Моделирование и анализ данных
2019. № 4. С. 5–31
doi: 10.17759/mda.2019090401
ISSN: 2219-3758 (печатный)
ISSN: 2311-9454 (online)

Modelling and Data Analysis
2019. no. 4. pp. 5–31
doi: 10.17759/mda.2019090401
ISSN: 2219-3758 (print)
ISSN: 2311-9454 (online)

◇◇◇◇◇◇ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ◇◇◇◇◇

УДК 519.622.2:519.652

Моделирование динамических систем с интервальными параметрами. Обзор методов и программных средств

Морозов А.Ю.*
ФИЦ ИУ РАН, Москва, Россия
ФГБОУ ВО МАИ, Москва, Россия
morozov@infway.ru

Ревизников Д.Л.**
ФГБОУ ВО МАИ, Москва, Россия
ФИЦ ИУ РАН, Москва, Россия
reviznikov@gmail.com

В работе выполнен обзор существующих библиотек и реализованных в них методов моделирования динамических систем с интервальными параметрами. Рассмотрены доступные библиотеки программ AWA, VNODE-LP, COSY Infinity, RiOT, FlowStar, а также авторский алгоритм адаптивной интерполяции. Рассмотренные библиотеки позволяют находить гарантированные оценки решений, однако с течением времени эти оценки становятся существенно завышенными. За счет использования принципиально другого подхода к построению решений, алгоритм адаптивной интерполяции не подвержен накоплению ошибок, определяет границы решений с контролируемой точностью и работает значительно быстрее аналогов.

Для цитаты:
Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л. Моделирование динамических систем с интервальныминпараметрами. Обзор методов и программных средств // Моделирование и анализ данных.2019. № 4. С. 5–31. doi: 10.17759/mda.2019090401

****Морозов Александр Юрьевич***, кандидат физико-математических наук, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской Академии Наук (ФИЦ ИУ РАН), Москва, Россия. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» (ФГБОУ ВО МАИ), Москва, Россия. E-mail: morozov@infway.ru

*****Ревизников Дмитрий Леонидович,*** доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» (ФГБОУ ВО МАИ), Москва, Россия. Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской Академии Наук (ФИЦ ИУ РАН), Москва, Россия. E-mail: reviznikov@gmail.com

Ключевые слова: интервальные методы, динамические системы с интервальными параметрами, алгоритм адаптивной интерполяции, библиотеки методов, AWA, VNODE, COSY Infinity, RiOT, FlowStar, verifyode.

Введение

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 есть информация о диапазонах, 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 задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с интервальными начальными условиями или параметрами.

Отметим, что аппарат исследования динамических систем достаточно широко развит [1–5] и обобщение его на динамические системы с интервальными параметрами представляет практический интерес.

Выделим несколько групп существующих методов. К первой группе отнесем методы типа Монте-Карло, представленные в работах Соболя И. М. [6], Ермакова С.М., Михайлов Г.А. [7], Крамера Г. [8], Золотарева В.М. [9] 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.

В качестве альтернативы выступают методы, в основе которых лежат интервальные вычисления. Еще Архимед в свое время использовал интервальные оценки для определения числа пи, но активное развитие интервальные методы получили, начиная с XX века в работах Янги Р. [10], Двайера П. [11], Вармуса М. [12], Сунаги Т. [13], Мура Р. [14], Лонера Р. [15], Хансена Э. [16], Алефельда Г. [17], Кравчика Р. [18], Никельи К. [19], Ноймайера А. [20] и др. Среди отечественных родоначальников интервальной математики – Брадис В.М. [21], Канторович Л. В. [22], Шокин Ю.И. [23, 24], Добронец Б.С. [25, 26], Шарый С.П. [27], Рогалев А. Н. [28–30] 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 [31].

Во вторую группу входят методы, основанные на рядах Тейлора. Они в первую очередь ориентированы на получение гарантированных оценок решений, однако 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 [14], метод параллелепипедов [32], QR-метод Лонера [15] 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 [33], VNODE [34], ADIODES [35], VSNODE [36], VNODE-LP [37].

Отдельно стоят методы модели Тейлора, разработанные в Мичиганском университете Берзом М., Макино К. [38–43], Нехером М., Джексоном К.Р., Недялковым Н.С. [44], Натарым П.С., Сондуром С. [45] и др. В их основе лежит принципиально иной подход. Как и в других методах, основанных на рядах Тейлора, решение здесь раскладывается в ряд Тейлора и выполняется оценка остаточного члена, но при этом все вычисления происходят не в числах и не в интервалах, а в так называемых моделях Тейлора. Модель Тейлора представляет собой полином некоторой степени с интервальным остатком. Она сочетает интервальную арифметику с символьными вычислениями. Эффект обертывания уменьшается за счет установки функциональных зависимостей между начальными условиями и решением в каждый момент времени. Все вычисления с коэффициентами полиномиальной части модели Тейлора выполняются на множестве вещественных чисел, а интервальные границы вычисляются только для остатка ряда. При данном подходе все арифметические операции и стандартные функции должны работать с целыми полиномами в качестве операндов. Такой подход довольно эффективно снижает эффект обертывания, но при этом работа с полиномами выполняется намного медленнее работы с интервалами [46]. Среди библиотек, реализующих данные методы, можно выделить несколько: COSY Infinity [47], RiOT [48], FlowStar [49, 50], verifyode [51] и др. Область сходимости рядов практически всегда ограничена, поэтому в общем случае для решения задач, содержащих «большие» интервалы, в работах Макина К., Берза М. [52], Клеттинга М., Рауха А., Ашеманна Х., Хофера Е.П. [53] и других описываются идеи расщепления исходной области неопределенности на подобласти, которые обрабатываются по отдельности.

К третьей группе отнесем методы, основанные на символьных вычислениях. В частности, это методы модели Тейлора, а также метод, аппроксимирующий оператор сдвига вдоль траектории (Рогалев А.Н. [28–30]). 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.

В работах Добронца Б.С. [54, 55], Некрасова С.А. [56] 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.

Также стоит упомянуть методы, которые приближают множество решений эллипсоидами, параллелепипедами или многогранниками [57, 58]. Они не лишены свойства завышения оценок, и для них желательным является выпуклость множества.

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 они хорошо распараллеливались. В последние годы активно идет развитие программно-аппаратной технологии CUDA, которая позволяет использовать графические процессоры (GPU) компании NVIDIA для общих вычислений. Ключевое отличие GPU от центральных процессоров (CPU) заключается в наличии тысяч ядер, способных одновременно производить расчеты. При использовании даже не очень дорогих видеокарт можно получить прирост производительности в десятки, а то и в сотни раз по сравнению с вычислениями на центральном процессоре. Отметим, что при всей своей привлекательности разработка, ориентированная на GPU, обладает рядом особенностей. Например, вместо наличия только оперативной памяти здесь имеется шесть различных ее видов и возможность напрямую взаимодействовать с кеш-памятью.

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, авторами данной работы был разработан алгоритм адаптивной интерполяции [59–62], который позволяет за приемлемое время находить интервальную оценку решений с контролируемой точностью, не подвержен эффекту обертывания, имеет высокую степень распараллеливания, справляется с «большими» интервалами и при этом не требует аналитической записи правой части ОДУ и вычисления старших производных.

Идея алгоритма заключается в построении динамической структурированной сетки на основе kd-дерева над множеством, образованным интервальными параметрами задачи. Каждая вершина дерева представляет собой интерполяционную сетку, соответствующую заданной степени интерполяционного многочлена. С каждым узлом сетки сопоставляется решение, найденное при параметрах, определяемых положением узла в пространстве. В процессе выполнения алгоритма на каждом шаге интегрирования исходной системы ОДУ строится кусочно-полиномиальная функция, которая интерполирует зависимость решения задачи от точечных значений интервальных параметров. При наличии такой функции, нахождение интервальной оценки сводится к задаче оптимизации, для решения которой существуют как классические методы [63], так и интервальные [64–66].

Каждая итерация алгоритма состоит из двух этапов. На первом этапе все решения, связанные с узлами интерполяционных сеток, переносятся на следующий временной слой с помощью какого-либо численного метода интегрирования. На втором этапе происходит перестроение kd-дерева по принципу минимизации ошибки интерполяции в вершинах.

Возможность определять наличие в динамической системе бифуркаций и хаоса является важным аспектом при исследовании динамических систем [1, 67, 68]. В связи с этим отметим, что по качественному изменению адаптивной сетки, получающейся в процессе работы алгоритма, можно судить о режимах, которые возникают в динамической системе.

Алгоритм адаптивной интерполяции на основе kd-дерева

Интервальная постановка задачи Коши:

$$\begin{cases} u' = f(t,u,\eta) \\ u(0) = u_0 \in \mathrm{u}_0, \eta \in \mathrm{\eta}, \\ t \in [0;t_N] \end{cases} \tag{1}$$

где $f:\mathbb{R}\times\mathbb{R}^{n_u}\times\mathbb{R}^{n_\eta}\to\mathbb{R}^{n_u}$ – правая часть системы ОДУ, $\mathbf{u}_0\in\mathbb{IR}^{n_u}$ – интервальные начальные условия, $\boldsymbol{\eta}\in\mathbb{IR}^{n_\eta}$ – интервальные параметры.

Здесь и далее интервалы выделяются жирным шрифтом, а их множество обозначается $\mathbb{IR}=\left\{\mathbf{x}=\left[\underline{\mathrm{x}};\overline{\mathrm{x}}\right],\underline{\mathrm{x}},\overline{\mathrm{x}}\in\mathbb{R}\right\}$.

Для дальнейшего удобства описания алгоритма преобразуем к автономной системе ОДУ без параметров путем добавления в систему фиктивных уравнений, а также сгруппируем интервальные начальные условия:

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

где $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$, $\mathbf{y}_0=\left(\mathbf{y}_0^1,\mathbf{y}_0^2,...,\mathbf{y}_0^{\mathrm{m}},y_0^{m+1},....,y_0^n\right)^T$, $n=n_u+n_\eta+1$.

Обозначим через $y_k=y(y_0,t_k)$ решение системы 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:

$$G_k^0=\left\{(y_0^{i_1i_2\ldots i_m},y_k^{i_1i_2\ldots i_m})\mid 0\le i_l\le p,1\le l\le m\right\},$$

$$y_0^{i_1i_2\ldots i_m}=\left(\underline{\mathrm{y}}_0^1+\frac{\overline{\mathrm{y}}_0^1-\underline{\mathrm{y}}_0^1}{p}i_1,\underline{\mathrm{y}}_0^2+\frac{\overline{\mathrm{y}}_0^2-\underline{\mathrm{y}}_0^2}{p}i_2,...,\underline{\mathrm{y}}_0^{\mathrm{m}}+\frac{\overline{\mathrm{y}}_0^{\mathrm{m}}-\underline{\mathrm{y}}_0^{\mathrm{m}}}{p}i_m,y_0^{m+1},....,y_0^n\right)^T,$$

$$y_k^{i_1i_2\ldots i_m}=y(y_0^{i_1i_2\ldots i_m},t_k),$$

где p – степень интерполяционного многочлена. Отметим, что требование равномерности разбиения необязательно и используется здесь для сокращения записи.

