

MODERNÍ METODA TAYLOROVY ŘADY V NUMERICKÉ INTEGRACI: ČÁST I.

Jan CHALOUPKA¹, Gabriela NEČASOVÁ¹, Petr VEIGEND¹,
Jiří KUNOVSKÝ¹, Václav ŠÁTEK^{1,2}

¹ Vysoké učení technické v Brně, ²IT4Innovations, VŠB – Technická univerzita Ostrava

1 ÚVOD

Článek se zabývá řešením technických počátečních úloh (TPÚ), které slouží k reprezentaci běžných technických problémů především v mechanice a elektrotechnice. Aby bylo možné TPÚ řešit, je třeba získat numerické řešení soustavy obyčejných diferenciálních rovnic (ODR).

Nejpřesnější metoda pro zjištění následující hodnoty numerického řešení ODR [7]:

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad (1)$$

spočívá v konstrukci Taylorova polynomu ve tvaru

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(t_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} \cdot f'(t_n, y_n) + \dots + \frac{h^p}{p!} \cdot f^{(p-1)}(t_n, y_n), \quad (2)$$

kde h je velikost integračního kroku.

Výpočet ODR (vycházejících z TPÚ) pomocí Taylorovy řady lze velice efektivně implementovat (např. TKSL software [14]). Jedná se pak o numerickou metodu s proměnným řádem a velikostí integračního kroku. Moderní metoda Taylorovy řady (MMTŘ) je založena na rekurentním výpočtu členů Taylorovy řady pro každý krok numerické simulace [10]. Rekurentní přístup numerického výpočtu vlastních členů Taylorovy řady, řeší nutnost výpočtu vyšších derivací. Rovnice (2) může být zjednodušena na rovnici (3).

$$y_{n+1} = DY_0 + DY_1 + DY_2 + \dots + DY_p, \quad (3)$$

kde DY_i , $i = 0, 1, \dots, p$ značí členy Taylorovy řady.

Teoreticky je možné vyřešit soustavu homogenních diferenciálních rovnic s konstantními koeficienty s libovolným řádem (tj. použitím libovolného počtu členů Taylorovy řady) a s libovolnou přesností. Výsledná soustava lineárních rovnic může být efektivně řešena jak sériově, tak paralelně.

Důležitou částí metody je automatická volba velikosti řádu ($ORD = p$), tj. použití tolika členů Taylorovy řady, kolik je potřeba pro zvolenou přesnost. Je tedy běžné, že jsou během výpočtu použity různé počty členů Taylorovy řady. Efektivní implementaci MMTŘ lze nalézt v TKSL softwaru [14].

Článek je rozdělen do několika částí, které se zabývají konkrétními TPÚ a efektivním použitím MMTŘ. Část 2 se zabývá numerickým řešením parciální diferenciální rovnice (vlnová rovnice) s použitím prostorových aproximačních schémat vyšších řádů a časových aproximací pomocí MMTŘ. Část 3 se zabývá řešením vícenásobných integrálů pomocí převodu na soustavu ODR, která je poté efektivně a přesně řešena pomocí MMTŘ.

Implementací Taylorovy řady jako numerické metody s proměnným řádem a velikostí kroku se zabývá několik dalších článků např. TIDES software [3], který je využit v programovém prostředí Wolfram Mathematica [16]; dále TAYLOR [8], který obsahuje podrobný popis verze s proměnnou velikostí integračního kroku; zajímavé implementace Taylorovy řady nalezneme v ATOMF [6], COSY INFINITY [4], DAETS [13] a dalších. Řešení pomocí proměnného integračního kroku a řádu je rovněž popsáno v [2] a [1], kde jsou také uvedeny simulace na paralelním počítači.

2 VLNOVÁ ROVNICE

Vlnová rovnice (4) je důležitá hyperbolická parciální diferenciální rovnice (PDR) a často se využívá v mnoha technických úlohách (vibrace struny, elektrické obvody se střídavým proudem, elektromagnetismus, atd.).

