЛАУ, включая плохо обусловленные, в данной постановке:

1) Решатель систем ЛАУ методом Гаусса с полными матрицами: LAE_Solver_01.

2) Решатель систем ЛАУ с 3-х диагональными матрицами коэффициентов: LAE_Solver_3diag.

3) Решатель систем ЛАУ методом LU разложения с полными матрицами: LAE_Solver_02.

С помощью данных программ удалось решить с вышеуказанной точностью ряд тестовых плохо обусловленных задач, которые не решаются с данной точностью другими известными решателями систем ЛАУ из соответствующих библиотек стандартных математических программ [2]. В качестве примера рассмотрим тестовую задачу с матрицей Гильберта (Hilbert matrix) 10-го порядка в качестве матрицы коэффициентов системы ЛАУ [10]. Все элементы матрицы коэффициентов и вектора правых частей, как суммы соответствующих строк матрицы коэффициентов, были вычислены с удвоенной точностью. Абсолютно точное решение такой задачи – единичный вектор. При решении с удвоенной точностью на языке Си тестовой задачи с матрицей Гильберта (Hilbert matrix) 10-го порядка с помощью решателя систем ЛАУ библиотеки MAGMA (LAPACK-Linpack) был получен следующий результат:

1.000000000*464697*	0.9999999*60244827*
1.000000*840984605*	0.99999*2393461859*
1.000*036137385782*	0.999*900979283788*
1.000*162025520190*	0.999*843779478675*
1.000*081852296234*	0.999*982030574678*

Курсивом выделены неверные значащие цифры в решении. Соответствующие программы с полными матрицами из библиотеки SADEL получили единичный вектор для этой тестовой задачи с точностью в 15 верных значащих цифр.

V. Результаты сравнительного тестирования решателей ОДУ-ДАУ

Сравнение решателя систем ДАУ в библиотеке SADEL с аналогичными зарубежными решателями систем ОДУ-ДАУ проведено для параметров интегрирования решателей систем ОДУ-ДАУ, рекомендуемых для этих решателей по умолчанию. Все решатели систем ОДУ-ДАУ сравнивались при заданной относительной точности интегрирования TOL=0.001 (в программном комплексе MATLAB это точность, задаваемая по умолчанию). В таблице 1 приведены результаты сравнения только наиболее трудных для современных решателей ОДУ-ДАУ жестких систем ОДУ с многопериодным решением.

Таблица 1

Сравнение решателей ОДУ-ДАУ для жестких систем ОДУ

Решатели ОДУ/Тесты	*SADEL C-Library 2010 Метод M2,M3*	*MATLAB 2007 Метод Ode15s*	*Maple 2007 Метод Rosenb rock*	*NAG C-Library 2012 Метод BDF*
ТЕСТ 1. Уравнения Ван дер Поля $MU=10^6$	+	+	-	+
ТЕСТ 2. Уравнения Ван дер Поля $MU=10^9$	+	-	-	-
ТЕСТ 3. Высоко-добротный фильтр $kt=1$, $ki=1$, $ku=0.01$	+	-	+	-
ТЕСТ 4. Высоко-добротный фильтр $kt=10^{-104}$, $ku=1$, $ki=1$	+	-	-	-
ТЕСТ 5. Локально-неустойчивая система ОДУ $MU=10^6$	+	-	-	-
ТЕСТ 6. Моделирование свечения лазера	+	+	-	+

В таблице 1 сравнивались только методы интегрирования соответствующих решателей систем ОДУ, рекомендуемые в соответствующих математических программных комплексах для решения жестких систем ОДУ-ДАУ. Знак минус означает невозможность получения решения или (в большинстве случаев) качественно неверный результат без всякого предупреждения о возможных ошибках. Ниже приведено краткое описание данных трудных тестов.

ТЕСТ 1, ТЕСТ 2. Пример расчета жесткой системы ОДУ 2-го порядка (MU – параметр жесткости) – тест Ван дер Поля [1].

$$dx_1 / dt = x_2$$
$$dx_2 / dt = -x_1 + MU \cdot (1 - x^2{}_1) \cdot x_2$$
$$x_1(0) = -1, x_2(0) = 1,$$
$$t \in (0, 4.2 \cdot MU)$$

Сравнение программ было проведено для часто встречающихся на практике значений жесткости $MU=10^6$ и $MU=10^9$.

ТЕСТ 3, ТЕСТ 4. Пример моделирования электронной схемы (рис. 3) с многопериодным решением (система ОДУ 5-го порядка) – тест Маничева [11].

