

На правах рукописи



Морозов Александр Юрьевич

Алгоритмы адаптивной интерполяции для моделирования динамических систем с интервальными параметрами

Специальность 05.13.18 —
«Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2018

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Ревизников Дмитрий Леонидович

Официальные оппоненты: **Мартыненко Сергей Иванович**
доктор физико-математических наук, научный сотрудник отдела «Специальные авиационные двигатели и химмотология», ФГУП «ЦИАМ им. П.И. Баранова»

Рогалев Алексей Николаевич
кандидат физико-математических наук, доцент, Институт вычислительного моделирования СО РАН, г. Красноярск, старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Защита состоится 29 марта 2019 г. в 10 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.125.04 Московского авиационного института по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского авиационного института по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, 4 или на сайте МАИ по ссылке:

https://mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT_ID=100135.

Автореферат разослан « ____ » _____ 2019 г.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, 4, отдел ученого и диссертационных советов.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 212.125.04,
кандидат физико-математических наук, доцент



Н. С. Северина

Общая характеристика работы

Актуальность темы. При решении прикладных задач механики, химической кинетики, газовой динамики и других или при исследовании определенных свойств динамических систем часто возникают ситуации, когда какие-либо параметры точно не известны, но известны диапазоны, в которых находятся их значения. Для таких задач является актуальным получение интервальных оценок решений по известным интервальным значениям их параметров. Традиционно подобные задачи формулируются в виде интервальной задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ).

Выделим несколько групп существующих методов. К первой группе отнесем методы типа Монте-Карло, представленные в работах Соболя И. М., Ермакова С. М., Михайлова Г. А., Крамера Г., Золотарева В. М. и др. Их суть заключается в проведении многократных расчетов со случайными значениями соответствующих интервальных параметров. Этим методам присущ ряд положительных свойств, таких как простота, высокая степень распараллеливания и отсутствие потребности в аналитической записи правой части ОДУ, но при этом они обладают низкой (\sqrt{N} , где N — количество симуляций) скоростью сходимости и требовательны к вычислительным ресурсам.

К следующим группам отнесем методы, в основе которых лежат интервальные вычисления. Активное развитие интервальные методы получили начиная с XX века, в работах Янги Р., Двайера П., Вармуса М., Сунаги Т., Мура Р., Лонера Р., Хансена Э., Алефельда Г., Кравчика Р., Никельи К., Ноймайера А. и др. Среди отечественных родоначальников интервальной математики — Брадис В. М., Канторович Л. В., Яненко Н. Н., Шокин Ю. И., Добронец Б. С., Шарый С. П., Рогалев А. Н. и др. Из-за своей природы интервальные методы подвержены так называемому эффекту обертывания (эффекту Мура), проявляющемуся в безграничном росте ширины получаемых интервальных оценок решений. Этот эффект возникает вследствие замены точной формы множества решений на более простую форму и для итеративных методов зачастую приводит к экспоненциальному расхождению границ интервалов. Многие из существующих и разрабатываемых методов направлены на борьбу с этим эффектом [1, 15].

Во вторую группу входят методы, основанные на рядах Тейлора. Они, в первую очередь, ориентированы на получение гарантированных оценок решений, но эффект обертывания уменьшают не в полной мере. Их идея заключается в аналитическом разложении решения системы ОДУ в ряд Тейлора с последующей оценкой остаточного члена. Для снижения эффекта Мура выполняется запоминание линейных преобразований, которые производились над множеством решений в процессе вычислений. К этим методам относятся метод Мура, метод параллелепипедов, QR-метод Лонера и др. Они просты и нетребовательны в плане вычислительных ресурсов, но эффективны в задачах, где интервалы не слишком велики или где нелинейность системы ОДУ

проявляется слабо. Существует несколько библиотек, реализующих эти методы: AWA, VNODE, ADIODES, VSNODE, VNODE-LP.

К третьей группе отнесем методы, основанные на символьных вычислениях. В частности, это методы модели Тейлора (Берз М., Макино К., Нехер М. и др.), а также метод, аппроксимирующий оператор сдвига вдоль траектории (Рогалев А. Н.). Как и методы модели Тейлора, метод сдвига вдоль траектории в каждый момент времени получает решение в виде символьного выражения относительно интервальных параметров. Эти методы не подвержены или слабо подвержены эффекту обертывания, справляются с широким классом задач, но при этом для них характерна высокая вычислительная сложность и трудности при распараллеливании. Среди библиотек, реализующих методы модели Тейлора, можно выделить несколько: COSY INFINITY, RiOT, FlowStar, verifyode и др.

В работах Добронца Б. С., Некрасова С. А. и других приводятся методы, способные находить оптимальные двусторонние оценки решений для систем ОДУ, обладающих определенными свойствами. В основном они построены на теоремах сравнения и, как следствие, применимы только для определенных классов систем ОДУ.

В общем случае для подавления эффекта обертывания необходимо устанавливать зависимость между интервальными параметрами и решением в каждый момент времени. Зачастую сложность соответствующих методов является экспоненциальной относительно количества интервальных начальных условий или параметров, поэтому очень важно, чтобы эти методы хорошо распараллеливались.

Исторически интервальные методы возникли в связи с потребностью в гарантированных вычислениях, которые учитывали бы погрешность самих вычислительных схем, а также ошибки округления при расчетах на ЭВМ. В настоящее время интерес представляют задачи, в которых интервальность возникает непосредственно в самой постановке, а свойством гарантированности можно пренебречь, если есть возможность контролировать точность получаемых границ решений. В связи с этим существует потребность в методах, которые позволяют за приемлемое время находить интервальную оценку решений с контролируемой точностью, не подвержены эффекту обертывания, имеют высокую степень распараллеливания, справляются с «большими» интервалами и при этом не требуют аналитической записи правой части ОДУ и вычисления старших производных.

Суть предлагаемого в работе подхода заключается в построении для каждого момента времени кусочно-полиномиальной функции, интерполирующей зависимость решения задачи от точечных значений интервальных параметров с заданной точностью. Для построения такой функции над пространством, образованным интервальными начальными условиями и параметрами задачи, строится адаптивная иерархическая сетка, в которой каждая ячейка содержит интерполяционную сетку.

Целью работы является создание эффективных методов и их программных реализаций для моделирования динамических систем с интервальными параметрами. В диссертации поставлены и решены следующие задачи:

1. Проведен анализ существующих методов интегрирования интервальных систем ОДУ на предмет подходов к снижению эффекта обертывания.
2. Предложен новый подход к моделированию динамических систем с интервальными параметрами, основанный на адаптивном разбиении области неопределенности в пространстве параметров.
3. Разработан и обоснован алгоритм адаптивной интерполяции на основе kd-дерева для моделирования динамических систем с интервальными параметрами.
4. Предложены методы практического контроля погрешности получаемых решений.
5. Разработан параллельный алгоритм адаптивной интерполяции для графических процессоров.
6. Рекомендованы способы размещения данных в памяти видеокарты с целью повышения эффективности параллельной работы.
7. Проведены вычислительные эксперименты, направленные на анализ эффективности вычислительного процесса.
8. Разработан программный комплекс, включающий реализацию алгоритма адаптивной интерполяции, развитые средства визуализации, а также программную реализацию классических интервальных методов.
9. Разработана математическая модель для расчета и исследования химических неравновесных течений с интервальными неопределенностями в константах скоростей реакций.
10. Проведены вычислительные эксперименты по моделированию химических неравновесных течений с неопределенностями в константах скоростей реакций. Исследовано влияние неопределенностей на параметры установившегося течения.