$$\frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} \quad (4)$$

Nechť Ω je doména PDR definovaná jako $(x, t) = \langle 0, \pi \rangle \times \langle 0, t_{max} \rangle$, kde t_{max} je maximální simulační čas. Homogenní Dirichletovi počáteční podmínky na $\partial\Omega$ jsou definovány vztahem (5):

$$y(0, t) = 0, \quad y(\pi, t) = 0, \quad (5)$$

Dále definujeme Cauchyho počáteční podmínky:

$$y(x, 0) = \sin(x), \quad \frac{\partial y(x, 0)}{\partial t} = 0. \quad (6)$$

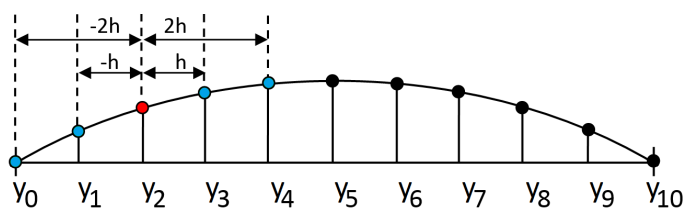
Vlnová rovnice popisuje vibrace ideální struny pevné délky. Struna je upevněna na obou koncích osy x , viz okrajové podmínky (5). Struna je uvolněna v čase $t = 0$, její počáteční rychlost je nulová. Jako model struny je použita funkce sinus. Analytické řešení má tvar:

$$y = \cos(\pi t) \sin(x). \quad (7)$$

Numerické metody pro řešení PDR jsou založeny na aproximaci derivací pomocí diferencí. Využijme metodu přímek k diskretizaci prostorové proměnné. Pomocí této metody je tedy PDR převedena na soustavu ODR, které mohou být následně vyřešeny pomocí MMTŘ s vysokou přesností [9, 15]. V následujícím textu bude ukázáno sestavení diferenčních vztahů pomocí členů Taylorovy řady pro pětibodovou prostorovou aproximaci.

2.1 Typy diferenčních vzorců

Centrální diferenční vzorec používá stejný počet bodů vlevo i vpravo od aktuálního bodu, ve kterém probíhá výpočet. Například pro výpočet derivací v bodě y_k se v případě pětibodové aproximace využívají body $y_{k-2}, y_{k-1}, y_k, y_{k+1}$ a y_{k+2} s velikostmi kroku $-2h_S, -h_S, h_S, 2h_S$ (viz Obr. 1, $y_k = y_2$). Označme l jako počet bodů vlevo od aktuálního bodu a r jako počet bodů vpravo od aktuálního bodu. Odpovídající nastavení je v tomto případě $l = 2$ a $r = 2$.



Obr. 1 Centrální diferenční vzorec pro $y_k = y_2$

Zdroj: vlastní vypracování

Sestrojíme Taylorovy řady (8), (9), (10) a (11) pro sousední body:

$$y_{k-2} = y_k + (-2h_S)y'_k + \frac{(-2h_S)^2}{2!}y''_k + \frac{(-2h_S)^3}{3!}y'''_k + \frac{(-2h_S)^4}{4!}y''''_k, \quad (8)$$

$$y_{k-1} = y_k + (-h_S)y'_k + \frac{(-h_S)^2}{2!}y''_k + \frac{(-h_S)^3}{3!}y'''_k + \frac{(-h_S)^4}{4!}y''''_k, \quad (9)$$

$$y_{k+1} = y_k + h_S y'_k + \frac{h_S^2}{2!}y''_k + \frac{h_S^3}{3!}y'''_k + \frac{h_S^4}{4!}y''''_k, \quad (10)$$

$$y_{k+2} = y_k + 2h_S y'_k + \frac{(2h_S)^2}{2!}y''_k + \frac{(2h_S)^3}{3!}y'''_k + \frac{(2h_S)^4}{4!}y''''_k. \quad (11)$$

Soustava rovnic může být vyjádřena maticovým zápisem (12). Dále získáme první čtyři členy Taylorovy řady pro bod y_k (označeny jako $DY1, DY2, DY3$ a $DY4$).

$$\begin{pmatrix} DY1 \\ DY2 \\ DY3 \\ DY4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & (-2)^2 & (-2)^3 & (-2)^4 \\ -1 & (-1)^2 & (-1)^3 & (-1)^4 \\ 1 & 1^2 & 1^3 & 1^4 \\ 2 & 2^2 & 2^3 & 2^4 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} y_{k-2} - y_k \\ y_{k-1} - y_k \\ y_{k+1} - y_k \\ y_{k+2} - y_k \end{pmatrix} \quad (12)$$

Dopředný diferenční vzorec používá pouze body vpravo od aktuálního bodu. Pro výpočet derivací v bodě y_k jsou použity body $y_{k+1}, y_{k+2}, y_{k+3}$ a y_{k+4} . Velikosti kroku jsou pouze kladné, tj. $h_S, 2h_S, 3h_S, 4h_S$. Nastavení pro pětibodovou aproximaci je $l = 0, r = 4$. Zpětný diferenční vzorec lze zkonstruovat obdobně, odpovídající nastavení je $l = 4, r = 0$. Další informace viz [9] a [11].