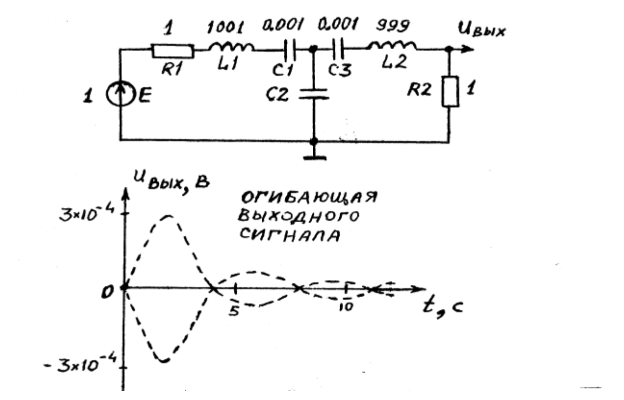

Рис. 3. Тестовая электронная схема – высокодобротный фильтр

Система ОДУ для этих тестов имеет вид:

$$kr = ku / ki, kc = kt \cdot ki / ku, kl = kt \cdot ku / ki$$
$$dx_1 / dt = x_4 / 0.001 \cdot kc$$
$$dx_2 / dt = x_5 / 0.001 \cdot kc$$
$$dx_3 / dt = (x_4 - x_5) / kc$$
$$dx_4 / dt = (ku - x_1 - x_3 - kr \cdot x_4) \cdot / 1001 \cdot kl$$
$$dx_5 / dt = (-x_2 + x_3 - kr \cdot x_5) / 999 \cdot kl$$
$$x_1(0) = 0, x_2(0) = 0, x_3(0) = 0, x_4(0) = 0, x_5(0) = 0$$
$$t \in (0, 12560 \cdot kt)$$

Сравнение программ было приведено для часто встречающихся на практике параметров масштабных коэффициентов по времени, току и напряжению: $kt=1$, $ki=1$, $ku=10^{-2}$, а также для значений параметров $kt=10^{-104}$, $ki=1$, $ku=1$, которые дают трудный тест для современных решателей систем ОДУ.

ТЕСТ 5. Нелинейная жесткая система ОДУ, имеющая локально-неустойчивое решение – тест Скворцова [12].

$$dx_1 / dt = x_2$$
$$dx_2 / dt = MU \cdot (1 - x_1^2) \cdot (x_1 + x_2)$$
$$x_1(0) = 2, x_2(0) = 0, t \in (0, 3)$$

Сравнение программ было проведено для часто встречающегося на практике значения жесткости MU=106.

ТЕСТ 6. Нелинейная жесткая система ОДУ для математического моделирования процессов реального лазера – тест Евстифеева [13].

$$dx_1 / dt = -x_1 \cdot (\alpha \cdot x_2 + \beta) + \gamma$$
$$dx_2 / dt = x_2 \cdot (p \cdot x_1 - \sigma) + \tau \cdot (1 + x_1)$$
$$x_1(0) = -1, x_2(0) = 0, t \in (0, 10^6),$$
$$\alpha = 1.5 \cdot 10^{-18}, \beta = 2.5 \cdot 10^{-6}, \gamma = 2.1 \cdot 10^{-6},$$
$$p = 0.6, \sigma = 0.18, \tau = 0.016$$

Сравнение решателей ОДУ было проведено для параметров реального работающего лазера.

На рисунках 4 – 7 представлены некоторые результаты сравнения решателей ОДУ-ДАУ. Предупреждений о возможном недостоверном решении в решателе библиотеки C-Library NAG не было.

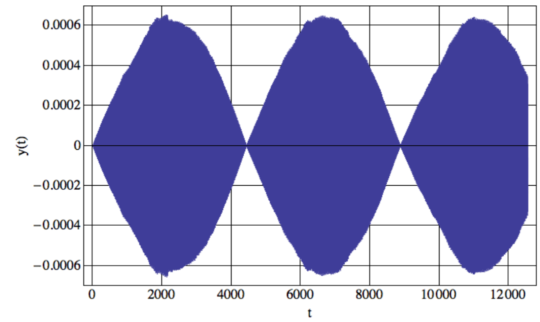

Рис. 4. Решение ТЕСТ 4, полученное с помощью библиотеки C-Library NAG при TOL = 0.001

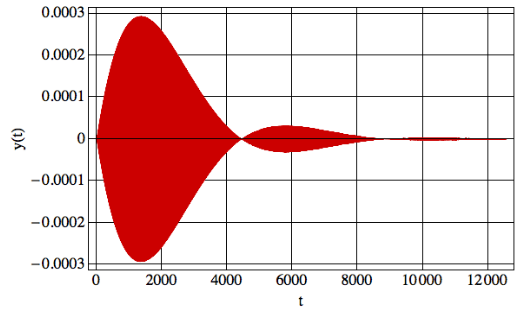

Рис. 5. Правильное решение ТЕСТ 4

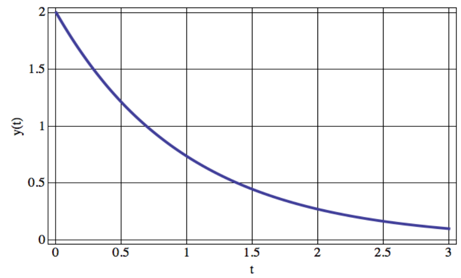

Рис. 6. Решение ТЕСТ 5, полученное с помощью библиотеки C-Library NAG при TOL = 0.001