Для каждого $y_k^{i_1i_2\ldots i_m}$ вычислим $y_{k+1}^{i_1i_2\ldots i_m}=y(y_0^{i_1i_2\ldots i_m},t_{k+1})=y(y_k^{i_1i_2\ldots i_m},t_{k+1}-t_k)$, решив соответствующую неинтервальную систему ОДУ. По полученной табличной функции

$$G_{k+1}^0=\left\{(y_0^{i_1i_2\ldots i_m},y_{k+1}^{i_1i_2\ldots i_m})\mid 0\le i_l\le p,1\le l\le m\right\}$$

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

$$P_{k+1}^0(y)=\sum_{i_1=0}^{p}...\sum_{i_m=0}^{p}y_{k+1}^{i_1i_2\ldots i_m}l^{i_1i_2\ldots i_m}(y),$$

где

$$l^{i_1i_2\ldots i_m}(y)=\prod_{j=0}^{p}\prod_{\substack{l=0\\ i_l\ne j}}^{m}\frac{p\left(y^l-\underline{\mathrm{y}}_0^1\right)\Big/\left(\overline{\mathrm{y}}_0^1-\underline{\mathrm{y}}_0^1\right)-j}{i_l-j}.$$

Если погрешность интерполяции

$$e=\max_{y_0\in\mathbf{y}_0}\left\|y(y_0,t_{k+1})-P_{k+1}^0(y_0)\right\|$$

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 e. 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. На практике определяется минимальный размер ячейки, обычно сопоставимый с машинным эпсилоном, 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. Строить kd-дерево заново для каждого шага нет необходимости, вместо этого используется дерево, полученное на предыдущем шаге, и в зависимости от оценки погрешности интерполяции в его вершинах оно перестраивается (рис. 1). Процесс дробления вершин всегда происходит на предыдущем шаге (пунктирные линии), потому что при создании новых вершин выполняется интерполяция связанных с их узлами значений, и это необходимо выполнять 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 соответствующей области (рис. 2). Выделим два подхода к их выбору.

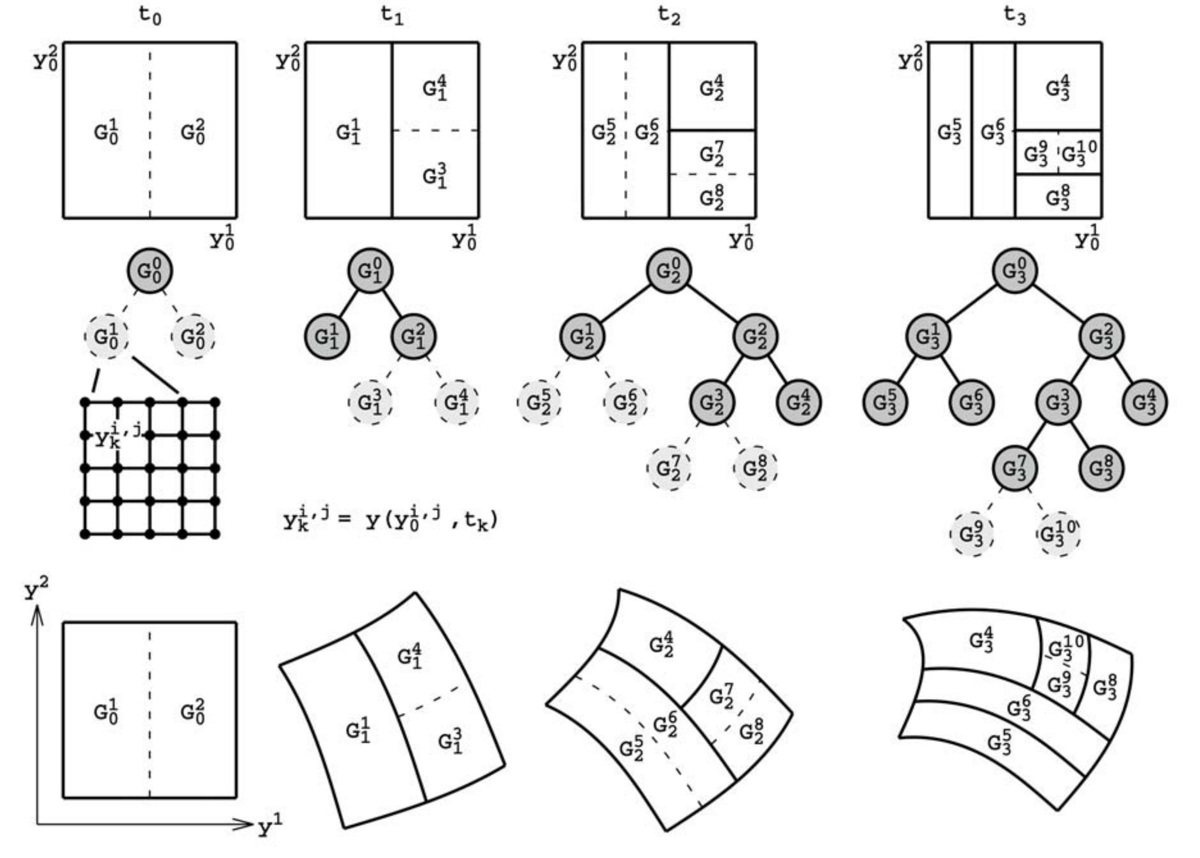

Рис. 1. Иллюстрация работы алгоритма.

Первый подход заключается в добавлении при создании в каждую вершину случайным образом тестового множества точек. Для оценки погрешности связанные с ними значения сравниваются со значениями, полученными интерполяцией. Использование та-

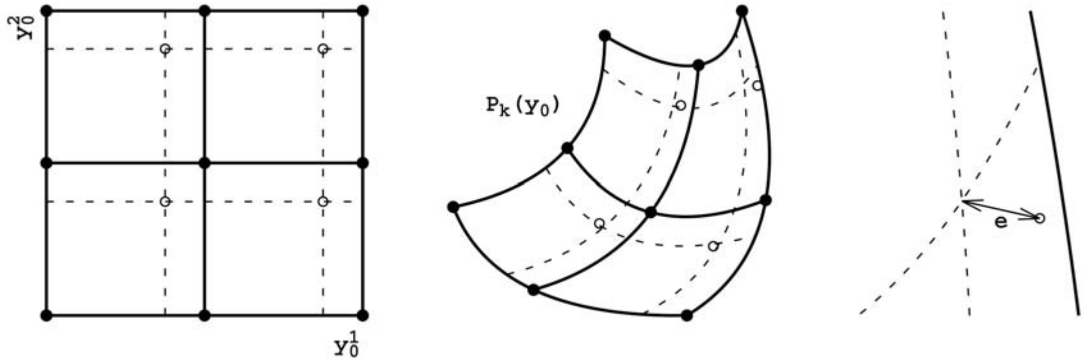

Рис. 2. Оценка погрешности интерполяции. Закрашенные точки – узлы интерполяционной сетки. Выколотые точки – точки, в которых оценивается погрешность интерполяции.

кого подхода, с одной стороны, позволяет адекватно оценивать погрешность, но, с другой стороны, требует дополнительных вычислительных затрат и дополнительной памяти для хранения вспомогательных точек. Второй подход заключается в удалении из сетки некоторого количества узлов с последующей интерполяцией связанных с ними значений по оставшимся узлам. Данный подход является менее трудозатратным, так как не требует дополнительных узлов, но при этом полученная оценка является завышенной, так как понижается степень интерполяционного полинома.

Методы рядов Тейлора

Рассмотрим интервальную задачу Коши:

$$\begin{cases} u' = f(u), \\ u(t_0) = u_0 \in \mathrm{u}_0, \end{cases}$$

где $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ – правая часть системы ОДУ, $\mathrm{u}_0 \in \mathbb{IR}^m$.

Интервальные методы рядов Тейлора [31, 46, 69] заключаются в разбиении исходного периода интегрирования на определенное число шагов; при этом каждый шаг интегрирования состоит из двух этапов. Первый этап заключается в определении текущего шага интегрирования и априорного интервала v_j, гарантированно содержащего единственное решение $u(t)$ для всех $t \in \left[t_{j-1}; t_j\right]$ и $u_{j-1} \in \mathrm{u}_{j-1}$ (рис. 3).

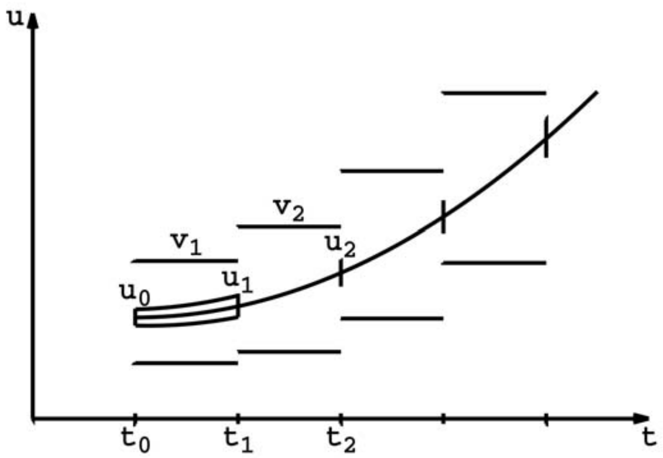

Рис. 3. Априорная оценка решения

На этом этапе часто применяют метод постоянного приближения первого порядка для автономных задач Коши, который заключается в следующем. Если h_j и v_j удовлетворяют условию $\mathrm{v}_j^1 = \mathrm{u}_{j-1} + [0; h_j] f(\mathrm{v}_j) \subseteq \mathrm{v}_j$, то задача Коши имеет единственное решение $u(t) \in \mathrm{v}_j^1$ для всех $t \in [t_{j-1}; t_j]$ и $u_{j-1} \in \mathrm{u}_{j-1}$.

На втором этапе с помощью априорного интервала v_j вычисляется более узкий интервал u_j, гарантированно содержащий решение исходной задачи в точке t_j.

Каждый шаг интегрирования рассматривается как некоторое нелинейное преобразование из $\mathbb{R}^m$ в $\mathbb{R}^m$. При этом отделяется вычисление траектории перемещения области решения от производимых с ней деформаций под действием преобразования (для этого дополнительно вычисляется матрица Якоби преобразования).