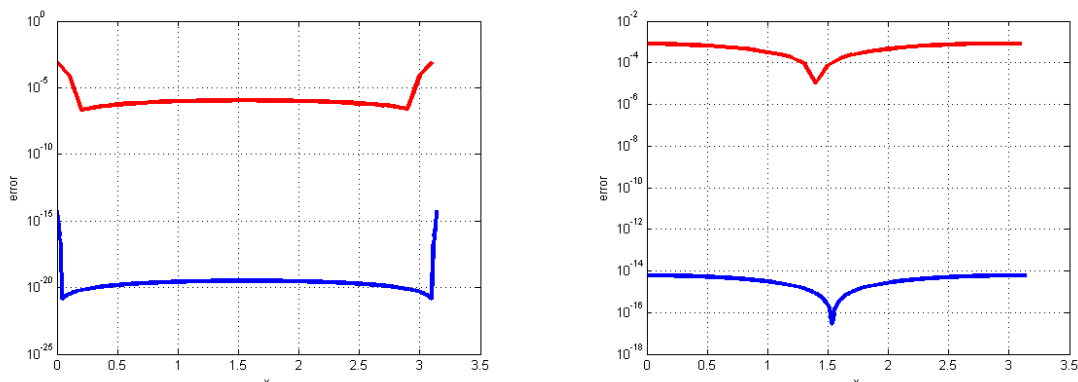
2.2 Přesnost výpočtu

Nejdříve je diskutována přesnost v prostorové a poté v časové doméně. Necht N značí řád diferenčního vztahu a S počet segmentů struny.

Přesnost aproximace v prostorové doméně ovlivňují dva parametry. Prvním je velikost kroku v prostoru h_S , druhým je řád diferenčního vztahu N .

Absolutní chyba mezi numerickým a analytickým řešením pro centrální vzorce v prostorové doméně je znázorněna v Obr. 2 (vlevo). Horní (červená) křivka ukazuje absolutní chybu pro $N = 5$ a $S = 32$ ($h_S = \pi/S$), kde h_S je velikost kroku v prostoru. Spodní (modrá) křivka vyjadřuje absolutní chybu pro $N = 9$ a $S = 315$ ($h_S = \pi/S$). Všimněme si, že průběhy těchto křivek zůstávají většinou konstantní. Větší rozdíly mezi analytickým a numerickým řešením se objevují na okraji prostorové domény, jsou způsobeny použitím asymetrickým diferenčních vztahů.

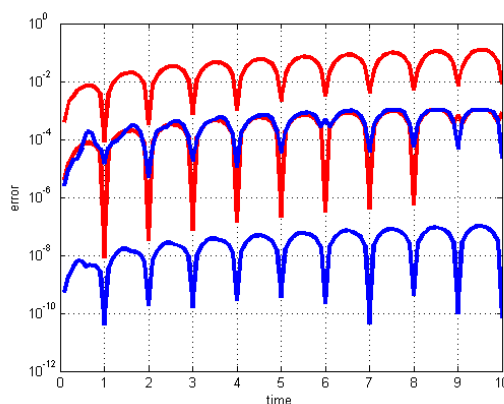
Absolutní chyba dopředných aproximačních vztahů je zobrazena v Obr. 2 (vpravo). Bylo použito stejné nastavení jako pro centrální aproximační vztahy.



Obr. 2 Absolutní chyba centrálních (vlevo) a dopředných (vpravo) diferenčních vztahů v prostorové doméně

Zdroj: vlastní vypracování

Absolutní chyba v časové doméně je poté zobrazena v Obr. 3. Poznamenejme, že při vyhodnocování absolutní chyby v čase byl vždy analyzován prostřední bod na struně, protože v tomto bodě je známo analytické řešení ($\cos(\pi t)$). Horní (červená) křivka ukazuje průběh absolutní chyby pro $N = 3$ a $S = 10$, spodní (červená) křivka ukazuje průběh absolutní chyby pro $N = 3$ a $S = 100$. Absolutní chybu lze snížit zvýšením řádu diferenčního vztahu. Horní (modrá) křivka ukazuje průběh absolutní chyby pro $N = 5$ a $S = 12$ a spodní (modrá) křivka pro $N = 5$ a $S = 100$.