Методы исследования. Для исследования теоретических вопросов использовались интервальный анализ, численные методы и теория дифференциальных уравнений. Для разработки программного комплекса и проведения вычислительных экспериментов использовались современные компьютерные технологии.

Научная новизна. В диссертационной работе получены новые результаты, включающие:

- эффективные подходы к решению задач моделирования динамических систем с интервальными параметрами;
- разработку алгоритма адаптивной интерполяции на основе kd-дерева для моделирования динамических систем с интервальными параметрами;
- доказательство утверждения относительно условий применимости разработанного алгоритма к задачам интегрирования систем ОДУ с интервальными начальными условиями;

- доказательство утверждения о зависимости глобальной погрешности алгоритма от высоты kd-дерева;
- подходы к практической оценке погрешности получаемых решений;
- способ идентификации режимов, возникающих в динамической системе, по качественному изменению структуры адаптивной сетки;
- разработанную математическую модель для расчета и исследования химических неравновесных течений с неопределенностями в константах скоростей реакций.

Практическая значимость. В диссертации разработан новый эффективный подход к решению задач моделирования динамических систем с интервальными параметрами, применимый, в частности, к решению ряда актуальных задач авиационной и ракетно-космической отрасли.

Разработан программный комплекс, включающий реализацию параллельного алгоритма адаптивной интерполяции, развитые средства визуализации, а также программную реализацию классических интервальных методов. С его помощью проведено моделирование химических неравновесных течений с неопределенностями в константах скоростей реакций, а также моделирование динамических систем, в которых имеют место бифуркации и хаос.

Достоверность и обоснованность результатов, полученных в ходе диссертационной работы, обеспечивается согласованностью результатов проведенных вычислительных экспериментов с результатами, полученными с использованием других методов и программных комплексов, на представительном наборе как тестовых, так и прикладных задач.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях: XII Международная конференция по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (NPNJ'2018), Алушта, 2018; XX Юбилейная международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам, Алушта, 2017; Международная конференция «Решетневские чтения», Красноярск, 2018; Научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов им. Е. В. Арменского, Москва, 2016; Международная конференция «Авиация и космонавтика», Москва, 2016, 2017; Международная молодежная научная конференция «Гагаринские чтения», Москва, 2017, 2018.

Личный вклад автора заключается в разработке алгоритма адаптивной интерполяции на основе kd-дерева, формулировке и доказательстве утверждений, касающихся условий применимости, сходимости и погрешности алгоритма, разработке соответствующего программного комплекса и в проведении вычислительных экспериментов с последующим анализом полученных результатов.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 15 работах, из которых 3 опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК [1–3], в том числе 2 опубликованы в журналах, цитируемых международными базами Scopus [2, 3] и Web of Science [2]. Получено свидетельство о регистрации

программы [4]. 11 работ опубликованы в других изданиях и материалах конференций [5–15].

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованных источников (108 наименований). Работа изложена на 130 страницах и содержит 94 иллюстрации и 22 таблицы.

Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность диссертационной работы, приводится обзор существующих результатов по теме исследования, формулируется цель работы, указаны решенные задачи и методы исследования, обоснована научная новизна и отмечена практическая значимость работы.

В **первой главе** разработан, обоснован и апробирован алгоритм адаптивной интерполяции на основе kd-дерева для моделирования динамических систем с интервальными параметрами [2, 3, 9, 10, 11, 14].

Без ограничения общности рассматривается автономная система ОДУ, в которой содержится m интервальных начальных условий:

$$\begin{cases} y' = f(y), \\ y(0) = y_0 \in \mathbf{y}_0, \\ t \in [0, t_N], \end{cases} \quad (1)$$

где $\mathbf{y}_0 = (\mathbf{y}_0^1, \mathbf{y}_0^2, \dots, \mathbf{y}_0^m, y_0^{m+1}, \dots, y_0^n)^T$; $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ — вектор-функция, которая удовлетворяет условиям, обеспечивающим существование и единственность решения при всех $y_0 \in \mathbf{y}_0$. Здесь и далее интервалы выделяются жирным шрифтом, а их множество обозначается $\mathbb{IR} = \{\mathbf{x} = [\underline{x}, \bar{x}], \underline{x}, \bar{x} \in \mathbb{R}\}$.

Цель алгоритма — для каждого момента времени t_k построить кусочно-полиномиальную функцию $P_k(y_0)$, которая интерполирует решение системы (1) с контролируемой точностью, и определить ее интервальную оценку.

Обозначим через $y_k = y(y_0, t_k)$ решение системы (1) в момент t_k . Над пространством, образованным интервальными начальными условиями, построим равномерную регулярную интерполяционную сетку G_k^0 , соответствующую корневой вершине дерева и представляющую собой табличную функцию:

$$G_k^0 = \left\{ (y_0^{i_1 i_2 \dots i_m}, y_k^{i_1 i_2 \dots i_m}) \mid 0 \leq i_l \leq p, 1 \leq l \leq m \right\},$$

$$y_0^{i_1 i_2 \dots i_m} = \left(\underline{y}_0^1 + \frac{\text{wid}(\mathbf{y}_0^1)}{p} i_1, \underline{y}_0^2 + \frac{\text{wid}(\mathbf{y}_0^2)}{p} i_2, \dots, \underline{y}_0^m + \frac{\text{wid}(\mathbf{y}_0^m)}{p} i_m, y_0^{m+1}, \dots, y_0^n \right)^T,$$

$$y_k^{i_1 i_2 \dots i_m} = y(y_0^{i_1 i_2 \dots i_m}, t_k),$$

где p — степень интерполяционного многочлена по каждой переменной, $\text{wid}(\mathbf{x}) := \bar{x} - \underline{x}$ — ширина интервала \mathbf{x} . Отметим, что требование

равномерности разбиения необязательно и используется здесь для сокращения записи.