Вычисление полных производных вплоть до k-го порядка имеет вид:

$$f^{[0]}(u) = u,\ f^{[k]}(u) = \left(\frac{\partial f^{[k-1]}}{\partial u} f\right)(u),\ k \ge 1$$

вычисление матрицы Якоби преобразования:

$$\mathrm{S}_{j-1} = I + \sum_{k=1}^{n} \frac{h_j^k}{k!} J\left(f^{[k]}\right)\left(\mathrm{u}_{j-1}\right)$$

где I – единичная матрица, $J\left(f^{[k]}\right)$ – матрица Якоби для $f^{[k]}$. Для некоторой точки $\hat{u}_{j-1} \in \mathrm{u}_{j-1}$ получаем итоговую формулу

$$u\left(t_j\right) \in \mathrm{u}_j = \hat{u}_{j-1} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h_j^k}{k!} f^{[k]}\left(\hat{u}_{j-1}\right) + \mathrm{S}_{j-1}\left(\mathrm{u}_{j-1} - \hat{u}_{j-1}\right) + \mathrm{z}_j$$

$$\mathrm{z}_j = \frac{h_j^{n+1}}{(n+1)!} f^{[n]}\left(\mathrm{v}_j\right)$$

Здесь эффект обертывания появляется в связи с членом $\mathrm{S}_{j-1}\left(\mathrm{u}_{j-1} - \hat{u}_{j-1}\right)$.

Рассмотрим множество

$$\Sigma = \left\{ S_{j-1}\left(u_{j-1} - \hat{u}_{j-1}\right) \middle| S_{j-1} \in \mathrm{S}_{j-1}, u_{j-1} \in \mathrm{u}_{j-1} \right\}$$

На каждом шаге интегрирования оно заменяется соответствующим прямоугольным параллелепипедом со сторонами, параллельными осям координат. За счет этого происходит паразитное увеличение множества решений.

Все методы семейства направлены на учет происходящих преобразований исходной области с дальнейшей их компенсацией на каждом шаге. Основная схема:

$\hat{u}_0 = \mathrm{mid}\left(u_0\right)$, $\mathrm{r}_0 = \mathrm{u}_0 - \hat{u}_0$, $B_0 = I$,

$$\hat{u}_j = \hat{u}_{j-1} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h_{j-1}^k}{k!} f^{[k]}\left(\hat{u}_{j-1}\right) + \mathrm{mid}\left(\mathrm{z}_j\right),$$

$$\mathrm{u}_j = \hat{u}_{j-1} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h_{j-1}^k}{k!} f^{[k]}\left(\hat{u}_{j-1}\right) + \mathrm{z}_j + \left(\mathrm{S}_{j-1} B_{j-1}\right)\mathrm{r}_{j-1},$$

где z_j – локальная ошибка, r_j – глобальная ошибка:

$$\mathrm{r}_j = \left(B_j^{-1}\left(\mathrm{S}_{j-1} B_{j-1}\right)\right) r_{j-1} + B_j^{-1}\left(\mathrm{z}_j - \mathrm{mid}\left(\mathrm{z}_j\right)\right).$$

Все методы семейства различаются только способом вычисления матрицы B_j:

- Прямой метод Мура: $B_j = I$.
- Метод параллелепипедов (Еижгенраам, Лонер): $B_j = \mathrm{mid}\left(\mathrm{S}_{j-1}B_{j-1}\right)$.
- QR-метод (Лонер): $\mathrm{mid}\left(\mathrm{S}_{j-1}B_{j-1}\right) = QR,\ B_j = Q$.

Прямой метод Мура никак не компенсирует эффект обертывания. QR-метод Лонера отличается от метода параллелепипедов тем, что на каждом шаге область решения заключается в прямоугольный параллелепипед для более эффективного учета локальной ошибки z_j.

Описанные выше методы значительно снижают эффект обертывания, особенно в однородных линейных системах ОДУ с постоянными коэффициентами. Однако при интегрировании нелинейных систем ОДУ эффект обертывания все равно проявляется, хотя и в меньшей мере, и начиная с определенного момента получаемые оценки решения становятся чрезмерно большими и неприемлемыми.

Матрица Якоби характеризует деформацию элементарных объемов пространства. В случае линейной системы ОДУ матрица Якоби постоянна и каждый элементарный объем области деформируется линейно и одинаково, как и в целом вся область. Поэтому область в процессе решения остается параллелепипедом. В случае нелинейной системы ОДУ матрица Якоби в каждой точке области разная. За счет использования интервальной арифметики получается уже интервальная матрица Якоби, содержащая в себе все возможные матрицы во всех точках области. При использовании такой матрицы для деформации заведомо закладывается то, что любой элементарный объем области может быть деформирован любой вещественной матрицей Якоби. Это в конечном счете и ведет к паразитному эффекту.

В работе [31] были предложены несколько модификаций данных методов для снижения эффекта обертывания. Их идея заключается в том, чтобы вычислять матрицу Якоби не для всей области, а только для некоторой заведомо меньшей части или вообще только в одной точке. Использование такого подхода лишает свойства гарантированности, но, как показали численные эксперименты, большая часть решения все равно содержится в получаемой оценке.

Библиотека AWA

Библиотека AWA [33] разработана на Pascal-XSC в 1994 году Лонером Р. для решения ОДУ с гарантированной оценкой погрешности. Данная библиотека представляет собой реализацию QR-метода Лонера в качестве второго этапа и метода постоянного приближения для проверки существования и единственности решения в качестве первого этапа [46].

Библиотека VNODE-LP

Библиотека VNODE-LP [37], это решатель интервальных систем ОДУ, разработанный в 2006 году Недялковым Н. С на алгоритмическом языке C++. В отличие от традиционных решателей, которые вычисляют приблизительные решения, этот решатель доказывает, что существует единственное решение задачи, а затем строит строгие границы, которые гарантированно содержат его.

Библиотека является преемником библиотеки VNODE (Validated Numerical ODE), разработанной Недялковым Н. С. Отличительной особенностью данного решателя является то, что он полностью посвящен «грамотному программированию». Грамотное программирование – это стиль написания программ, при котором программа рассматривается не как последовательность инструкций для компьютера, а как литературное произведение. Таким образом, программист при написании программы формально описывает действия, которые он ожидает от компьютера, вставляя в соответствующие места код на языке программирования. Данная концепция предложена Кнутом Д. в 1984 году.

На первом этапе используется метод НОЕ, а во втором – метод Эрмита – Обрешкова. VNODE-LP имеет переменный шаг интегрирования и постоянный порядок.

Методы модели Тейлора

Начиная с 1990-х годов профессором Берзом М. и его командой были разработаны методы модели Тейлора, которые сочетают интервальную арифметику с символьными вычислениями [44]. В этих методах основным типом данных является так называемая модель Тейлора, которая представляет собой полином некоторой степени с интервальным остатком:

$$p_n(x) + \mathrm{i}$$

При использовании такого представления негативные эффекты, связанные с использованием интервальной арифметики, влияют только на интервальный остаточный член и полиномиальные члены порядка выше n, которые обычно очень малы.

Пусть $f : D \subset \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ – $(n+1)$ раз непрерывно дифференцируемая функция на открытом множестве D, содержащем интервальный вектор x. Пусть x_0 – точка в x, p_n – многочлен Тейлора n-го порядка функции f в окрестности x_0, и i – интервал такой, что:

$$f(x) \in p_n\left(x - x_0\right) + \mathrm{i},\ \forall x \in \mathrm{x}$$

Пара $\left(p_n, \mathrm{i}\right)$ называется моделью Тейлора n-го порядка для функции f в окрестности точки x_0 на x.

Арифметические операции над моделями Тейлора определяются следующим образом:

$$T_1 + T_2 = \left(p_1 + p_2, \mathrm{i}_1 + \mathrm{i}_2\right),\ T_1 \cdot T_2 = \left(p_{1\cdot 2}, \mathrm{i}_{1\cdot 2}\right),$$

где $p_{1\cdot 2}$ – часть полинома $p_1 \cdot p_2$, не превышая порядка n,

$$\mathrm{i}_{1\cdot 2} = B\left(p_e\right) + B\left(p_1\right)\cdot \mathrm{i}_2 + B\left(p_2\right)\cdot \mathrm{i}_1 + \mathrm{i}_1 \cdot \mathrm{i}_2,$$

где p_e – часть полинома $p_1 \cdot p_2$ порядка от $n+1$ до $2n$, $B(p)$ – интервальная оценка полинома p на множестве x.

Пример 1 [44]. Вычислим модель Тейлора второго порядка для экспоненты и косинуса на $\mathrm{x} = \left[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right]$. Разложим функции в ряд Тейлора в окрестности нуля:

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 e^{\xi},\ \cos(x) = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 \sin(\xi),$$

где $x, \xi \in \mathrm{x}$. Получаем следующие модели Тейлора:

$$T_1(x) := 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \left[-0,035; 0,035\right],\ T_2(x) := 1 - \frac{1}{2}x^2 + \left[-0,010; 0,010\right].$$

Выполним их перемножение:

$$T_1(x)T_2(x) \subseteq \left(1 + x + \frac{1}{2}x^2\right)\left(1 - \frac{1}{2}x^2\right) + \left(1 + x + \frac{1}{2}x^2\right)\left[-0,010; 0,010\right] +$$

$$+\left(1-\frac{1}{2}x^2\right)[-0,035;0,035]+[-0,010;\,0,010][-0,035;0,035]\subseteq(1+x)-\frac{1}{2}x^3-$$

$$-\frac{1}{4}x^4+[0,625;\,1,625][-0,010;\,0,010]+[0,875;\,1][-0,035;0,035]+$$

$$+[-0,004;0,004]\subseteq 1+x-[-0,063;\,0,063]-[-0,016;\,0,016]+[-0,202;\,0,202]=$$

$$=1+x+[-0,281;\,0,281].$$

В результате получена модель Тейлора для функции $e^x\cos x,\ x\in \mathrm{x}$:

$$e^x\cos x\in 1+x+[-0,281;\,0,281],\ x\in \mathrm{x}.$$

Решение интервальных систем ОДУ ищется в виде модели Тейлора относительно интервальных начальных условий. Все арифметические действия в методах заменяются соответствующими операциями над полиномами, в результате чего в конечный момент времени решение представляется в виде полинома относительно интервальных параметров и некоторого интервального остатка.

Пример 2 [44]. Рассмотрим систему ОДУ с интервальными начальными условиями:

$$\begin{cases} u'=v,\ v'=u^2,\\ u(0)=1+u_0,\, v(0)=-1+v_0, \end{cases}$$

где $u_0\in[-0,05;0,05]$ и $v_0\in[-0,05;0,05]$. Выполним два шага методом Эйлера с использованием моделей Тейлора 2-го порядка:

$$u(0,1)=1+u_0+(-1+v_0)0,1=0,9+u_0+0,1v_0,$$

$$v(0,1)=-1+v_0+(1+u_0)^2\,0,1=-0,9+v_0+0,2u_0+0,1u_0^2,$$

$$u(0,2)=0,9+u_0+0,1v_0+\left(-0,9+v_0+0,2u_0+0,1u_0^2\right)0,1=$$

$$=0,81+1,02u_0+0,2v_0+0,01u_0^2,$$

$$v(0,2)=-0,9+v_0+0,2u_0+0,1u_0^2+(0,9+u_0+0,1v_0)^2\,0,1=$$

$$=-0,819+1,018v_0+0,38u_0+0,2u_0^2+0,001v_0+0,02v_0u_0.$$

Уже начиная с третьего шага в процессе вычислений появятся степени больше второй, которые будут «уходить» в интервальный остаток. Полученное таким способом решение не является гарантированным, так как оно не учитывает погрешность метода Эйлера. В оригинальном методе происходит аналитическое разложение решения в ряд Тейлора и вычисление интервальной оценки остаточного члена. Поэтому полученное таким способом решение гарантированно содержит все решения исходной системы ОДУ.