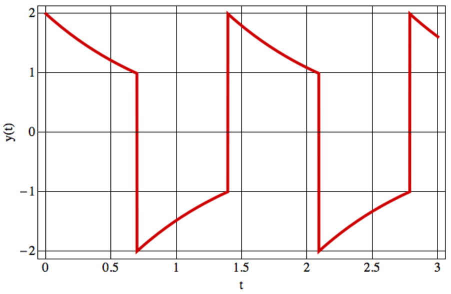

Рис. 7. Правильное решение ТЕСТ 5

VI. Заключение

Разработка программ-решателей систем ОДУ-ДАУ и ЛАУ на языке Си для библиотеки SADEL позволяет сделать следующие выводы.

При реализации вычислительных методов решения жестких систем ОДУ и плохообусловленных систем ЛАУ не следует использовать вычисления с одинарной точностью (single precision).

При решении систем нелинейных алгебраических уравнений (НАУ) на каждом шаге численного неявного интегрирования следует использовать только итерационные методы, которые в точке решения сводятся к решению систем ЛАУ с матрицей Якоби в качестве матрицы коэффициентов системы ЛАУ (в SADEL реализован метод Ньютона).

Системы ЛАУ на каждом шаге численного интегрирования в точке решения систем НАУ следует решать с компьютерной удвоенной точностью (double precision) с использованием методов «сверхточных» вычислений.

При программной реализации формул неявного интегрирования систем ОДУ-ДАУ не должно быть арифметических операций деления на шаг интегрирования, чтобы не было ограничений на значение величины этого шага «снизу» [11].

Если программа-решатель систем ОДУ-ДАУ не решит достоверно и точно хотя бы одну из приведенных в статье тестовых задач, то этот решатель не следует использовать для моделирования динамических систем, математическая модель которых представляет собой жесткую систему ОДУ-ДАУ.

Новые научные результаты предполагается получить в направлениях развития новых методов и алгоритмов решения систем ДАУ и ЛАУ сверхбольшой размерности с выполнением расчетов на универсальном и на персональном суперкомпьютерах. В первую очередь следует разработать методы «сверхточного» решения сверхбольших систем ЛАУ.

Литература

[1] IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic 754-2008, IEEE, 2008

[2] Андронов А.В., Жук Д.М., Кожевников Д.Ю., Маничев В.Б. Библиотека математических программ-решателей на языке Си: SADEL. // http://pa10.ru.

[3] Д.М. Жук, В.Б. Маничев, А.В. Андронов Платформа математического моделирования во временной области разнородных технических систем и объектов FMS PA10. В сб. научных трудов МЭС - 2010 - М.: ИППМ РАН, 2010.

[4] Вержбицкий В.М. Основы численных методов. Учебник для вузов. – М.: Высш. шк., 2002.-840 с.

[5] Д.М. Жук, В.Б. Маничев, А.О. Ильницкий Методы и алгоритмы решения дифференциально-алгебраических уравнений для моделирования систем и объектов во временной области. // Информационные технологии. - 2010. – часть1 - №7, часть 2 - №8.

[6] Жук Д.М., Маничев В.Б. Программа DMAN для решения дифференциально-алгебраических уравнений, номер государственной регистрации 2009612666 от 27 мая 2009.

[7] В.Б.Маничев, В.Н.Глазкова, Д.Ю.Кожевников, Д.А.Кирьянов, М.К.Сахаров Решение систем линейных алгебраических уравнений с удвоенной точностью вычислений на языке Си. // Вестник МГТУ, сер. Приборостроение. - 2011. - Вып. 4.

[8] 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.

[9] Маничев В. Б., Глазкова В. Н. Методы интегрирования систем ОДУ для адаптируемых программных комплексов анализа РЭС//Радиотехника.- 1988 - №4.

[10] Тыртышников Е.Е. Методы численного анализа : учеб. пособие для студ. вузов / - М.: Издательский центр «Академия», 2007. - 320 с. (Университетский учебник. Сер. Прикладная математика и информатика).

[11] Маничев В.Б. Новые алгоритмы для программ анализа динамики технических систем // Вестник МГТУ, сер. Приборостроение. - 1996. - Вып. 1. - С. 48-56.

[12] Скворцов Л.М. Явный многошаговый метод численного решения жестких дифференциальных уравнений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2007. Т. 47. № 6. С. 959-967.

[13] Системы автоматизированного проектирования. Учеб. пособие для вузов: в 9 кн., кн. 8 // Под ред. И.П.Норенкова. М.: Высшая школа, 1986.

[14] Guiyou Mao, L.R. Petzold. Efficient integration over discontinuities for differential-algebraic systems, Computers & Mathematics with Applications, Volume 43, Issues 1–2, January 2002, Pages 65-79.