Obr. 3 Absolutní chyba výpočtu v časové doméně

Zdroj: vlastní vypracování

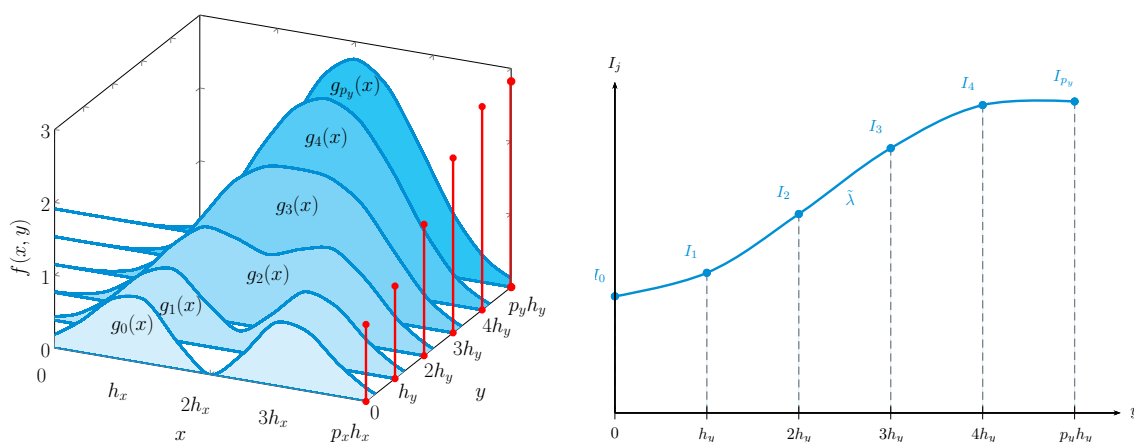
3 VÝPOČET VÍCENÁSOBNÝCH INTEGRÁLŮ

V této části článku je demonstrována transformace řešení určitého integrálu $F(x) = \int_A^B f(x) dx$ na obyčejnou diferenciální rovnici

$$F'(x) = f(x), \quad (13)$$

s počáteční podmínkou $F(A) = 0$.

Technická počáteční úloha (13) může být velmi efektivně vyřešena pomocí MMTŘ [5, 12].



Obr. 4 Vzorkované integrály jako nová funkce $I_j = \Psi(jh_y)$

Zdroj: vlastní vypracování

3.1 Vzorkované integrály

Nechť $I_j(x)$ je numerické řešení integrálu $\int_0^a f(x, jh_y) dx$ (všechny určité integrály mohou být převedeny na ekvivalentní integrály s nulovou dolní mezí) a p_y je počet vzorků

na ose y . Dvojitý integrál lze poté aproximovat posloupností aproximovaných hodnot jednoho určitého integrálu. Aproximace je provedena přesně pomocí MMTŘ (viz Obr. 4).

Použitím ψ (aproximované hodnotami I_0, I_1, \dots, I_{p_y}), lze aproximovat *dvojitý integrál*

$$\begin{aligned} e(h_y) &= e(0) + \sum_{m=1}^n \frac{\psi^{(m-1)}(0)}{m!} h_y^m \\ &\vdots \\ e(jh_y) &= e((j-1)h_y) + \sum_{m=1}^n \frac{\psi^{(m-1)}((j-1)h_y)}{m!} h_y^m \\ &\vdots \\ e(p_y h_y) &= e((p_y-1)h_y) + \sum_{m=1}^n \frac{\psi^{(m-1)}((p_y-1)h_y)}{m!} h_y^m. \end{aligned} \quad (14)$$

Jelikož nejsou známy derivace ψ , je nutno nyní zvolit jiný přístup. Sestrojíme následující soustavu:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (15)$$

$$\text{kde } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1^2 & \dots & 1^n \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ j & j^2 & \dots & j^n \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ n & n^2 & \dots & n^n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} I_1 - I_0 \\ \vdots \\ I_j - I_0 \\ \vdots \\ I_n - I_0 \end{pmatrix}, \quad \text{a} \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} D\psi(1, 0) \\ D\psi(2, 0) \\ \vdots \\ D\psi(j, 0) \\ \vdots \\ D\psi(n, 0) \end{pmatrix}.$$

Vyřešením vektoru \mathbf{x} získáme hodnoty $D\psi(j, 0)$, které jsou poté využity pro vyřešení $e(h_y)$ v rovnici (14). Zbývající členy $e(jh_y)$ lze vyřešit analogicky, matice \mathbf{A} zůstává stejná, mění se pouze vektor \mathbf{b} .

