

**Методы и алгоритмы решения дифференциально-алгебраических уравнений для моделирования систем и объектов во временной области**  
**Часть 2**

Д.М. Жук, В.Б. Маничев, А.О. Ильницкий

МГТУ имени Н.Э.Баумана, manichev@bmstu.ru

**Аннотация** — Во второй части данной статьи рассматривается выбор методов и алгоритмов для решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) при моделировании систем и объектов во временной области. Обосновывается использование метода  $LU$  разложения с выбором главного элемента в качестве базового метода решения СЛАУ и обосновывается использование повышенной разрядности арифметических операций, когда это необходимо, для обеспечения требуемой точности расчета всех неизвестных систем СЛАУ.

**Ключевые слова:**

Моделирование, обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ), дифференциально-алгебраические уравнения (ДАУ), методы интегрирования, временная область, линейные алгебраические уравнения (ЛАУ).

I. ВВЕДЕНИЕ

В части 1 рассматривалась проблема выбора методов интегрирования для решения систем ДАУ, неразрешенных относительно производных и представленных в виде:

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

где  $X$  - вектор дифференцируемых переменных размерностью  $m$ ;  $XP$  - вектор производных этих переменных по переменной  $t$  размерностью  $m$ , т.е.  $XP = dX / dt$ ;  $Y$  - вектор алгебраических переменных размерностью  $k$ ;  $t$  - независимая переменная (обычно - время);  $F$  - вектор-функция размерностью  $l$ , где  $l = m + k$ . Заданы начальные условия  $X_0 = X(0)$  и отрезок интегрирования.

Для выбранных методов интегрирования используется следующий алгоритм.

На каждом шаге интегрирования  $h_n$  решается система нелинейных алгебраических уравнений (НАУ), размерностью  $2m + k$

(система НАУ приведена для неявного метода Эйлера):

$$\begin{cases} XP_n - \frac{X_n - X_{n-1}}{h_n} = 0 \\ F(X_n, XP_n, Y_n, t_n) = 0 \end{cases}$$

относительно векторов  $X_n, XP_n, Y_n$  общей размерности  $2m+k$  методом **Ньютона**, который сводится к решению соответствующих СЛАУ,  $h_n = t_n - t_{n-1}$  - шаг интегрирования,  $n$  – номер шага интегрирования.

В связи с этим выбор и обоснование методов решения СЛАУ очень важны при разработке программного комплекса *FMS PA10*, упомянутого в части 1 данной статьи.

## II. ВЫБОР МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ СЛАУ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СИСТЕМ И ОБЪЕКТОВ ВО ВРЕМЕННОЙ ОБЛАСТИ

Выбранные в части 1 статьи неявные *AL*-устойчивые методы интегрирования сводятся, в общем случае, к решению СЛАУ вида

$$Ax = b, \quad (1)$$

где  $A = (a_{ij})$  – матрица коэффициентов размерности  $n \times n$ ,  $\det(A) \neq 0$ ;

$b = (b_1, \dots, b_m)^T$  – вектор-столбец правых частей;

$x$  - вектор неизвестных.

Так как системы вида (1) приходится решать большое количество раз, возникает необходимость в эффективных и точных численных методах решения такого рода систем.

Под эффективностью здесь и далее понимается как можно меньшие затраты машинного времени на получение решения. Под точностью – гарантия того, что погрешность (в смысле количества верных значащих цифр в решении для каждой неизвестной системы (1)) полученного решения не превосходит заранее заданной величины.

В настоящее время разработано очень большое количество разнообразных методов решения СЛАУ, но все их можно разделить на два класса: точные (прямые) и итерационные. Метод решения СЛАУ относится к классу точных, если в предположении отсутствия округлений он даёт точное решение задачи после конечного числа арифметических и логических операций. Итерационные методы постепенно приближают точность решения к заданной точности. Прямые методы из-за плохой устойчивости к накоплению арифметической погрешности применяются для систем небольшой и средней размерности до порядка  $10^4$  [1]. Итерационные методы применяются, в основном, для решения СЛАУ очень большой размерности, до порядка  $10^7$ , но их использование накладывает ограничения на матрицу системы [1].