Для каждого $y_k^{i_1 i_2 \dots i_m}$ вычислим $y_{k+1}^{i_1 i_2 \dots i_m} = y(y_0^{i_1 i_2 \dots i_m}, t_{k+1}) = y(y_k^{i_1 i_2 \dots i_m}, t_{k+1} - t_k)$,

решив соответствующую неинтервальную систему ОДУ:

$$\begin{cases} y' = f(y), \\ y(0) = y_k^{i_1 i_2 \dots i_m}, \\ t \in [0, t_{k+1} - t_k]. \end{cases}$$

По полученной табличной функции

$$G_{k+1}^0 = \left\{ (y_0^{i_1 i_2 \dots i_m}, y_{k+1}^{i_1 i_2 \dots i_m}) \mid 0 \leq i_l \leq p, 1 \leq l \leq m \right\}$$

построим интерполяционный многочлен $P_{k+1}^0(y)$, например, в форме Лагранжа:

$$P_{k+1}^0(y) = \sum_{i_1=0}^p \dots \sum_{i_m=0}^p y_{k+1}^{i_1 i_2 \dots i_m} l^{i_1 i_2 \dots i_m}(y),$$

где $l^{i_1 i_2 \dots i_m}(y)$ — базисные полиномы Лагранжа:

$$l^{i_1 i_2 \dots i_m}(y) = \prod_{j=0}^p \prod_{\substack{l=0 \\ i_l \neq j}}^m \frac{p \frac{y^l - y_0^l}{\text{wid}(y_0^l)} - j}{i_l - j}.$$

Если погрешность интерполяции

$$\text{error} = \max_{y_0 \in Y_0} \left\| y(y_0, t_{k+1}) - P_{k+1}^0(y_0) \right\|$$

больше некоторого заданного числа ε , то G_k^0 разбивается на две сетки G_k^1 и G_k^2 таким образом, чтобы их оценка погрешности интерполяции была меньше error . Для них выполняются все те же самые действия, что и для сетки G_k^0 , и при необходимости они тоже разбиваются. Если $y(y_0, t_{k+1})$ непрерывно дифференцируема $p+1$ раз по y_0 , то можно показать, что процесс дробления конечен. В общем случае с теоретической точки зрения погрешность интерполяции оценивается сверху через старшие производные с коэффициентами пропорциональности, которые характеризуют интерполяционную сетку и ее размер. При каждом дроблении эти коэффициенты уменьшаются и, как следствие, уменьшается и погрешность интерполяции. На практике определяется минимальный размер ячейки, обычно сопоставимый с машинным эpsilon, по достижении которого дробление дальше не происходит, а соответствующая область пространства помечается как «область разрыва».

В результате на момент t_{k+1} будет получено kd-дерево и соответствующая ему кусочно-полиномиальная функция, интерполирующая решение с заданной точностью. Процесс построения kd-дерева проиллюстрирован на рис. 1 (стр. 9).

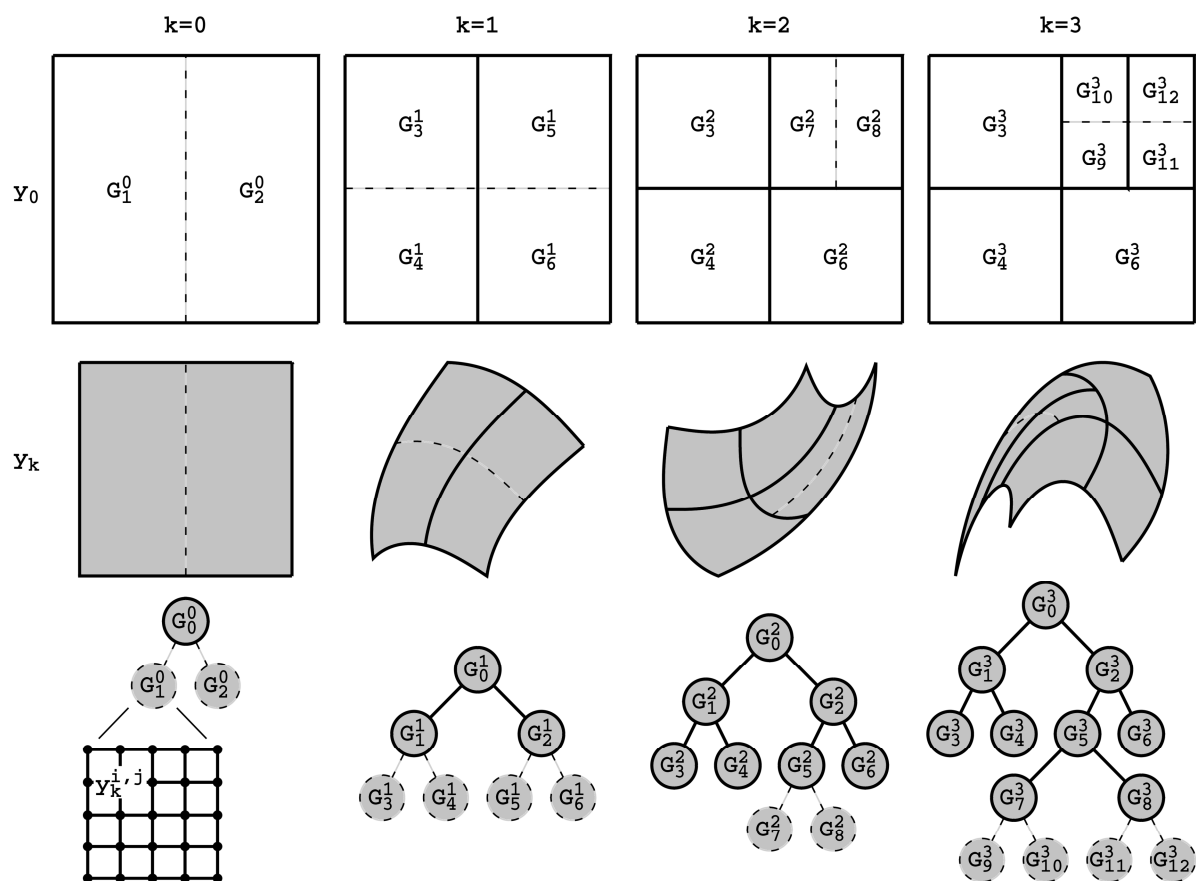


Рис. 1. Иллюстрация работы алгоритма

Строить с нуля на каждом шаге kd-дерево нет необходимости. Вместо этого используется дерево, полученное на предыдущем шаге, и в зависимости от оценки погрешности интерполяции оно перестраивается. Процесс дробления вершин всегда происходит на предыдущем шаге (пунктирные линии), потому что при создании новых вершин выполняется интерполяция связанных с их узлами значений, которую необходимо осуществлять в момент, когда погрешность еще допустима. Если для вершины и всех ее потомков ошибка интерполяции становится приемлемой, то потомки удаляются и сама вершина становится листом.

На практике оценка погрешности интерполяции выполняется только для некоторых точек из области, которая соответствует каждой конкретной вершине дерева. Можно выделить два подхода к их выбору. Первый заключается в добавлении случайным образом тестового множества точек в каждую вершину при ее создании (рис. 2а). Второй подход основан на понижении порядка интерполяции, когда из сетки убираются некоторые узлы, значения в которых интерполируются по оставшимся узлам с пониженным порядком (рис. 2б). Хотя оценка погрешности во втором случае является завышенной, она

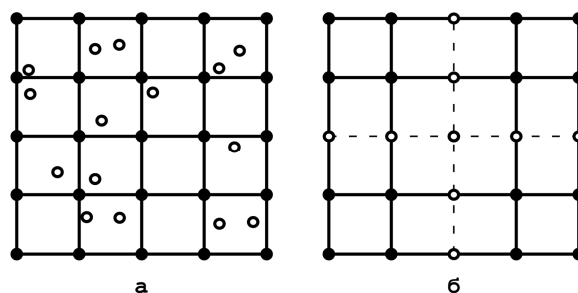


Рис. 2. Выбор точек, в которых выполняется оценка погрешности интерполяции

требует меньшего количества вычислительных ресурсов, поэтому предпочтение отдается этой оценке.