В целом использование арифметики моделей Тейлора вместо классических интервальных арифметик существенно снижает эффект обертывания, особенно при интегрировании нелинейных систем ОДУ.

Библиотека COSY Infinity

Библиотека COSY Infinity [47] разрабатывается в Мичиганском университете профессором Берзом М. и его командой. Это система для проведения различных современных научных вычислений. Она состоит из следующих частей:

1. Набор расширенных и оптимизированных типов данных:
   - Дифференциальные алгебраические типы для многомерного исследования ОДУ, потоков и дифференциальных уравнений в частных производных высокого порядка. Здесь имеется поддержка автоматического дифференцирования высокого порядка.
   - Тип модели Тейлора для строгих вычислений высокого порядка. Разнообразные инструменты – в частности, инструменты для ограничения роста остаточного члена, инструменты для проверки ограничений и т. д.
2. Скриптовый язык COSYScript, в котором используются описанные выше типы. Он объектно ориентирован и поддерживает полиморфизм, имеет компактный и простой синтаксис, компилируется и выполняется на лету.
3. Интерфейсы для C, F77, C++ и F90 для использования типов во внешних программах.
4. Различные прикладные пакеты с использованием типов данных COSY, включая физику луча.

К сожалению, в текущей версии библиотеки COSY Infinity 10.1 (2018 год) модель Тейлора не поддерживается и при этом доступ к более ранним версиям отсутствует. В связи с этим выполнить прямое сравнение с данным программным комплексом не представляется возможным. Однако в работе [48] приводится сравнение библиотеки RiOT с COSY-VI на представительном наборе задач. Поэтому при сравнении с библиотекой RiOT будет выполнено косвенное сравнение с библиотекой COSY.

Библиотека RiOT

RiOT – это свободная программа на языке C++ для интегрирования систем ОДУ с интервальными начальными условиями, последняя версия – 2008 года [48]. В ней реализованы модель Тейлора, предложенная Берзом М. и Макино К., а также механизм уменьшения накопления ошибок интегрирования Shrink Wrapping [70, 71], который позволяет выполнять интегрирование на длительные периоды. Идея механизма заключается в том, что за счет варьирования коэффициентов полинома удается как бы «спрятать» интервальный остаток в полином, где уже работает неинтервальная арифметика.

Библиотека FlowStar

Библиотека FlowStar [50] – это инструмент для достоверного моделирования гибридных динамических систем с интервальными параметрами, разработанный на языке C++, последняя версия – 2017 года. По значению интервальных параметров, натурального числа m и гибридной системе A, которая моделируется гибридным автоматом, FlowStar вычисляет конечный набор моделей Тейлора, содержащий в себе все состояния A, которые достижимы не более чем за m шагов.

Библиотека состоит в основном из двух модулей: вычислительной библиотеки и алгоритмов высокого уровня. В первый модуль входят реализации интервалов и интервальных арифметик, а также модель Тейлора. Во втором модуле реализованы методы, которые используются в анализе достижимости. Текущая версия FlowStar поддерживает гибридные системы, включающие в себя следующие компоненты:

- Непрерывные динамические системы, которые задаются с помощью ОДУ с интервальными начальными условиями и параметрами.
- Условия перехода, которые можно определять в виде системы полиномиальных неравенств.
- и т.д.

Сравнение методов и реализаций

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 $h_0 = 3\times10^{-2}$. Так как рассматриваемые далее несколько задач взяты из работы [48], такой выбор параметров соответствует приведенным в этой работе расчетам. 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:

$$\begin{cases} x' = 2x - 2xy,\ y' = -y + xy, \\ x(0) \in [0,95; 1,05],\ y(0) \in [2,95; 3,05],\ t \in [0; 100]. \end{cases} \tag{3}$$

На рис. 4 показано множество решений системы в различные моменты времени. Для начальной точки $x = 1,\ y = 3$ период вращения равен $T = 5,488138468035$, о чем свидетельствует совпадение центров множеств в начальный момент времени и при $t = T$. Из-за того, что для остальных начальных точек, содержащихся в интервальных начальных условиях, период вращения другой, происходит вытягивание множества.

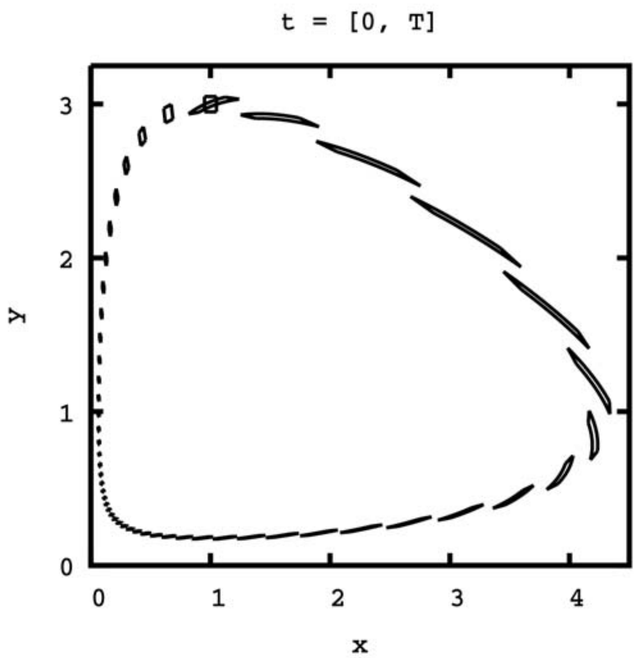

Рис. 4. Один период вращения множества решений системы

В таблице 1 и на рис. 5 приведено сравнение результатов, полученных разными программными комплексами. Библиотеки AWA и VNODE-LP практически не компенсируют эффект обертывания, и уже с момента $t > 4,5$ его влияние оказывается существенным и решения расходятся. Отметим, что по вычислительным затратам библиотека VNODE-LP наиболее эффективная.

Таблица 1

Сравнение результатов решения системы в момент времени 0,8T

Библиотека	Время, с	x	y
Точное решение	–	[2.469047; 2.847741]	[0,244560; 0,315898]
Алг. адпт. интр.	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]

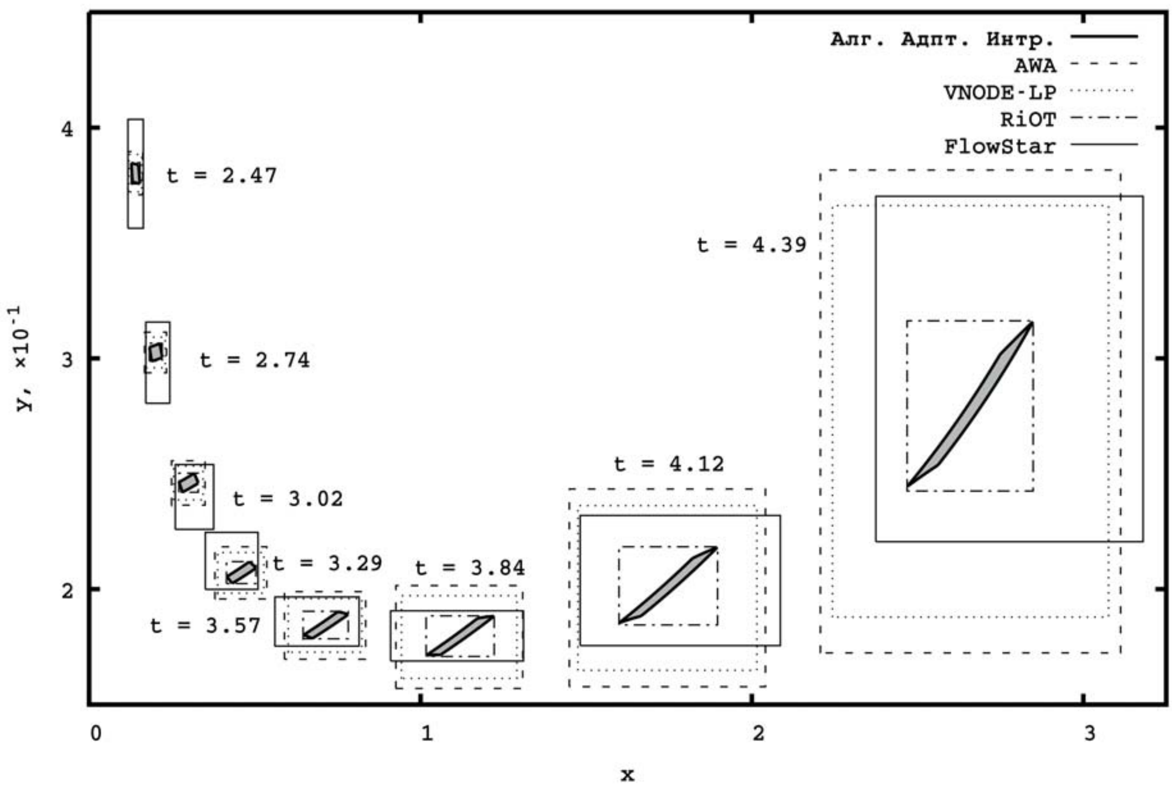

Рис. 5. Сравнение решений системы , полученных различными библиотеками, в различные моменты времени

В таблице 2 приведено сравнение с библиотекой COSY-VI. Здесь и далее время работы COSY-VI оценивается относительно библиотеки RiOT, так как в работе [48] имеется их сопоставление. В таблице 3 и на рис. 6 приведено сравнение решений системы в момент времени $t = 14,56$. Здесь наблюдается сильное завышение получаемых оценок решений.