Наиболее простым, производительным и точным методом решения СЛАУ общего вида является *метод исключения Гаусса*. Метод Гаусса требует  $(2/3)n^3 + O(n^2)$  ( $n \rightarrow \infty$ ) арифметических операций [2]. В связи с тем, что СЛАУ, которые возникают при моделировании систем и объектов во временной области, являются сильно разреженными (порядка 3 – 5 не-

нулевых элементов в строке), несложно подсчитать, что при отсутствии заполнения матрицы коэффициентов новыми ненулевыми элементами при проведении исключений, метод Гаусса требует примерно  $O(n)m^2$  ( $n \rightarrow \infty$ ) арифметических операций, где  $m$  – среднее количество ненулевых элементов в строке. Главным недостатком метода Гаусса является плохая устойчивость к накоплению ошибки округления. Устойчивость метода можно повысить, выбирая на каждом шаге исключения неизвестных главный элемент (по строке, по столбцу или по всей матрице). С другой стороны, можно использовать стратегию минимизации заполнения матрицы ненулевыми элементами, что минимизирует количество арифметических операций и, следовательно, накопление погрешности.

Анализ результатов многочисленных тестов показал, что наиболее приемлемой стратегией с точки зрения минимизации количества арифметических операций и, в то же время, минимизации накопления ошибки округления, является совмещение стратегии выбора наименее заполненного столбца и затем выбор главного элемента по данному столбцу. Для примера проведём результаты следующих тестов. Будем генерировать матрицу коэффициентов размерности  $n = 100 \times 100$ ,  $n = 600 \times 600$  и  $n = 1100 \times 1100$ . Для каждой размерности будем увеличивать число ненулевых элементов в строке с  $m = 3$  до  $m = 9$ , с шагом 2. (3, 5, 7, 9). Для каждого  $m$  проведём по 100 испытаний. Будем анализировать среднее количество ненулевых элементов до решения, после решения и время, затраченное на решение. Данные испытания проведём для метода Гаусса с выбором главного элемента по столбцу и для метода Гаусса с описанной выше стратегией минимизации заполнения. Результаты проведённых испытаний приведены в таблице 1

Таблица 1.

Стратегия выбора главного элемента	$n \times n$	$m$	$N$	$N'$	$T$ , мс.
Выбор главного элемента по столбцу	100x100	3	300	728.22	1.09
		5	500	2004.70	2.80
		7	700	2809.41	4.36
		9	900	3312.40	5.92
	600x600	3	1800	16557.76	46.78
		5	3000	61260.26	392.92
		7	4900	90561.11	736.90
		9	5400	108694.60	1034.98
	1100x1100	3	3300	52253.14	273.71
		5	5500	202770.70	2409.45
		7	7700	299608.60	5498.14
		9	9900	361301.40	7769.99

<b>Выбор наименее заполненного столбца вместе с выбором главного элемента по столбцу</b>	100x100	3	300	542.48	0.94
		5	500	1690.58	2.49
		7	700	2600.71	5.01
		9	900	3163.72	6.25
	600x600	3	1800	9138.95	35.48
		5	3000	44790.39	251.59
		7	4900	75132.33	634.64
		9	5400	97087.25	955.30
	1100x1100	3	3300	26072.17	144.24
		5	5500	142246.06	1649.39
		7	7700	241786.67	3841.41
		9	9900	313588.86	6395.12

Здесь  $n$  – размерность решаемой СЛАУ,  $m$  – количество ненулевых элементов в строках матрицы коэффициентов,  $N$  – общее среднее количество ненулевых элементов матрицы коэффициентов до проведения испытаний,  $N'$  – общее среднее количество ненулевых элементов матрицы коэффициентов после проведения испытаний,  $T$  – среднее время, затраченное на проведение одного испытания.