На рис. 3 показана геометрическая интерпретация погрешности интерполяции в евклидовой норме для одной вершины. Все линии получены путем интерполяции по закрашенным точкам и соответствуют линиям на рис. 2б.

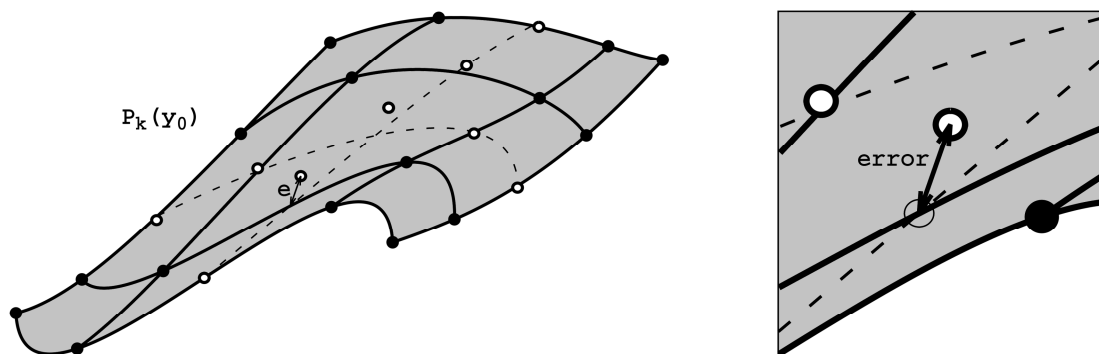


Рис. 3. Геометрическая интерпретация погрешности интерполяции для одной вершины

При выборе варианта разбиения вершины на две, на предыдущем шаге выполняется построение всех возможных вариантов разбиения и уже из них выбирается наиболее оптимальный вариант с точки зрения погрешности интерполяции на текущем шаге. Формально на способы разбиения вершины не накладываются никакие ограничения, при условии того, что всегда нужно оставаться в рамках интерполяции. Но с практической точки зрения разбиение целесообразно производить с помощью гиперплоскости, перпендикулярной одной из координатных осей. Это позволяет работать только с прямоугольными многомерными параллелепипедами и избежать рассмотрения множества частных случаев. При этом, если дробить вершины всегда пополам и использовать равномерные интерполяционные сетки, то узлы в дочерних вершинах будут полностью дублировать узлы в родительских вершинах, что, во-первых, приведет к уменьшению вычислительных затрат вдвое, а во-вторых, вдвое уменьшит количество интерполируемых значений в процессе работы алгоритма и, как следствие, улучшит точность.

Рассмотрим интервальную задачу Коши для одного дифференциального уравнения:

$$\begin{cases} y' = f(y), \\ y(0) = y_0 \in \mathbf{y}_0, \\ t \in [0, t_N]. \end{cases} \quad (2)$$

Утверждение 1. Если правая часть системы (2) непрерывно дифференцируема $p+1$ раз, то для каждого фиксированного t_k можно построить кусочно-полиномиальную функцию степени p , которая интерполирует решение $y(y_0, t_k)$ с заданной точностью.

Утверждение 2. Оценка глобальной погрешности алгоритма прямо пропорциональна высоте kd-дерева.

По теореме о дифференцируемости решения системы ОДУ по начальному условию следует, что решение системы (2) $y(y_0, t_k)$ непрерывно дифференцируемо $p+1$ раз по y_0 . В свою очередь, если функция $p+1$ раз непрерывно дифференцируемая, то можно построить соответствующую кусочно-полиномиальную функцию степени p , которая будет интерполировать исходную функцию с заданной точностью.

Для оценки глобальной погрешности проследим путь получения решения для некоторой точки y_0 до конечного момента интегрирования (рис. 4). Пусть решение в точке y_0 в момент t_N интерполируется по сетке G_N^{iL} , находящейся в листовой вершине kd-дерева. Очевидно, данная сетка была получена путем дробления сетки $G_{k_1}^{i1}$, находящейся в родительской вершине в некоторый момент t_{k_1} . Она, в свою очередь, получена путем дробления $G_{k_2}^{i2}$, и так далее вплоть до сетки $G_{k_d}^0$, где d — глубина вершины, содержащей сетку G_N^{iL} . То есть для каждого конкретного значения y_0 количество шагов, в которых возникала локальная погрешность от интерполяции, равняется глубине соответствующей вершины и ограничено сверху высотой kd-дерева.

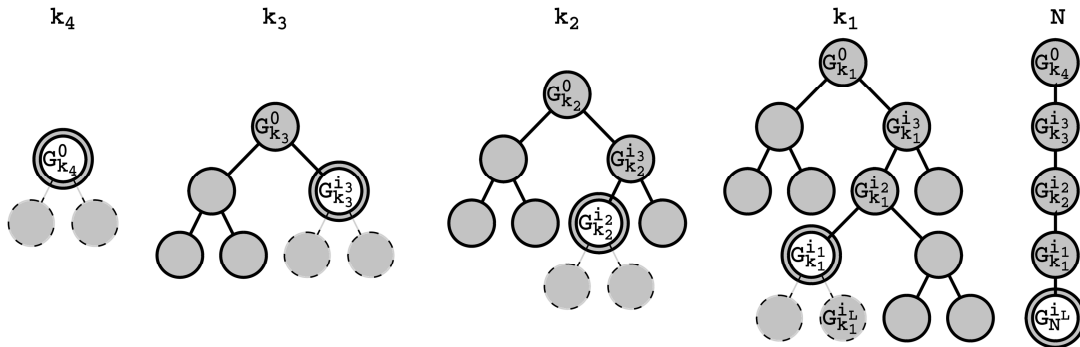


Рис. 4. Путь получения решения

Одним из способов оценки глобальной погрешности является суммирование всех оценок для локальных погрешностей, перенесенных на конец интервала интегрирования. Так как $y(y_0, t)$ удовлетворяет условию Липшица, то справедлива следующая оценка для перенесенной локальной погрешности с k_l -го шага:

$$\|y(y_0, t_{k_l} + \delta, t_N - t_{k_l}) - y(y_0, t_{k_l}, t_N - t_{k_l})\| \leq L \|\delta\| \leq L\varepsilon,$$

где L — константа Липшица, δ — локальная погрешность.

В результате оценка погрешности в узлах интерполяционных сеток в момент t_N прямо пропорциональна количеству шагов, на которых возникала локальная погрешность, и, следовательно, прямо пропорциональна высоте kd-дерева. Можно показать, что при фиксированных параметрах задачи и сеток имеем оценку $O(\varepsilon \ln \varepsilon)$.

Оба утверждения доказаны.