Таблица 2

Сравнение результатов решения системы в момент времени T

Библиотека	Время, с	x	y
Точное решение	–	[0,816719; 1,240265]	[2,936455; 3,045758]
Алг. адпт. интр.	0,039	[0,816719; 1,240265]	[2,936455; 3,045758]
RiOT	287,5	[0,798904; 1,240280]	[2,933777; 3,054377]
FlowStar	158,8	[0,57513; 1,470005]	[2,869371; 3,113960]
COSY-VI	≈2,96	[0,816719; 1,240265]	[2,935927; 3,045759]

Таблица 3

Сравнение результатов решения системы в момент времени 14,56

Библиотека	Время, с	x	y
Точное решение	–	[0,581638; 0,911206]	[0,182434; 0,186810]
Алг. адпт. интр.	0,068	[0,581638; 0,911206]	[0,182434; 0,186810]
RiOT	903,7	[0,327651; 0,958718]	[0,113389; 0,235948]
FlowStar	460,4	[0,549449; 1,137605]	[0,169651; 0,193453]

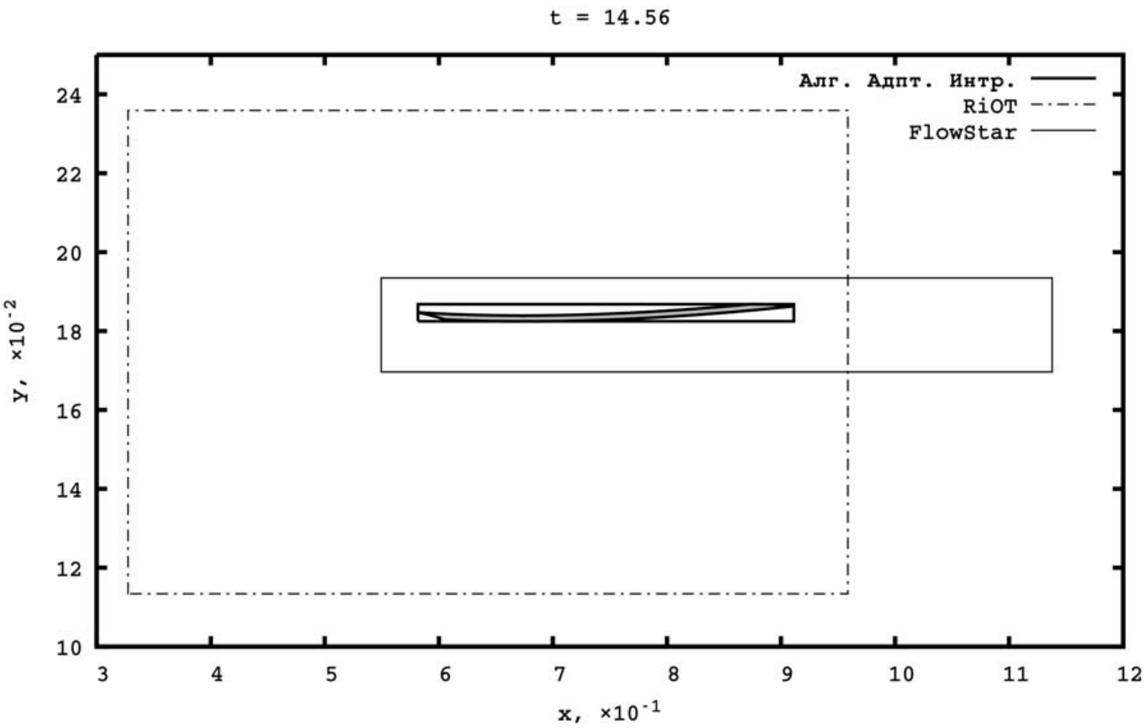

Рис. 6. Оценки решений системы различными библиотеками

На рис. 7 приведена иллюстрация решения, полученного библиотекой FlowStar. Интервальный остаток (i) существенно больше полиномиальной части решения, и уже при $t \approx 16$ библиотека аварийно завершает расчет.

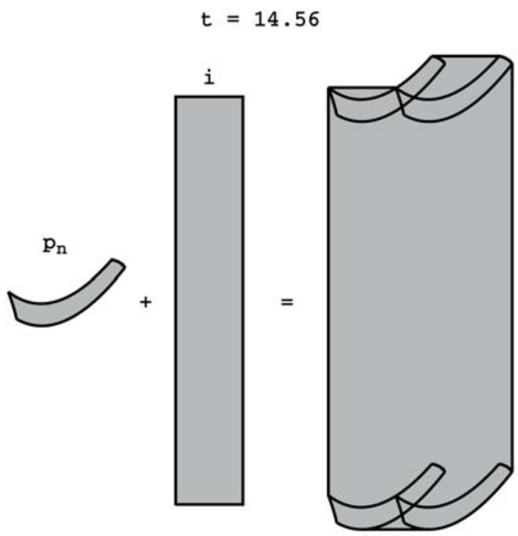

Рис. 7. Модель Тейлора. Решение системы , полученное FlowStar

Рассмотрим систему ОДУ:

$$\begin{cases} x' = \eta\left(\dfrac{\sqrt{3}}{2}x + \dfrac{1}{2}y\right),\ y' = \eta\left(-\dfrac{1}{2}x + \dfrac{\sqrt{3}}{2}y\right), \\ x(0) \in [-1;1],\ y(0) \in [-1;1],\ t \in [0;4{,}5], \end{cases} \tag{4}$$

где $\eta \in [-1;1]$.

На рис. 8 и рис. 9 показано множество решений исходной системы ОДУ в различные моменты времени.

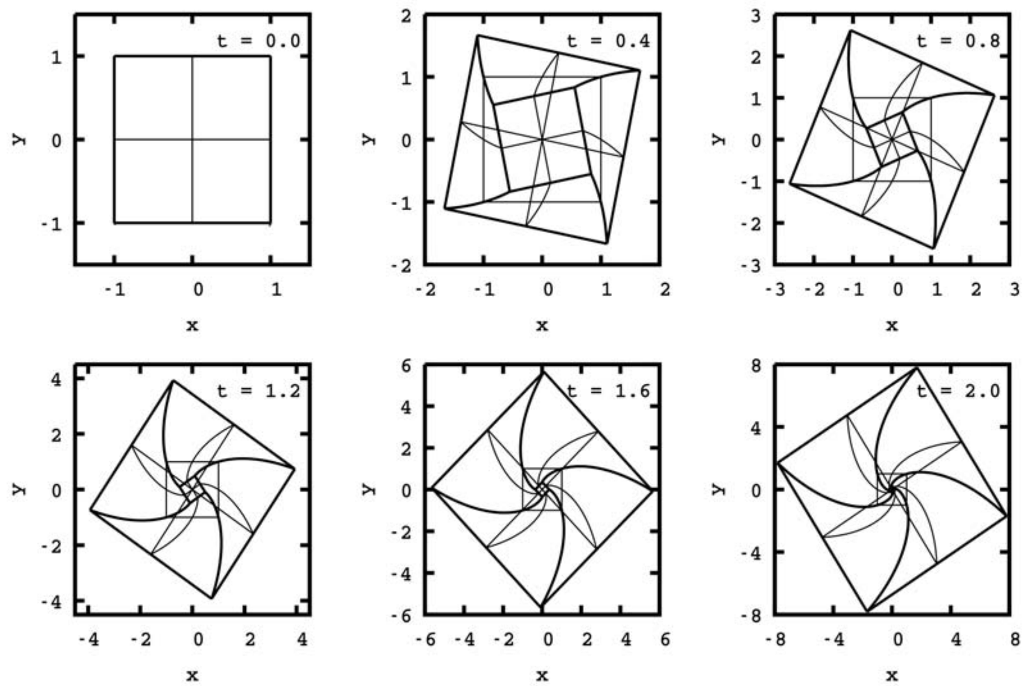

Рис. 8. Множество решений системы в различные моменты времени

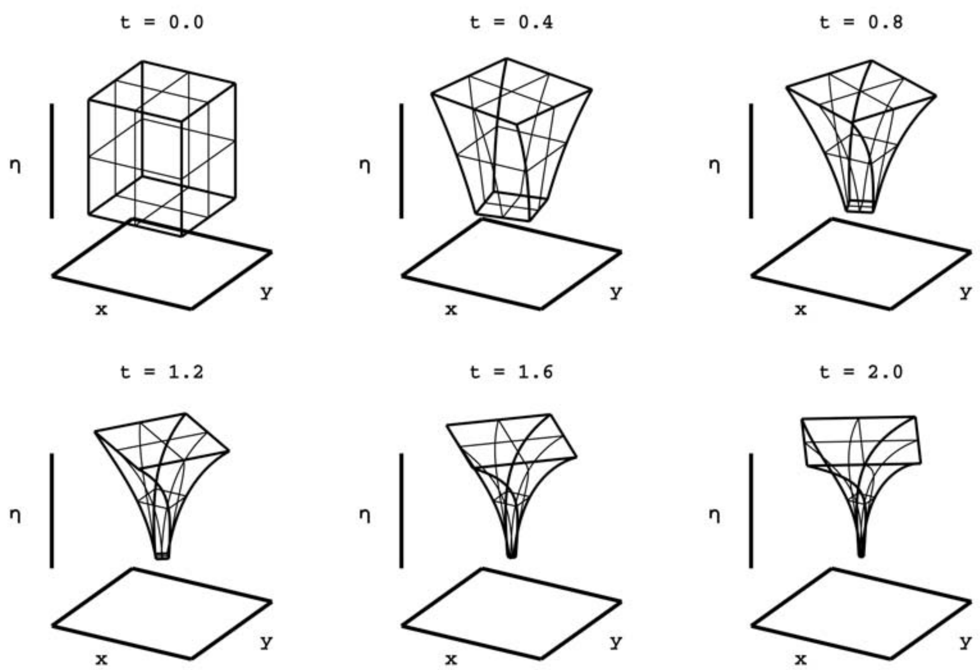

Рис. 9. Множество решений системы в трехмерном пространстве

Здесь наблюдается закручивание множества в спиралевидную воронку. Для алгоритма адаптивной интерполяции это приводит к постоянному увеличению плотности сетки по измерению η. В плоскости x, y при каждом конкретном значении η соответствующие сечения множества претерпевают линейные деформации растяжения и вращения.

Библиотеки AWA и VNODE-LP работают быстрее всех (таблица 4), но при этом они дают очень завышенные оценки решений и спустя некоторое время аварийно завершают расчет.

На рис. 10 представлено сравнение решений, полученных указанными библиотеками.