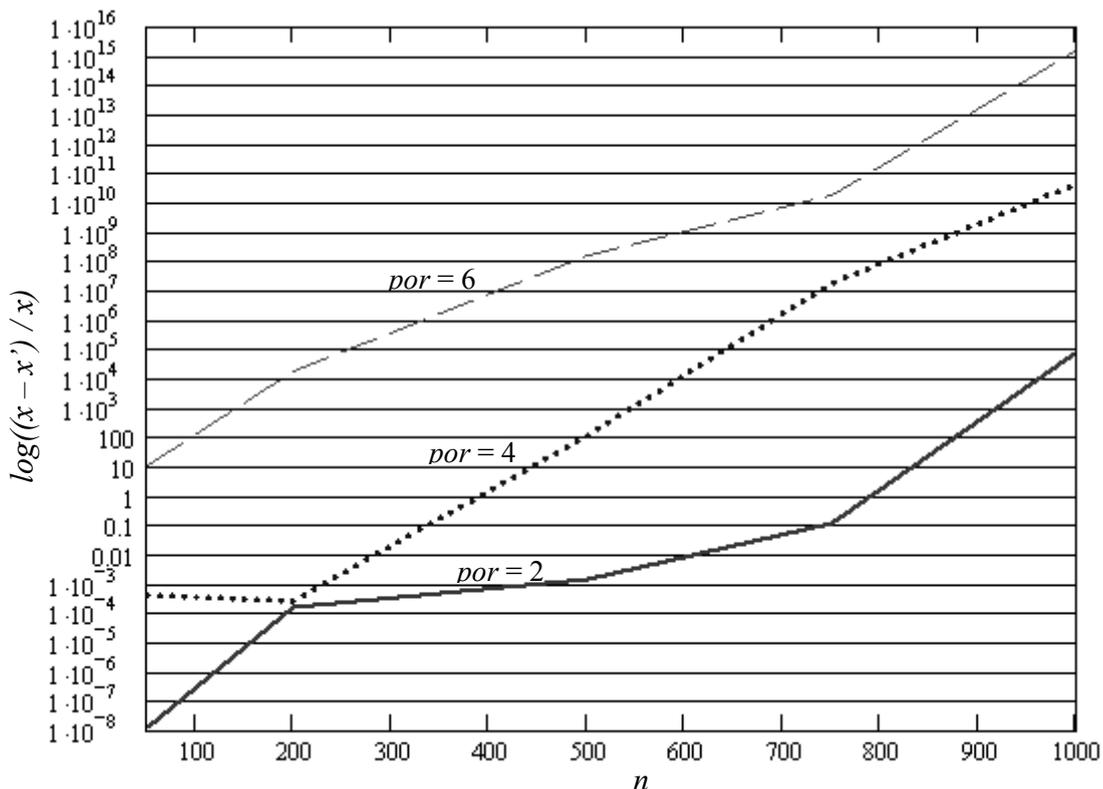
Используя данные, приведённые в таблице 1, можно подсчитать, что при проведении испытаний для размерности 100x100, эффективность стратегии минимизации составила примерно 25%, 16%, 8%, 5% при начальном заполнении 3, 5, 7, 9 ненулевых элементов в строке соответственно. Для матриц, размерности 600x600 – 45%, 27%, 18%, 11% соответственно. Для матриц, размерности 1100x1100 – 51%, 30%, 20%, 14% соответственно. Таким образом, можно сказать, стратегия выбора столбца с минимальным количеством ненулевых элементов в сочетании с выбором главного элемента по столбцу наиболее эффективна на матрицах большой размерности при небольшом начальном заполнении и наименее эффективна на матрицах небольшой размерности с максимальным начальным заполнением.

Сопоставив вышесказанное с результатами тестов, можно предложить стратегию выбора главного элемента при выполнении  $k$ -го шага прямого хода по методу Гаусса, состоящую из следующих этапов:

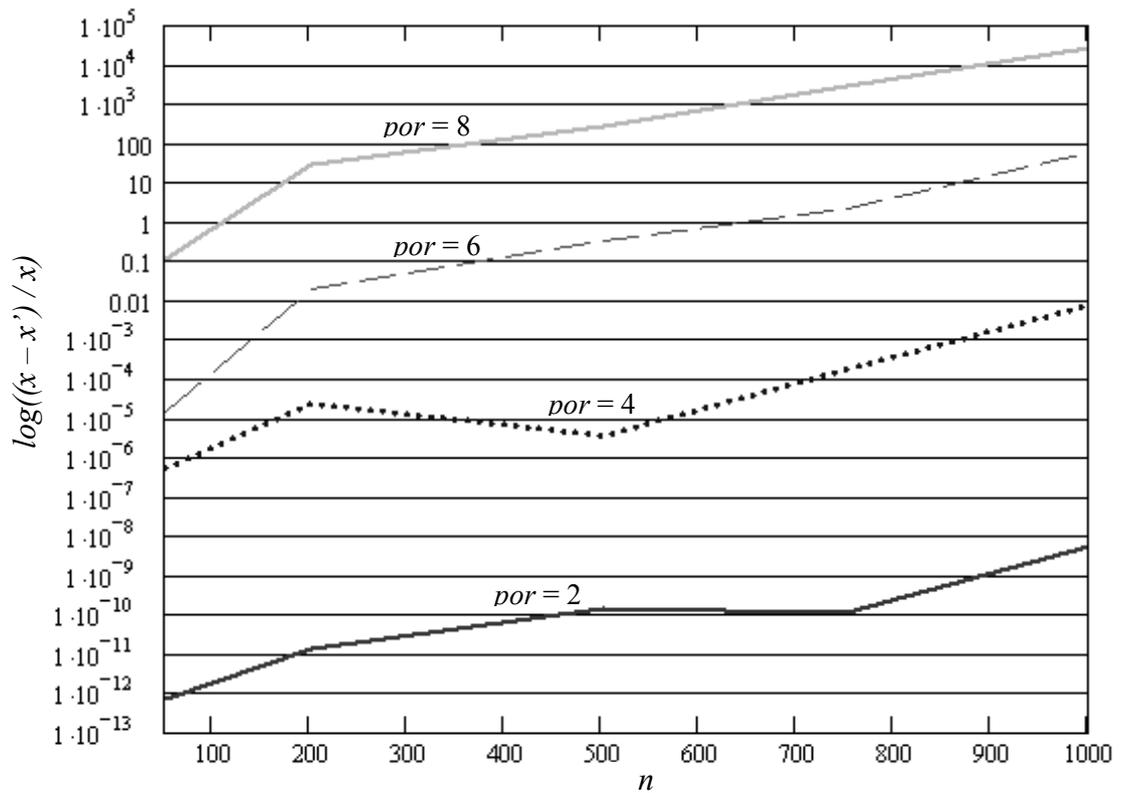
1. выбор столбца с наименьшим количеством ненулевых элементов из столбцов с номерами от  $k$  до  $n - 1$ ;
2. перестановка выбранного столбца на место  $k$ -го столбца;
3. выбор строки с наибольшим по модулю элементом в найденном столбце;
4. перестановка выбранной строки на место  $k$ -ой строки.