Для практической оценки трудозатрат определим критерий, который характеризует количество решенных неинтервальных ОДУ (1) в процессе работы алгоритма:

$$I = \frac{1}{t_N} \sum_{k=1}^N (N_i(t_k) + (m-1)N_{new}(t_k))(t_k - t_{k-1}), \quad (3)$$

где $N_i(t_k)$ — количество узлов в сетках без повторов в момент t_k ; $N_{new}(t_k)$ — количество новых узлов, созданных в процессе перестроения kd-дерева; множитель $(m-1)$ отвечает за количество рассмотренных вариантов разбиения вершины на две, из которых в итоге выбирается только один (поэтому -1). Для метода Монте-Карло значение критерия I (3) равняется количеству симуляций.

Все расчеты выполнены с позиции минимизации вычислительных затрат, то есть с использованием равномерных сеток и дроблением вершин всегда пополам, а так же с использованием второго подхода к оценке погрешности в вершинах, основанного на разрежении интерполяционной сетки. Степень интерполяционного многочлена равна четырем. Относительная погрешность 10^{-5} (при расчете погрешности выполнялась нормировка по «точному» значению). Для оценки глобальной погрешности в полученное решение подставляются конкретные значения интервальных параметров и выполняется сравнение с решениями соответствующих неинтервальных систем ОДУ. В качестве точного решения в конечном моменте времени используется решение, полученное классическими методами оптимизации с заведомо большой точностью (в приведенных расчетах использовался алгоритм роя частиц: Inertia Weighted PSO).

Рассмотрим систему ОДУ с двумя интервальными начальными условиями, которая описывает консервативный осциллятор:

$$\begin{cases} x' = y, y' = -\sin(x), \\ x(0) \in [-1, 1], y(0) \in [0, 1]. \end{cases} \quad (4)$$

По табл. 1 (стр. 13) видно, что один миллион симуляций в методе Монте-Карло гарантирует только 2–4 знака в решении, в то время как алгоритм адаптивной интерполяции получает решение намного быстрее и на порядок точнее.

На рис. 5 наблюдается корреляция глобальной погрешности для точечных значений интервальных начальных условий и глубин соответствующих вершин в kd-дереве. В процессе интегрирования множество решений закручивается в

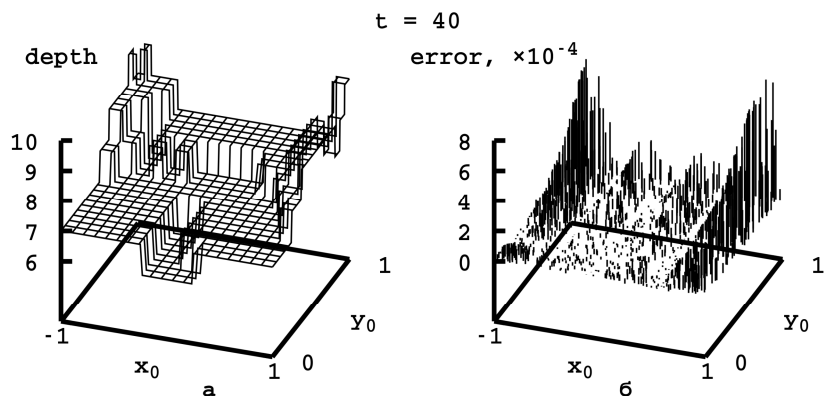


Рис. 5. Распределение глобальной погрешности (б) и глубин соответствующих вершин (а) в kd-дереве для системы (4)

спиралевидную структуру (рис. 6). Линиями показано адаптивное разбиение, которое получается по мере перестроения kd-дерева.

Табл. 1. Сравнение результатов решения системы (4) различными методами

| Метод | $x(40)$ | $y(40)$ | I |
|---------------------|-------------------------|-------------------------|----------|
| Точное решение | $[-1.378438, 1.341918]$ | $[-1.289731, 1.099147]$ | — |
| Алг. адапт. интерп. | $[-1.378444, 1.341918]$ | $[-1.289731, 1.099144]$ | 1579 |
| Монте-Карло | $[-1.378185, 1.330360]$ | $[-1.287727, 1.099029]$ | 1000 000 |

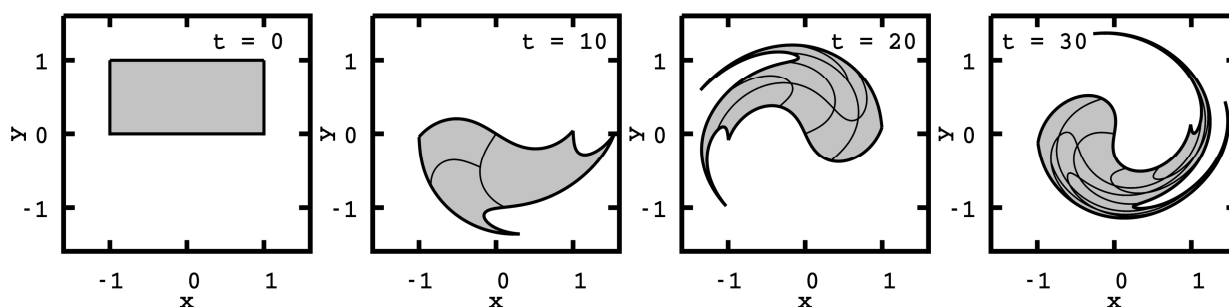


Рис. 6. Множество решений системы (4) в различные моменты времени

Во **второй главе** описываются различные аспекты распараллеливания и программной реализации алгоритма адаптивной интерполяции с применением технологии CUDA [4, 5, 7, 12, 13], которая позволяет использовать графические процессоры (GPU) компании NVIDIA для общих вычислений.

Если рассмотреть алгоритм с точки зрения распараллеливания, то один шаг алгоритма разбивается на следующие этапы:

- 1) перевычисление всех решений на следующий временной слой;
- 2) вычисление погрешности интерполяции во всех вершинах дерева;
- 3) выполнение удаления и разбиения вершин.

Проведем решение задач на центральном процессоре и на графическом процессоре и сравним время работы отдельных этапов алгоритма. Характеристики CPU: Intel Core i7-3770 3.40GHz, оперативная память — 16GiB DDR3. Характеристики GPU: NVidia GeForce GTX 760, 2GiB, 1152 cuda cores.

Рассмотрим нелинейную систему ОДУ:

$$\begin{cases} x' = -y \left(\sqrt{\sin^2(x) + y^2} + 0.5 \right)^{-1}, & y' = x \left(\sqrt{x^2 + \cos^2(y)} + 0.5 \right)^{-1}, \\ x(0) \in [-5, 5], & y(0) \in [-5, 5]. \end{cases} \quad (5)$$

Данная система ОДУ характеризуется тем, что в процессе ее интегрирования происходит частое перестроение kd-дерева, так как области сгущения и разрежения сетки перемещаются в пространстве (рис. 7, стр. 14), что отражается на затраченном времени работы соответствующего этапа алгоритма (табл. 2).