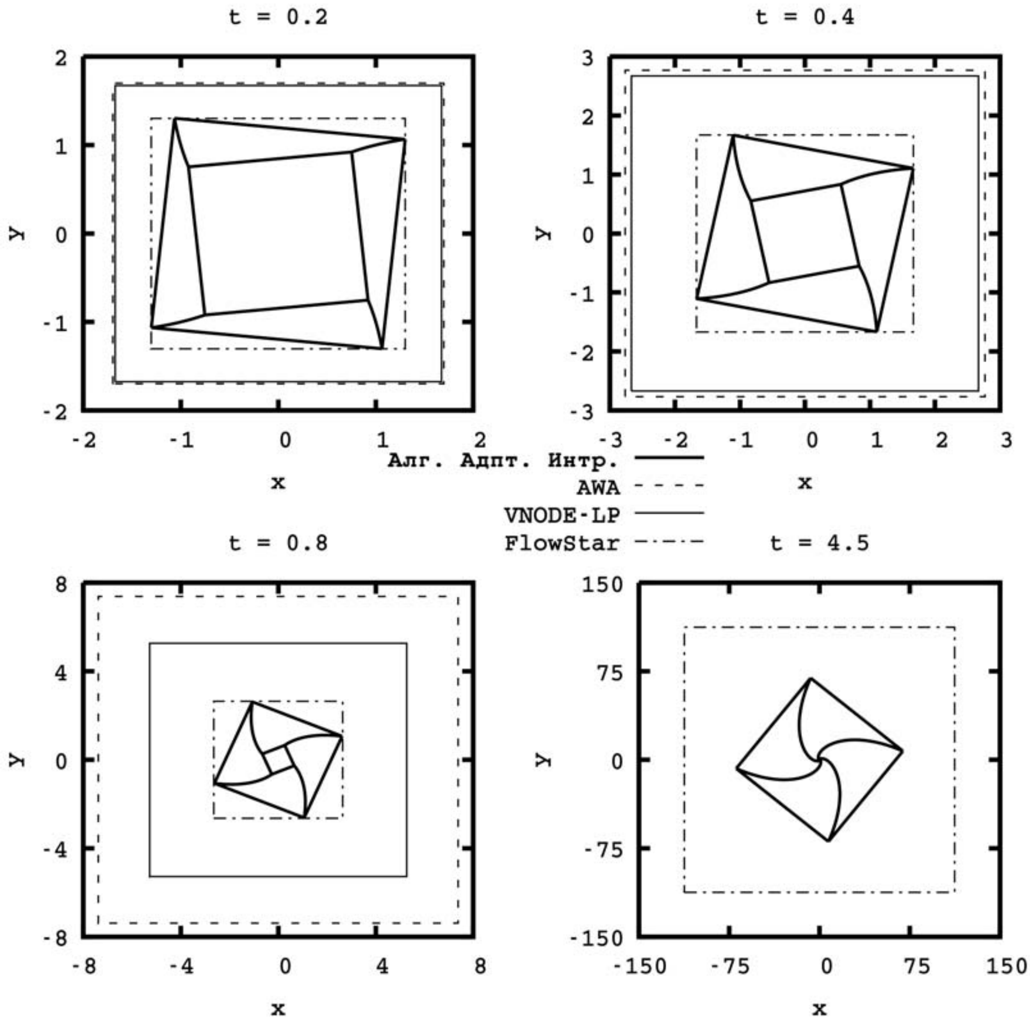

Рис. 10. Сравнение решений системы , полученных различными библиотеками, в различные моменты времени

Таблица 4

Сравнение результатов решения системы в момент времени 0,8

Библиотека	Время, с	x	y
Точное решение	–	[-2,620102; 2,620102]	[-2,620102; 2,620102]
Алг. адпт. интр.	0,055	[-2,620102; 2,620102]	[-2,620102; 2,620102]
AWA	0,008	[-7,379424; 7,379424]	[-7,379424; 7,379424]
VNODE-LP	0,004	[-5,270461; 5,270461]	[-5,270461; 5,270461]
FlowStar	0,072	[-2,642752; 2,642752]	[-2,642752;2,642752]

В целом, как и в предыдущих примерах, библиотека FlowStar проявляет себя лучше, чем AWA и VNODE-LV, с точки зрения получаемых результатов. Но тем не менее из-за того, что метод, реализованный в ней, подвержен накоплению ошибок, спустя некоторое время от начала интегрирования получаемые интервальные оценки начинают расходиться.

Заключение

Выполнен обзор существующих библиотек и реализованных в них методов моделирования динамических систем с интервальными параметрами. Рассмотрены доступные библиотеки программ гарантированных вычислений AWA, VNODE-LP, COSY Infinity, RiOT, FlowStar, а также авторский алгоритм адаптивной интерполяции. Методы, реализованные в библиотеках AWA и VNODE-LP, просты и нетребовательны в плане вычислительных ресурсов, но эффективны в задачах, где интервалы не слишком велики или где нелинейность системы ОДУ проявляется слабо. Библиотеки COSY Infinity, RiOT и FlowStar основаны на символьно-интервальных вычислениях и область их применения значительно шире по сравнению с библиотеками AWA и VNODE-LP. Однако они тоже имеют тенденцию к завышению интервальных оценок. За счет использования принципиально другого подхода к построению решений алгоритм адаптивной интерполяции не подвержен накоплению ошибок, определяет границы решений с контролируемой точностью и работает значительно быстрее аналогов.

Литература

1. *Павлов Б.М., Новиков М.Д.* Автоматизированный практикум по нелинейной динамике (синергетике). – Диалог МГУ, ВМК, 2000. – 115 с.
2. *Красильников П.С.* Прикладные методы исследования нелинейных колебаний. М. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2015. – 528 с.
3. *Рыбаков К.А., Рыбин В.В.* Моделирование распределенных и дробно-распределенных процессов и систем управления спектральным методом. М.: Изд-во МАИ, 2016. – 160 с.
4. *Пантелеев А.В., Рыбаков К.А.* Прикладной вероятностный анализ нелинейных систем управления спектральным методом. М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2010. – 160 с.
5. *Архипов А.С., Семенихин К.В.* Гарантирующее оценивание параметров одномерной модели движения по вероятностному критерию при наличии унимодальных помех // Моделирование и анализ данных. 2019. No 2. С.31–38.
6. *Соболь И.М.* Метод Монте-Карло. М.: Наука, 1978.
7. *Ермаков С.М., Михайлов Г.А.* Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
8. *Крамер Г.* Математические методы статистики. М.: Мир, 1975.
9. *Золотарев В.М.* Общая теория перемножения независимых случайных величин // Доклады АН СССР. Т. 142. № 4. 1962. С. 788–791.
10. *Young R.C.* The algebra of many-valued quantities // Mathematische Annalen. Vol. 104. 1931. P. 260–290.
11. *Dwyer P.S.* Linear Computations. New York: John Wiley & Sons, 1951.
12. *Warmus M.* Calculus of Approximations // Bulletin de l'Academie Polonaise de Sciences. Vol. 4. № 5. 1956. P. 253–259.
13. *Sunaga T.* Theory of an Interval Algebra and its Application to Numerical Analysis // RAAG Memoirs. Vol. 2. 1958. P. 547–564.
14. *Moore R.E.* Interval Analysis. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1966.
15. *Lohner R.J.* Enclosing the solutions of ordinary initial and boundary value problems // Computer Arithmetic: Scientific Computation and Programming Languages. 1987. P. 255–286.
16. *Hansen E.* Interval Arithmetic in Matrix Computations Part I // SIAM Journal on Numerical Analysis. Vol. 2, № 2. 1965. P. 308–320.

17. *Алефельд Г., Херцбергер Ю.* Введение в интервальные вычисления. М.: Мир, 1987.
18. *Krawczyk R.* Newton-Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehlerschranken // Computing. Vol. 4. № 3. 1969. P. 187–201.
19. *Nickel K.* Über die Notwendigkeit einer Fehlerschranken-Arithmetic für Rechenautomaten // Numerische Mathematik. Vol. 9. № 1. 1966. P. 69–79.
20. *Neumaier A.* Interval Methods for Systems and Equations. Cambridge: Cambridge University Press, 1990.
21. *Брадис В.М.* Теория и практика вычислений. Пособие для высших педагогических учебных заведений. М.: Учпедгиз, 1937.
22. *Канторович Л.В.* О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений // Сибирский математический журнал. Т. 3. № 5. 1962. С. 701–709.
23. *Калмыков С.А., Шокин Ю.И., Юлдашев З.Х.* Методы интервального анализа. Новосибирск: Наука, 1986.
24. *Шокин Ю.И.* Интервальный анализ. М.: Наука, 1981.
25. *Добронец Б.С., Попова О.А.* Численный вероятностный анализ неопределенных данных. Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2014. 168 с.
26. *Добронец Б.С.* Интервальная математика. Красноярск: Кроснояр. гос. ун-т., 2007.
27. *Шарый С.П.* Конечномерный интервальный анализ. Новосибирск: XYZ, 2017.
28. *Рогалев А.Н.* Гарантированные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений на основе преобразования символьных формул // Вычислительные технологии. Т. 8. № 5. 2003. С. 102–116.
29. *Рогалев А.Н.* Вопросы реализации гарантированных методов включения выживающих траекторий управляемых систем // Сибирский журнал науки и технологий. № 2(35). 2011. С. 54–58.
30. *Рогалев А.Н.* Исследование и оценка решений обыкновенных дифференциальных уравнений интервально-символьными методами // Вычислительные технологии. Т. 4. № 4. 1999. С. 51–75.
31. *Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л.* Модификация методов решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с интервальными параметрами // Труды МАИ. № 89. 2016. С. 1–20.
32. *Eijgenraam P.* The Solution of Initial Value Problems Using Interval Arithmetic: Formulation and Analysis of an Algorithm. Amsterdam : Mathematisch Centrum, 1981. P. 185.
33. *Lohner R.J.* Einschließung der Losung gewohnlicher Anfangs und Randwertaufgaben und Anwendungen. PhD thesis, Universitat Karlsruhe, 1988.
34. *Nedialkov N.S., Jackson K.R., Pryce J.D.* An effective high-order interval method for validating existence and uniqueness of the solution of an IVP for an ODE // Reliable Computing, Vol. 7. № 6. 2001. P. 449–465.
35. *Stauning O.* Automatic Validation of Numerical Solutions. PhD thesis, Technical University of Denmark, 1997.
36. *Lin Y., Stadtherr M.A.* Validated solutions of initial value problems for parametric ODEs. // Applied Numerical Mathematics. Vol 57. № 10. 2007. P. 1145–1162
37. *Nedialkov N.S.* VNODE-LP – a validated solver for initial value problems in ordinary differential equations. Technical Report CAS-06–06-NN, Department of Computing and Software, McMaster University, 2006.
38. *Berz M., Makino K.* Verified integration of ODEs and flows with differential algebraic methods on Taylor models // Reliable Computing. Vol. 4. № 4. 1998. P. 361–369.
39. *Berz M., Makino K.* Suppression of the wrapping effect by Taylor model-based verified integrators: long-term stabilization by shrink wrapping // Differential Equations and Applications. Vol. 10. № 4. 2005. P. 385–403.
40. *Berz M., Makino K.* Suppression of the wrapping effect by Taylor model-based verified integrators: long-term stabilization by preconditioning // Differential Equations and Applications. Vol. 10. № 4. 2005. P. 353–384.
41. *Makino K., Berz M.* Efficient control of the dependency problem based on Taylor model methods // Reliable Computing. Vol. 5. № 1. 1999. P. 3–12.