Приведённая стратегия минимизирует заполнение матрицы коэффициентов ненулевыми элементами, о чём свидетельствуют результаты приведённых выше испытаний, а также накопление вычислительной погрешности, так как используется выбор главного элемента по столбцу.

В результате анализа численной устойчивости метода Гаусса без выбора главного элемента и с использованием описанной выше стратегии были получены графики зависимости погрешности результата от порядка СЛАУ и разброса порядков коэффициентов исходной матрицы – рис. 12 и рис. 13. Здесь,  $por$  – это разброс порядков коэффициентов исходной матрицы,  $x'$  – точное решение,  $x$  – расчётное решение,  $n$  – размерность решаемой СЛАУ.



**Рис. 12. Графики зависимости погрешности от порядка СЛАУ и разброса порядков коэффициентов для метода Гаусса без выбора главного элемента.**



**Рис. 13. Графики зависимости погрешности от порядка СЛАУ и разброса порядков коэффициентов для метода Гаусса с использованием описанной стратегии.**

Проанализировав приведённые графики, можно заметить, что при разбросе порядков коэффициентов  $por > 2$  и при размерностях матрицы  $n > 1000$  погрешность получаемого результата становится недопустимой. В таких случаях необходимо использовать арифметику повышенной разрядности.

В любом случае необходимо сначала оценить погрешность полученного результата. Если помимо треугольного разложения матрицы  $A$  сохранены коэффициенты исходной системы, то можно оценить погрешность решения  $x$  с помощью *итерационного уточнения* по формулам

$$\begin{aligned} r_m &= b - Ax_m \\ Ad_m &= r_m \\ x_{m+1} &= x_m + d_m \end{aligned}$$

В качестве начального приближения берётся вычисленный методом Гаусса вектор  $x$ .  $m$  – номер итерации,  $r_m$  – невязка,  $d_m$  – приращение вектора неизвестных на  $m$ -ой итерации, которое вычисляется как решение линейной системы  $Ax = d_m$ , что сводится к решению треугольных систем  $Ly = r_m$ ,  $Ux = y$ . Итерационный процесс заканчивается при значении  $m$ , для которого

$$\begin{aligned} \|x_m - x_{m-1}\| &\leq \varepsilon \times \|x_m\|, \\ \|d_m\| &\geq \|d_{m-1}\| \wedge m > 2, \end{aligned}$$

$m = \text{MAXIT}$ .  $\varepsilon$  – машинная точность  $10^{-16}$ .  $\text{MAXIT}$  – заданное максимальное число итераций. В ходе итерационного процесса можно сделать оценку для класса нормализованных систем линейных уравнений

$$\lim_{m \rightarrow \text{MAXIT}} \frac{r_{mi}}{b_i} < 10^{-p+1}$$

$p$  – длина мантиссы. В процессе итерационного уточнения мы можем судить только о векторах  $d_m$  и  $r_m$ . Как только перестает меняться  $r_m$ , то сразу перестает меняться и  $d_m$ . О погрешности решения в ходе итерационного уточнения можно сказать только одно: в большинстве случаев она уменьшается. Но до каких пределов? Об этом сказать ничего нельзя. Так, при тестировании (зная эталонное решение) процесс итерационного уточнения может нам улучшить решение от относительной погрешности  $10^2$  до  $10^{-9}$ , а может и от  $10^{-3}$  до  $10^{-4}$  только. По векторам  $d_m$  и  $r_m$  нельзя сказать, как хорошо улучшит нам решение процесс итерационного уточнения, хотя нам нужно только знать порядок погрешности.