Табл. 2. Сравнение времени работы этапов алгоритма при решении системы (5)

| Процессор \ Этап | Перевычисление решений, с | Вычисление погрешности, с | Перестроение kd-дерева, с |
|------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| CPU | 651.702 | 4.196 | 65.004 |
| GPU | 5.506 | 0.4688 | 0.977 |

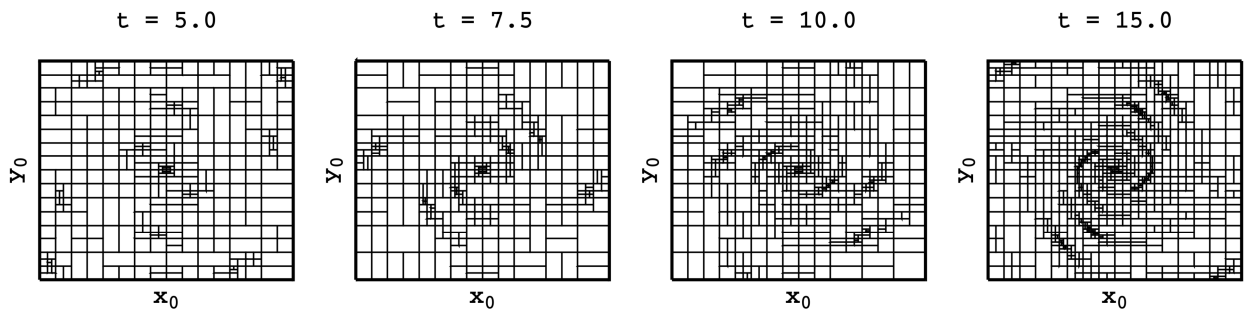


Рис. 7. Разбиения пространства, получающиеся в процессе решения системы (5)

В этой задаче возникает прирост скорости практически в 100 раз при использовании графических процессоров. Особенностью решения рассматриваемой задачи является также то обстоятельство, что в правой части ОДУ присутствуют «тяжелые» функции, такие как $\sqrt{\cdot}$, \sin , \cos , а это существенно сказывается на общем времени работы. На рис. 8 показано множество решений системы (5) в различные моменты времени.

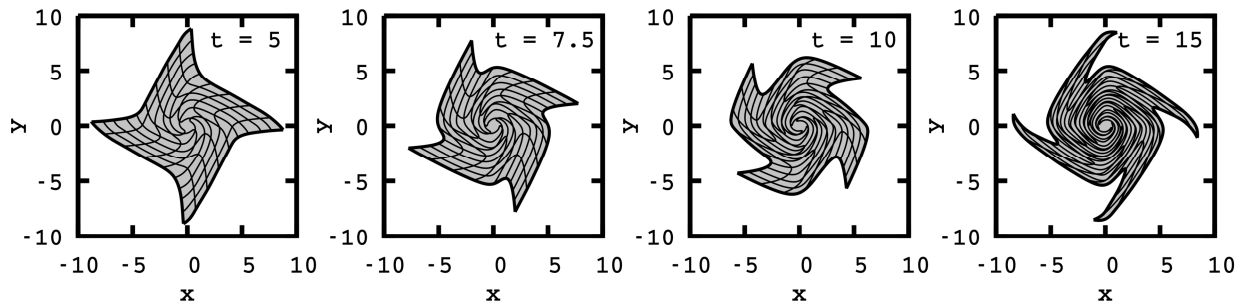


Рис. 8. Множество решений системы (5) в различные моменты времени

В третьей главе выполнен сравнительный анализ существующих библиотек и реализованных в них методов моделирования динамических систем с интервальными параметрами. Произведено сравнение результатов, полученных в работе, с результатами, полученными доступными программными библиотеками AWA, VNODE-LP, COSY, RiOT и FlowStar.

Так как рассматриваемые библиотеки не распараллеливаются, их сравнение производится с реализацией алгоритма адаптивной интерполяции без использования технологии CUDA. Характеристика CPU и ОП: Intel(R) Core(TM) i5-4200M CPU @ 2.50GHz, 16 GiB 1600 MHz. Для всех библиотек параметры методов задавались одинаковыми: порядок 18, локальная абсолютная погрешность 10^{-11} (значение остаточного члена при разложении решения в ряд Тейлора) и начальный шаг $h_0 = 3 \times 10^{-2}$. Такой выбор параметров соответствует параметрам, приведенным в работе Эбля И. Для алгоритма адаптивной интерполяции порядок задавался $p = 4$ и относительная погрешность 10^{-5} . Интегрирование неинтервальных ОДУ выполнялось методом Рунге — Кутты четвертого порядка с постоянным шагом $h = 10^{-3}$.

Модель Лотки — Вольтерры:

$$\begin{cases} x' = 2x - 2xy, & y' = -y + xy, \\ x(0) \in [0.95, 1.05], & y(0) \in [2.95, 3.05]. \end{cases} \quad (6)$$

В табл. 3 и на рис. 9 приведено сравнение результатов, полученных разными программными комплексами.

Табл. 3. Сравнение результатов решения системы (6) в момент времени 4.39

| Библиотека | Время, с | x | y |
|---------------------|----------|----------------------|----------------------|
| Точное решение | — | [2.469047, 2.847741] | [0.244560, 0.315898] |
| Алг. адапт. интерп. | 0.038 | [2.469047, 2.847741] | [0.244560, 0.315898] |
| AWA | 0.114 | [2.207070, 3.111953] | [0.172401, 0.381625] |
| VNODE-LP | 0.005 | [2.243064, 3.075959] | [0.187871, 0.366156] |
| RiOT | 23.82 | [2.468492, 2.848475] | [0.242515, 0.316225] |
| FlowStar | 68.87 | [2.373701, 3.179943] | [0.220549, 0.370295] |