42. *Makino K., Berz M.* Taylor models and other validated functional inclusion methods // Pure and Applied Mathematics Vol. 4. № 4. 2003. P. 379–456.
43. *Makino K., Berz M.* Verified Computations Using Taylor Models and Their Applications // Numerical Software Verification 2017: conference proceedings. (Heidelberg, Germany, July 22–23, 2017). Springer International Publishing AG 2017. P. 3–13.
44. *Neher M., Jackson K.R., Nedialkov N.S.,* On Taylor Model Based Integration of ODEs // SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 45. № 1. 2007. P. 236–262.
45. *Nataraj P.S. V., Sondur S.,* The Extrapolated Taylor Model // Reliable Computing, Vol. 15. 2011. P. 251–278.
46. *Позин А.В.* Обзор методов и инструментальных средств решения задачи Коши для ОДУ с гарантированной оценкой погрешности // Международная конференция «Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика», 30 мая – 4 июня 2011 г. Новосибирск. Тезисы. ИВТ СО РАН, 2011.
47. *Berz M.* COSY INFINITY version 8 reference manual. Technical Report MSUCL–1088, National Superconducting Cyclotron Lab., Michigan State Universitz, 1997.
48. *Eble I.* Über Taylor-Modelle: Dissertation zur erlangung des akademischen grades eines doktors der naturwissenschaften, Karlsruhe Institute of Technology, 2007.
49. *Chen X., Sankaranarayanan S.* Decomposed Reachability Analysis for Nonlinear Systems. // 2016 IEEE Real-Time Systems Symposium (RTSS): conference proceedings. (Porto, Portugal, 29 Nov.- 2 Dec. 2016). P. 13–24.
50. *Chen X., Abraham E., Sankaranarayanan S.* FLOW*: An Analyzer for Non-linear Hybrid Systems // Proceedings of the 25th International Conference on Computer Aided Verification. (Saint Petersburg, Russia, July 13–19, 2013), Springer-Verlag New York, Vol. 8044, p. 258–263.
51. *Rump S.M.* INTLAB – INTerval LABoratory. In Tibor Csendes, editor, Developments in Reliable Computing, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999, p. 77–104.
52. *Makino K., Berz M.* Rigorous Reachability Analysis and Domain Decomposition of Taylor Models // Numerical Software Verification 2017: conference proceedings. (Heidelberg, Germany, July 22–23, 2017). Springer International Publishing AG 2017, p. 90–97.
53. *Kletting M., Rauh A., Aschemann H., Hofer E.P.,* Consistency tests in guaranteed simulation of nonlinear uncertain systems with application to an activated sludge process // Computational and Applied Mathematics. Vol. 199. № 2. 2007. P. 213–219.
54. *Dobronets B.S.* On some two-sided methods for solving systems of ordinary differential equations // Interval Computation. 1992. Vol. 1. № 3. P. 6–19.
55. *Добронец Б.С., Рощина Е.Л.* Приложения интервального анализа чувствительности // Вычислительные технологии. Т. 7. № 1. 2002. С. 75–82.
56. *Некрасов С.А.* Эффективные двусторонние методы для решения задачи Коши в случае больших промежутков интегрирования // Дифференциальные уравнения. Т. 39. № 7. 2003. С. 969–973.
57. *Черноусько Ф. Л.* Оценивание фазовых состояний динамических систем. Метод эллипсоидов. М.: Наука,1988. 319 с.
58. *Kurzhanski A. B., Vdlyi I.* Ellipsoidal Calculus for Estimation and Control. SCFA. Boston, 1997.
59. *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.
60. *Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л., Гидаспов 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.
61. *Morozov A. Yu., Reviznikov D.L.* Modelling of dynamic systems with interval parameters on graphic processors // Программная инженерия. Т. 10. 2. 2019. С. 69–76.
62. *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.

63. *Пантелеев А.В., Скавинская Д.В.* Метаэвристические алгоритмы глобальной оптимизации М.: Вузовская книга. 2019 г., 332 с.
64. *Hansen E., Walster G.W.,* Global Optimization Using Interval Analysis. New York: Marcel Dekker, 2004.
65. *Panteleev A.V., Panovskiy V.N.* Interval methods of global constrained optimization. Interval Analysis: Introduction, Methods and Applications. Nova Science Publishers, Inc. 2017. с. 33–119.
66. *Пантелеев А.В., Пановский В.Н.* Обобщенный инверсный интервальный метод глобальной условной оптимизации // Научный вестник Московского государственного технического университета гражданской авиации. № 207. 2014. с. 17–24.
67. *Красников С.Д., Кузнецов Е.Б.* Метод прохождения точек бифуркации коразмерности три // Прикладная математика и механика (Ульяновск). № 9. 2011. с. 335–346.
68. *Кузнецов Е.Б., Леонов С.С.* Параметризация задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с предельными особыми точками // Журнал вычислительной математики и математической физики. Т. 57. № 6. 2017. С. 934–957
69. *Neher M.* Interval methods and Taylor model methods for ODEs // Workshop Taylor Model Methods VII, 14–17 december 2011 y. Florida. Abstracts. MSU 2011, P. 17.
70. *Makino K., Berz M.* Suppression of the wrapping effect by Taylor model – based validated integrators: MSU HEP Report 40910, 2003.
71. *Bünger F.* Shrink wrapping for Taylor models revisited // Numerical Algorithms. № 4. 2018. P. 1–18.

Modeling of dynamic systems with interval parameters. Review of methods and software tools

Morozov A.Yu.*
Federal Research Center Computer
Science and Control of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia
morozov@infway.ru

Reviznikov D.L.**
Federal Research Center Computer Science and Control
of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia
reviznikov@gmail.com

The paper provides a review of existing libraries and methods of modeling dynamic systems with interval parameters. Available software libraries AWA, VNODE-LP, COZY Infinity, RiOT, FlowStar, as well as the author's adaptive interpolation algorithm are considered. The traditional software for interval analysis gives guaranteed estimates of solutions, however, over time, these estimates become extremely significantly overstated. Due to the use of a fundamentally different approach to constructing solutions, the adaptive interpolation algorithm is not subject to the accumulation of errors, determines the boundaries of solutions with controlled accuracy, and works much faster than analogues.

Keywords: interval methods, dynamic systems with interval parameters, adaptive interpolation algorithm, libraries with methods, AWA, VNODE, COSY Infinity, RiOT, FlowStar, verifyode.

References

1. Pavlov B.M., Novikov M.D. Avtomatizirovannyj praktikum po nelinejnoj dinamike (sinergetike) [Automated workshop on nonlinear dynamics (synergetics)]. – Dialog MGU, VMK, 2000. – 115 p.

For citation:
Morozov A.Yu., Reviznikov D.L. Modeling of dynamic systems with interval parameters. Review of methods and software tools. *Modelirovanie i analiz dannykh = Modelling and Data Analysis,* 2019. no. 4, pp. 5–31. doi: 10.17759/mda.2019090401 (In Russ., abstr. in Engl.)

****Alexander Yu. Morozov,*** Ph.D. in Physics and Mathematics, Federal Research Center Computer Science and Control of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia; Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia. E-mail: morozov@infway.ru

*****Dmitry L. Reviznikov,*** Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia; Federal Research Center Computer Science and Control of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia. Email: reviznikov@gmail.com

2. Krasilnikov P.S. Prikladnye metody issledovaniya nelinejnyh kolebanij [Applied methods for studying nonlinear oscillations]. M. – Izhevsk: Institut komp'yuternyh issledovanij [Institute for Computer Research], 2015. – 528 p.
3. Rybakov K.A., Rybin V.V. Modelirovanie raspredelennyh i drobno-raspredelennyh processov i sistem upravleniya spektral'nym metodom [Modeling of distributed and fractionally distributed processes and spectral method control systems]. M.: Izd-vo MAI [Publishing House of the Moscow Aviation Institute], 2016. – 160 p.
4. Panteleev A.V., Rybakov K.A. Prikladnoj veroyatnostnyj analiz nelinejnyh sistem upravleniya spektral'nym metodom [Applied probabilistic analysis of nonlinear spectral method control systems]. M.: Izd-vo MAI-PRINT [Publishing house MAI-PRINT], 2010. – 160 p.
5. Arkhipov A.S., Semenikhin K.V. Garantirujushhee ocenivanie parametrov odnomernoj modeli dvizhenija po verojatnostnomu kriteriju pri nalichii unimodal'nyh pomeh [A guaranteeing estimation of the parameters of a one-dimensional motion model according to a probabilistic criterion in the presence of unimodal interference] // *Modelirovanie i analiz dannyh* [*Modeling and data analysis*]. 2019. No 2. Pp.31–38.
6. Sobol' I.M. Metod Monte-Karlo [Monte Carlo Method]. M.: Nauka, 1978.
7. Ermakov S.M., Mihajlov G.A. Statisticheskoe modelirovanie [Statistical Modeling]. M.: Nauka, 1982.
8. Kramer G. Matematicheskie metody statistiki [Mathematical Statistics Methods]. M.: Mir, 1975.
9. Zolotarev V.M. Obshchaya teoriya peremnozheniya nezavisimyh sluchajnyh velichin [General Theory of Multiplication of Independent Random] // *Doklady AN SSSR.* V. 142. № 4. 1962. Pp. 788–791.
10. Young R.C. The algebra of many-valued quantities // *Mathematische Annalen.* Vol. 104. 1931. P. 260–290.
11. Dwyer P.S. Linear Computations. New York: John Wiley & Sons, 1951.
12. Warmus M. Calculus of Approximations // *Bulletin de l'Academie Polonaise de Sciences.* Vol. 4. № 5. 1956. P. 253–259.
13. Sunaga T. Theory of an Interval Algebra and its Application to Numerical Analysis // RAAG Memoirs. Vol. 2. 1958. P. 547–564.
14. Moore R.E. Interval Analysis. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1966.
15. Lohner R.J., Enclosing the solutions of ordinary initial and boundary value problems // *Computer Arithmetic: Scientific Computation and Programming Languages.* 1987. P. 255–286.
16. Hansen E. Interval Arithmetic in Matrix Computations Part I // SIAM Journal on Numerical Analysis. Vol. 2, № 2. 1965. P. 308–320.
17. Alefel'd G., Hercberger YU. Vvedenie v interval'nye vychisleniya [Introduction to Interval Computing]. M.: Mir [World], 1987.
18. Krawczyk R. Newton-Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehlerschranken // Computing. Vol. 4. № 3. 1969. P. 187–201.
19. Nickel K. Über die Notwendigkeit einer Fehlerschranken-Arithmetic für Rechenautomaten // Numerische Mathematik. Vol. 9. № 1. 1966. P. 69–79.
20. Neumaier A. Interval Methods for Systems and Equations. Cambridge: Cambridge University Press, 1990.
21. Bradis V.M. Teoriya i praktika vychislenij. Posobie dlya vysshih pedagogicheskih uchebnyh zavedenij [Theory and practice of computing. Manual for higher pedagogical educational institutions]. M.: Uchpedgiz, 1937.