О точности решения системы линейных уравнений методом Гаусса мы можем судить по  $d_1$ . При тестировании 5000 тестов,  $d_1$  дало правильную относительную погрешность в 4705 (94%) случаях. Обозначим  $x^*$  – точное решение СЛАУ. В 244 (5%) случаях  $\|d_1\| / \|x^*\|$  было не больше чем на два порядка больше погрешности полученного решения и в 51 (1%) случае  $\|d_1\| / \|x^*\|$  было не более чем на два порядка меньше. Таким образом, если  $\|d_1\| / \|x^*\| = 10^{-9}$ , то можно сказать, что решение имеет как минимум 7 верных значащих цифр. С целью повышения эффективности анализа погрешности удобно использовать вместо метода Гаусса метод  $LU$ -разложения, который по устойчивости к вычислительной погрешности и по трудоёмкости равнозначен методу Гаусса. Таким образом, можно предложить алгоритм решения СЛАУ с заданной точностью, который состоит из следующих шагов:

1. Решение СЛАУ методом  $LU$ -разложения с применением описанной выше стратегии выбора главного элемента.
2. Оценка ошибки полученного на предыдущем шаге решения методом итерационного уточнения.
3. Если порядок ошибки решения, вычисленной на предыдущем шаге, не превосходит заданной величины, то переход к пункту 5, иначе переход к пункту 4.
4. Выдача предупреждения о невозможности решения системы с требуемой точностью и необходимостью решения СЛАУ с использованием арифметики повышенной разрядности.
5. Полученное решение удовлетворяет заданной точности. Выход.

## V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований, рассмотренных в части 1 и 2 данной работы выполнен анализ и обоснование выбора базовых неявных методов для интегрирования систем ДАУ и разработан новый комбинированный корректирующий алгоритм реализации неявного метода трапеций, который будет положен в основу при разработке нового универсального, высоконадежного программно-технического комплекса *FMS-PA10* для моделирования систем и объектов во временной области. В результате проведенных исследований выполнен также анализ и обоснование выбора базовых методов для решения СЛАУ, возникающих при реализации неявных методов интегрирования систем ДАУ, а также предложен алгоритм решения СЛАУ, гарантирующий точность получаемого решения.

Предполагается, что программно-технический комплекс *FMS-PA10* будет базовым математическим ядром систем моделирования динамических процессов нового поколения для моделирования и анализа разнообразных и разнородных систем, технических устройств и объектов. Программно-технический комплекс *FMS-PA10* будет иметь следующие принципиальные отличия от ранее разработанных программных комплексов этого класса:

1. 100 процентная гарантированная правильность интегрирования систем ДАУ при моделировании динамических процессов (в случае возможного неправильного результата будет выдано соответствующее предупреждение о необходимости перехода на вычисления с повышенной разрядностью чисел).
2. Возможность интегрирования функций с разрывами производных без потери точности интегрирования.
3. Возможность моделирования любых разнородных (электрических, электронных, механических, гидравлических, пневматических, термодинамических и др.) систем и подсистем, модели которых описываются системами ДАУ общего вида (1).

Дальнейшие исследования будут включать в себя:

1. Решение проблемы вычисления элементов матрицы Якоби при реализации неявных АЛ-устойчивых методов интегрирования систем ДАУ.
2. Разработку новых методов и алгоритмов решения СЛАУ с учетом перехода на вычисления с повышенной разрядностью чисел при необходимости;
3. Разработку новой методики тестирования программно-технического комплекса *FMS-PA10*, основанной на всестороннем тестировании модуля решения систем ДАУ и сравнения результатов тестирования с лучшими математическими программами - *MATLAB*, *Maple*, *MathCAD*, *Mathematica* и др. (с добавлением в классические математические тесты задач для неустойчивых систем ОДУ и ДАУ с известным аналитическим решением, а также включе-

ние наборов тестовых задач моделирования реальных систем и объектов с известными значениями правильных результатов моделирования).

Результаты работы могут быть использованы при разработке модулей моделирования и анализа разнообразных систем и объектов.

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельников Численные методы. – М. Наука, 1987. – 487 с.
2. К.Ю. Богачёв Практикум на ЭВМ. Методы решения линейных систем и нахождения собственных значений. – М. Кафедра вычислительной математики, МГУ имени М.В.Ломоносова, 1998. – 367 с.