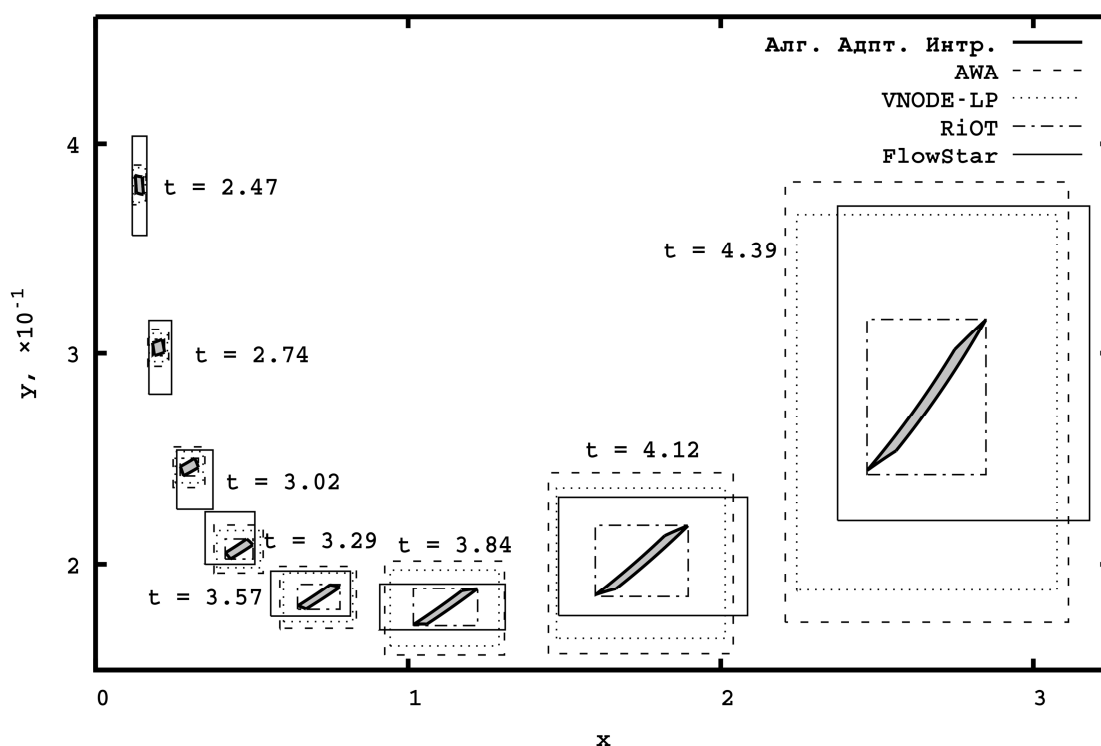


Рис. 9. Сравнение решений системы (6), полученных различными библиотеками, в различные моменты времени

Библиотеки AWA и VNODE-LP практически не компенсируют эффект обертывания и уже с момента $t > 4.5$ его влияние оказывается существенным и решения расходятся. Библиотеки RiOT и FlowStar аварийно завершают расчет при $t \approx 16$. Отметим, что алгоритм адаптивной интерполяции способен интегрировать данную систему ОДУ практически до любого момента времени и работает на порядки быстрее, чем рассматриваемые аналоги.

В четвертой главе выполняется апробация разработанного комплекса программ на различных прикладных и исследовательских задачах [3, 6, 8]. Рассматриваются химические неравновесные течения, а так же динамические системы, в которых имеют место бифуркации и хаос.

Для моделирования газозных химических превращений необходимо знать кинетический механизм и скорости протекания входящих в него реакций.

Как правило, зависимости, которые описывают скорости, получают экспериментальными способами, зачастую дающими лишь приближенные значения. Значения функций, аппроксимирующих скорость протекания одной и той же реакции, но полученных разными исследователями, могут отличаться в десятки и в сотни раз.

Рассматривается одномерное сверхзвуковое течение в сопле реагирующего газа, в котором возникает стоячая детонационная волна (ДВ). Интерес представляет случай, когда стоячая ДВ реализуется до критического сечения (КС) и после поток вновь ускоряется до сверхзвуковой скорости при переходе через КС. Согласно классической теории, стоячая ДВ в сужающейся части канала является неустойчивой, поэтому для ее длительного стабильного существования используется форма сопла с двумя сужениями (рис. 10). С учетом построенной пространственной сетки, решаемая система ОДУ содержит более 30 000 уравнений.

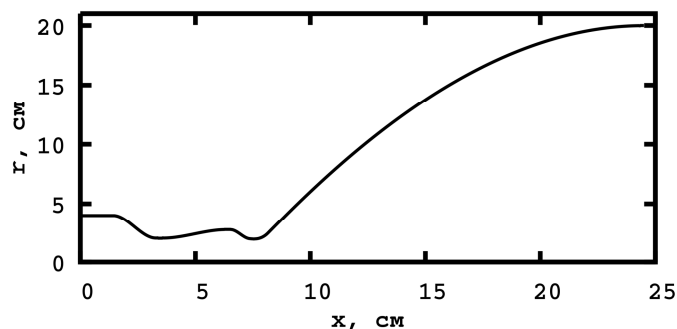


Рис. 10. Профиль сопла

На вход в сопло со скоростью $u = 2500 \text{ м/с}$, давлением $P = 1.38 \text{ атм}$ и температурой $T = 391 \text{ К}$ подается смесь H_2, O_2, N_2, Ar в соотношении 42:21:78:1. Химические процессы сгорания моделируются кинетическим механизмом, включающим 20 обратимых реакций, в которых участвовали 10 компонентов: $H_2, OH, H_2O, O_2, H_2O_2, HO_2, H, O, N_2, Ar$. В реакциях $H + H_2O_2 \leftrightarrow H_2O + OH$ и $H_2O_2 + M \leftrightarrow 2OH + M$ предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса задавался интервально: $[2.5 \times 10^8, 5 \times 10^8]$ и $[5.2 \times 10^4, 2.6 \times 10^5]$. На рис. 11 представлены распределения интервальных оценок концентраций некоторых веществ в сопле в окрестности стоячей ДВ.

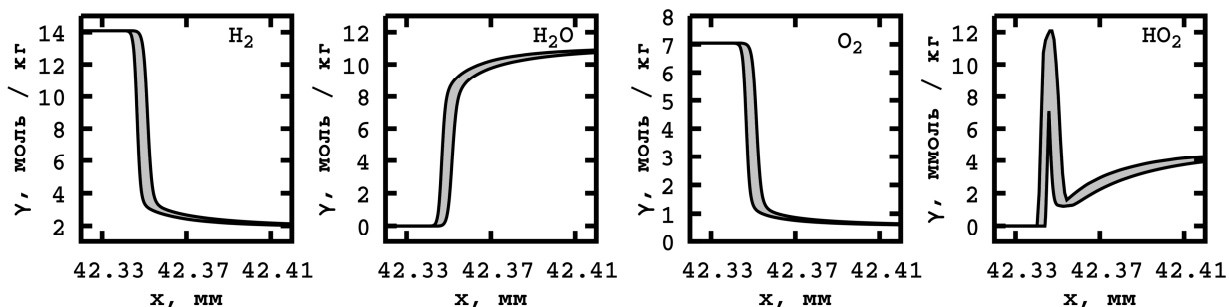


Рис. 11. Распределение концентраций некоторых компонентов в окрестности стоячей ДВ

На рис. 12 (стр. 17) показано распределение температуры и числа Маха в сопле. При увеличении масштаба по оси x в 2500 раз становится видна структура ДВ. На графике температуры различима ударная волна и последующая за ней зона экзотермических химических реакций. Здесь присутствует небольшое смещение фронта стоячей ДВ и небольшое увеличение времени задержки воспламенения.