22. Kantorovich L.V. O nekotoryh novyh podhodah k vychislitel’nym metodam i obrabotke nablyudenij [About some new approaches to computational methods and processing of observations] // *Sibirskij matematicheskij zhurnal* [*Siberian Mathematical Journal*] V. 3. № 5. 1962. Pp. 701–709.
23. Kalmykov S.A., SHokin YU.I., YUldashev Z.H. Metody interval’nogo analiza [Interval Analysis Methods]. Novosibirsk: Nauka, 1986.
24. Shokin Yu.I. Interval’nyj analiz [Interval analysis]. M.: Nauka, 1981.
25. Dobronets B.S., Popova O.A. Chislennyj verojatnostnyj analiz neopredelennyh dannyh [Numerical probabilistic analysis of uncertain data]. *Krasnojarsk: Sib. feder. un-t* [*Krasnoyarsk: Siberian Federal University*], 2014. 168 p.
26. Dobronets B.S. Interval’naja matematika. [Interval math]. *Krasnojarsk: Krosnojar. gos. un-t* [*Krasnoyarsk: Krasnoyarsk State University*]. 2007.
27. Shary S.P. Konechnomernyj interval’nyj analiz [Finite dimensional interval analysis]. Novosibirsk: XYZ, 2017.
28. Rogalev A.N. Garantirovannye metody reshenija sistem obyknovennyh differencial’nyh uravnenij na osnove preobrazovanija simvol’nyh formul [Guaranteed methods for solving systems of ordinary differential equations based on the transformation of symbolic formulas] // *Vychislitel’nye tehnologii* [*Computational technologies*]. Vol. 8. No. 5. 2003. Pp. 102–116.
29. Rogalev A.N. Voprosy realizacii garantirovannyh metodov vkljuchenija vyzhivajushhih traektorij upravljaemyh sistem [Implementation issues on guaranteed methods for including surviving trajectories of controlled systems] // *Sibirskij zhurnal nauki i tehnologij* [*Siberian Science and Technology Journal*]. No. 2 (35). 2011. Pp. 54–58.
30. Rogalev A.N. Issledovanie i ocenka reshenij obyknovennyh differencial’nyh uravnenij interval’no-simvol’nymi metodami. [Research and evaluation of solutions of ordinary differential equations by interval-symbolic methods] // *Vychislitel’nye tehnologii* [*Computational technologies*]. Vol. 4. No. 4. 1999. Pp. 51–75.
31. Morozov A.Yu., Reviznikov D.L. Modifikacija metodov reshenija zadachi Koshi dlja sistem obyknovennyh differencial’nyh uravnenij s interval’nymi parametrami [Modification of methods for solving the Cauchy problem for systems of ordinary differential equations with interval parameters] // *Trudy MAI* [*Transactions of MAI*]. No. 89.2016. Pp. 1–20.
32. Eijgenraam P. The Solution of Initial Value Problems Using Interval Arithmetic: Formulation and Analysis of an Algorithm. Amsterdam : Mathematisch Centrum, 1981. P. 185.
33. Lohner R.J. Einschließung der Losung gewohnlicher Anfangs und Randwertaufgaben und Anwendungen. PhD thesis, Universitat Karlsruhe, 1988.
34. Nedialkov N.S., Jackson K.R., Pryce J.D. An effective high-order interval method for validating existence and uniqueness of the solution of an IVP for an ODE // Reliable Computing, Vol. 7. № 6. 2001. P. 449–465.
35. Stauning O. Automatic Validation of Numerical Solutions. PhD thesis, Technical University of Denmark, 1997.
36. Lin Y., Stadtherr M.A. Validated solutions of initial value problems for parametric ODEs. // Applied Numerical Mathematics. Vol 57. № 10. 2007. P. 1145–1162
37. Nedialkov N.S. VNODE-LP – a validated solver for initial value problems in ordinary differential equations. Technical Report CAS-06–06-NN, Department of Computing and Software, McMaster University, 2006.

38. Berz M., Makino K. Verified integration of ODEs and flows with differential algebraic methods on Taylor models // Reliable Computing. Vol. 4. № 4. 1998. P. 361–369.
39. Berz M., Makino K. Suppression of the wrapping effect by Taylor model-based verified integrators: long-term stabilization by shrink wrapping // Differential Equations and Applications. Vol. 10. № 4. 2005. P. 385–403.
40. Berz M., Makino K. Suppression of the wrapping effect by Taylor model-based verified integrators: long-term stabilization by preconditioning // Differential Equations and Applications. Vol. 10. № 4. 2005. P. 353–384.
41. Makino K., Berz M. Efficient control of the dependency problem based on Taylor model methods // Reliable Computing. Vol. 5. № 1. 1999. P. 3–12.
42. Makino K., Berz M. Taylor models and other validated functional inclusion methods // Pure and Applied Mathematics Vol. 4. № 4. 2003. P. 379–456.
43. Makino K., Berz M. Verified Computations Using Taylor Models and Their Applications // Numerical Software Verification 2017: conference proceedings. (Heidelberg, Germany, July 22–23, 2017). Springer International Publishing AG 2017. P. 3–13.
44. Neher M., Jackson K.R., Nedialkov N.S., On Taylor Model Based Integration of ODEs // SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 45. № 1. 2007. P. 236–262.
45. Nataraj P.S. V., Sondur S., The Extrapolated Taylor Model // Reliable Computing, Vol. 15. 2011. P. 251–278.
46. Pozin A.V. Obzor metodov i instrumental’nyh sredstv reshenija zadachi Koshi dlja ODU s garantirovannoj ocenkoj pogreshnosti [A review of methods and tools for solving the Cauchy problem for an ordinary differential equation with a guaranteed error estimate] // *Mezhdunarodnaja konferencija «Sovremennye problemy prikladnoj matematiki i mehaniki: teorija, jeksperiment i praktika»* [*International Conference “Modern Problems of Applied Mathematics and Mechanics: Theory, Experiment and Practice”*], May 30 – June 4, 2011, Novosibirsk Abstracts. Information and Computing Centre of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2011.
47. Berz M. COSY INFINITY version 8 reference manual. Technical Report MSUCL–1088, National Superconducting Cyclotron Lab., Michigan State Universitz, 1997.
48. Eble I. Über Taylor-Modelle: Dissertation zur erlangung des akademischen grades eines doktors der naturwissenschaften, Karlsruhe Institute of Technology, 2007.
49. Chen X., Sankaranarayanan S. Decomposed Reachability Analysis for Nonlinear Systems. // 2016 IEEE Real-Time Systems Symposium (RTSS): conference proceedings. (Porto, Portugal, 29 Nov.-2 Dec. 2016). P. 13–24.
50. Chen X., Abraham E., Sankaranarayanan S. FLOW*: An Analyzer for Non-linear Hybrid Systems // Proceedings of the 25th International Conference on Computer Aided Verification. (Saint Petersburg, Russia, July 13–19, 2013), Springer-Verlag New York, Vol. 8044, p. 258–263.
51. Rump S.M. INTLAB – INTerval LABoratory. In Tibor Csendes, editor, Developments in Reliable Computing, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999, p. 77–104.
52. Makino K., Berz M. Rigorous Reachability Analysis and Domain Decomposition of Taylor Models // Numerical Software Verification 2017: conference proceedings. (Heidelberg, Germany, July 22–23, 2017). Springer International Publishing AG 2017, p. 90–97.
53. Kletting M., Rauh A., Aschemann H., Hofer E.P., Consistency tests in guaranteed simulation of nonlinear uncertain systems with application to an activated sludge process // Computational and Applied Mathematics. Vol. 199. № 2. 2007. P. 213–219.

54. Dobronets B.S. On some two-sided methods for solving systems of ordinary differential equations // *Interval Computation.* 1992. Vol. 1. № 3. P. 6–19.
55. Dobronets B.S., Roshchina E.L. Prilozhenija interval'nogo analiza chuvstvitel'nosti. [Applications of interval sensitivity analysis] // *Vychislitel'nye tehnologii* [*Computational technologies*]. Vol. 7. Number 1. 2002. Pp. 75–82.
56. Nekrasov S.A. Efficient Two-Sided Methods for the Cauchy Problem in the Case of Large Integration Intervals // *Differential Equations,* 2003, V. 39, I. 7, Pp 1023–1027.
57. Chernousko F.L. Ocenivanie fazovyh sostojanij dinamicheskih sistem. [Estimation of phase states of dynamical systems]. *Metod jellipsoidov* [*Ellipsoid method*]. M.: Nauka, 1988. 319 p.
58. Kurzhanski A. B., Vdlyi I. Ellipsoidal Calculus for Estimation and Control. *SCFA. Boston,* 1997.
59. Morozov A.Yu., Reviznikov D.L. Adaptive interpolation algorithm based on a kd-tree for numerical integration of systems of ordinary differential equations with interval initial conditions. *Differential Equations,* 2018, Vol. 54, No. 7, p. 945–956.
60. Morozov A.Y., Reviznikov D.L., Gidaspov V.Y. Adaptive Interpolation Algorithm Based on a kd-Tree for the Problems of Chemical Kinetics with Interval Parameters // *Mathematical Models and Computer Simulations,* 2019, V. 11, I. 4, pp 622–633
61. Morozov A. Yu., Reviznikov D.L. Modelling of dynamic systems with interval parameters on graphic processors // *Programmnaja inzhenerija.* Vol. 10. No 2. 2019. Pp. 69–76.
62. Morozov A.Yu. Programma dlja chislennogo integrirovanija sistem obyknovennyh differencial'nyh uravnenij s interval'nymi nachal'nymi uslovijami [A program for the numerical integration of systems of ordinary differential equations with interval initial conditions] // *Svidetel'stvo o gosudarstvennoj registracii programmy dlja JeVM* [*Certificate of state registration of a computer program*] No. 2016464623 dated November 20, 2018
63. Panteleev A.V., Skavinskaja D.V. Metajevristicheskie algoritmy global'noj optimizacii [Global optimization metaheuristic algorithms] M.: Vuzovskaja kniga [University book]. 2019., 332 p.
64. Hansen E., Walster G.W., Global Optimization Using Interval Analysis. New York: Marcel Dekker, 2004.
65. Panteleev A.V., Panovskiy V.N. Interval methods of global constrained optimization. Interval Analysis: Introduction, Methods and Applications. *Nova Science Publishers, Inc.* 2017. pp. 33–119.
66. Panteleev A.V., Panovskij V.N. Obobshchennyj inversnyj interval'nyj metod global'noj uslovnoj optimizacii [Generalized inverse interval method of global conditional optimization] // *Nauchnyj vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta grazhdanskoj aviacii* [*Scientific Bulletin of Moscow State Technical University of Civil Aviation*]. № 207. 2014. Pp. 17–24.
67. Krasnikov S.D., Kuznecov E.B. Metod prohozhdeniya tochek bifurkacii korazmernosti tri [A method for traversing bifurcation points of codimension three] // *Prikladnaya matematika i mekhanika* (Ul'yanovsk) [*Applied Mathematics and Mechanics* (Ulyanovsk)]. № 9. 2011. s. 335–346.
68. Kuznecov E.B., Leonov S.S. Parametrization of the Cauchy problem for systems of ordinary differential equations with limiting singular points. Computational Mathematics and Mathematical Physics. V.57. Pp. 931–952.

69. Neher M. Interval methods and Taylor model methods for ODEs // *Workshop Taylor Model Methods VII,* 14–17 december 2011 y. Florida. Abstracts. MSU 2011, P. 17.
70. Makino K., Berz M.: Suppression of the wrapping effect by Taylor model – based validated integrators: MSU HEP Report 40910, 2003.
71. Bünger F. Shrink wrapping for Taylor models revisited // *Numerical Algorithms.* № 4. 2018. P. 1–18.