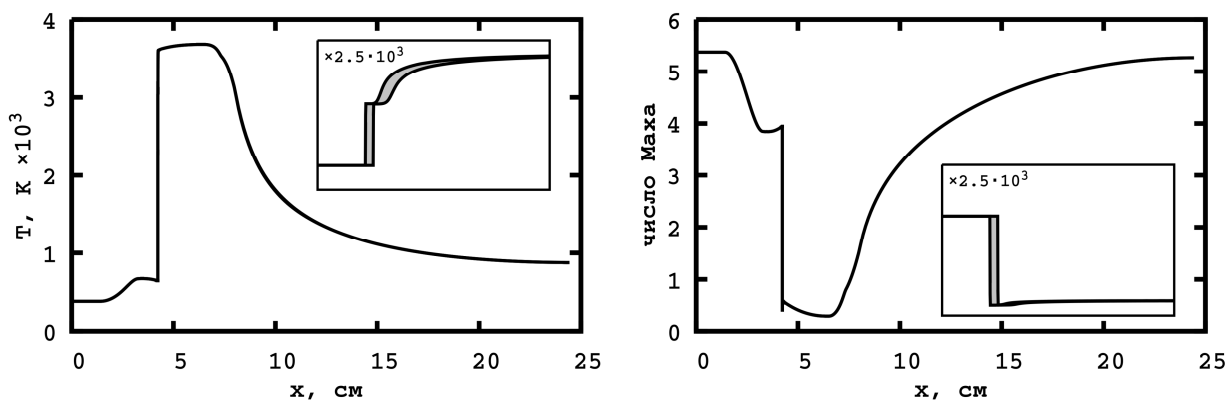


Рис. 12. Распределение температуры и числа Маха в сопле

Основные положения, выносимые на защиту

1. Предложен новый подход к моделированию динамических систем с интервальными параметрами, основанный на адаптивном разбиении области неопределенности в пространстве параметров. Предложен способ идентификации режимов, возникающих в динамической системе, по качественному изменению структуры адаптивной сетки. [2, 3, 8-11]
2. Разработан и обоснован алгоритм адаптивной интерполяции на основе kd-дерева, который позволяет за приемлемое время находить интервальную оценку решений с контролируемой точностью, не подвержен эффекту обертывания, имеет высокую степень распараллеливания и справляется с «большими» интервалами. [2, 3, 9]
3. Сформулированы и доказаны утверждения относительно условий применимости, сходимости и погрешности алгоритма адаптивной интерполяции. Показано, что оценка глобальной погрешности прямо пропорциональна высоте kd-дерева. [2, 3]
4. Разработан программный комплекс с использованием технологии CUDA, включающий реализацию алгоритма адаптивной интерполяции, развитые средства визуализации, а также программную реализацию классических интервальных методов. При проведении расчетов даже с использованием не самой современной видеокарты получено стократное ускорение по сравнению с вычислениями на центральном процессоре. Проведено сравнение результатов, полученных в работе, с результатами, полученными сторонними библиотеками COSY Infinity, AWA, VNODE-LP, RiOT, verifyode и FlowStar. Сравнительный анализ показал превосходство предложенного в диссертации алгоритма и его реализации с точки зрения точности и вычислительных затрат. [1, 2, 4, 5, 12, 13]
5. Разработаны методы математического моделирования химических неравновесных течений с учётом неопределенности значений констант скоростей реакций. С использованием разработанного программного комплекса проведены численные исследования влияния неопределенностей на структуру детонационной волны, а так же на параметры установившегося течения, такие как время задержки воспламенения и концентрация вредных веществ на выходе из сопла. [3, 6, 8]

Публикации в журналах из Перечня ВАК и из МСЦ

1. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л. Модификация методов решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с интервальными параметрами // Труды МАИ. 2016. № 89. С. 1–20.
2. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л. Алгоритм адаптивной интерполяции на основе kd-дерева для численного интегрирования систем ОДУ с интервальными начальными условиями // Дифференциальные уравнения. Т. 54, № 7. 2018. С. 963–974. (WoS, Scopus)
3. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л., Гидаснов В.Ю. Алгоритм адаптивной интерполяции на основе kd-дерева для решения задач химической кинетики с интервальными параметрами // Математическое моделирование. Т. 30. №12. 2018. С. 129-144. (Scopus)

Свидетельства о государственной регистрации программ

4. Морозов А.Ю. Программа для численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений с интервальными начальными условиями // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018664623 от 20 ноября 2018 г.

Публикации по теме диссертации в других изданиях

5. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л. Моделирование динамических систем с интервальными параметрами на графических процессорах // Программная инженерия. Т. 10. № 2. 2019. (принята к печати).
6. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л., Гидаснов В.Ю. Алгоритм адаптивной интерполяции на основе kd-дерева для моделирования химических неравновесных течений с неопределенностями в константах скоростей реакций // Материалы XII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (NPNJ'2018), 24–31 мая 2018 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2018. 768 с.: ил. С. 66–68.
7. Сергеева Т.С., Морозов А.Ю. Использование графических процессоров в задачах интегрирования систем ОДУ с интервальными начальными условиями // Материалы XII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (NPNJ'2018), 24–31 мая 2018 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2018. 768 с.: ил. С. 659–661.
8. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л., Гидаснов В.Ю. Применение адаптивной интерполяции в задачах моделирования динамических систем с интервальными параметрами // Материалы XX Юбилейной международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным системам (ВМСППС'2017). – М.: МАИ-Принт, 2017. 816 с. С. 90–92.
9. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л. Алгоритм адаптивной интерполяции для моделирования динамических систем с интервальными параметрами // Материалы XXII Междунар. науч.-практ. конф., посвящ. памяти генерального конструктора ракетно-космических систем академика М. Ф. Решетнева (12–16 нояб. 2018, г. Красноярск): в 2 ч. / под общ. ред. Ю. Ю. Логинова, СибГУ им. М. Ф. Решетнева. – Красноярск, 2018. Ч. 2. с. 143-145.

10. *Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л.* Учет интервального характера начальных условий при моделировании динамических систем // 15-я Международная конференция «Авиация и космонавтика – 2016», 14–18 ноября 2016 г. Москва. Тезисы. – Типография «Люксор», 2016. 739 с. С. 541–542.
11. *Морозов А.Ю.* Интерполяционный подход к задачам моделирования динамических систем с интервальными параметрами // Гагаринские чтения – 2017: XLIII Международная молодежная научная конференция: Сб. тезисов докладов. – М.: Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), 2017. 1479 с. С. 1015.
12. *Морозов А.Ю., Сергеева Т.С.* Использование графических процессоров в задачах моделирования динамических систем с интервальными параметрами // 16-я Международная конференция «Авиация и космонавтика – 2017», 20–24 ноября 2017 г. Москва. Тезисы. – Типография «Люксор», 2017. 732 с. С. 401.
13. *Сергеева Т.С., Морозов А.Ю.* Использование графических процессоров в задачах интегрирования систем ОДУ с интервальными данными // Гагаринские чтения – 2018: XLIV Международная молодежная научная конференция: Сб. тезисов докладов. Т. 2. – М.: Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), 2018. 417 с. С. 383–384.
14. *Морозов А.Ю.* Динамические структурированные сетки на основе kd-деревьев в задачах интегрирования систем ОДУ с интервальными начальными условиями // Гагаринские чтения – 2018: XLIV Международная молодежная научная конференция: Сб. тезисов докладов. Т. 2. – М.: Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), 2018. 417 с. С. 372.
15. *Морозов А.Ю.* Уменьшение эффекта обертывания в методах рядов Тейлора решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с интервальными начальными условиями // Международная научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов им. Е.В. Арменского. Материалы конференции. – М.: МИЭМ НИУ ВШЭ, 2016. 412 с. С. 14–15.