3.2 Vícenásobné integrály

Obecně lze vícenásobný integrál ve tvaru

$$\int_0^{a_n} \dots \int_0^{a_1} g(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n \quad (16)$$

řešit numericky obdobně, jako dvojitý integrál pomocí postupného snižování dimenze integrálu. Numerické derivace (obecně funkce f) jsou vypočítány analogicky ze vzorkovaných hodnot $f_{-l}, \dots, f_{-1}, f_0, f_1, \dots, f_r$ v daných časech $-lh, \dots, -h, 0, h, \dots, rh$, $n = r + l + 1$. S použitím Taylotových polynomů lze sestavit následující soustavu rovnic:

$$\forall i \in \{-l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, r - 1, r\} :$$

$$f_i = f_0 + \sum_{m=1}^n \frac{i^m h^m}{m!} f^{(m)}(0) \quad (17)$$

kteou lze vyjádřit pomocí matice a vypočítat derivace funkce a použít je pro snížení dimenze integrálu.

3.3 Integrace exponenciální funkce

Výše zmíněná metoda byla otestována na dvojitém integrálu exponenciální funkce, tj. $\int_0^2 \int_0^2 e^{x+y} dy dx$. Testy byly provedeny pro různé velikosti integračního kroku, počet členů Taylorovy řady a šířku použité aritmetiky. Přesnost je určena počtem bitů mantisy, která je použita pro reprezentaci čísel. Numerické řešení bylo porovnáno s analytickým řešením dvojitého integrálu. Chyby řešení jsou shrnuty v tabulce 1. Pro pevnou velikost integračního kroku a přesnost je uveden pouze počet členů Taylorovy řady s nejmenší chybou.

Tab. 1 Chyba výpočtu $\int_0^2 \int_0^2 e^{x+y} dy dx$

velikost kroku	počet členů (ORD)	přesnost [bits]	chyba
0.2	11	400	1.13e-06
0.1	19	400	8.95e-20
0.05	39	400	6.88e-52
0.04	49	400	9.14e-70
0.02	99	800	8.02e-170
0.01	104	900	8.09e-208
0.005	94	900	4.59e-217
0.004	91	900	4.13e-220
0.002	85	900	3.49e-227

Zdroj: vlastní vypracování

ZÁVĚR

MMTŘ a její implementace v TKSL poskytuje velmi přesné a stabilní řešení celé řady technických počátečních úloh. Následující článek (Část II.) bude zaměřen na efektivní paralelní implementaci a řešení tuhých systémů diferenciálních rovnic pomocí MMTŘ. Výzkum je zaměřen na konkrétní inženýrské problémy, jako je modelování elektrických obvodů, uzavřené systémy, mechanika tekutin apod.

PODĚKOVÁNÍ

Tento výzkum finančně podporuje Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy ČR z Národního programu udržitelnosti (NPU II), projekt "IT4Innovations excellence in science

- LQ1602". Článek také zahrnuje výsledky mezinárodního výzkumného projektu AKTION, číslo 76p11 a vnitřního projektu VUT FIT FIT-S-17-4014.

LITERATURA

1. R. Barrio. Performance of the Taylor series method for ODEs/DAEs. In *Applied Mathematics and Computation*, volume 163, pages 525–545, 2005. ISSN 00963003.
2. R. Barrio, F. Blesa, and M. Lara. VSVO Formulation of the Taylor Method for the Numerical Solution of ODEs. In *Computers and Mathematics with Applications*, volume 50, pages 93–111, 2005.
3. R. Barrio, M. Rodríguez, A. Abad, and F. Blesa. TIDES: A free software based on the Taylor series method. *Monografías de la Real Academia de Ciencias de Zaragoza*, 35:83–95, 2011.
4. M. Berz. COSY INFINITY version 8 reference manual. *Technical Report MSUCL-1088, National Superconducting Cyclotron Lab., Michigan State University, East Lansing, Mich.*, 1997.
5. J. Chaloupka, F. Kocina, P. Veigend, G. Nečasová, V. Šátek, and J. Kunovský. Multiple integral computations. In *14th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics*, 2016.
6. Y. F. Chang and G. Corliss. Atomf: solving odes and daes using Taylor series. *Computers Math. Applic.*, 28:209–233, 1994.
7. E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I. vol. Nonstiff Problems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1987. ISBN 3-540-56670-8.
8. A. Jorba and M. Zou. A software package for the numerical integration of ODE by means of high-order Taylor methods. In *Exp. Math.*, volume 14, pages 99–117, 2005.
9. Filip Kocina, Jiří Kunovský, Martin Marek, Gabriela Nečasová, Alexander Schirrer, and Václav Šátek. New trends in Taylor series based computations. In *12th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics*, number 1648. American Institute of Physics, 2014.
10. J. Kunovský. *Modern Taylor Series Method*. FEI-VUT Brno, 1994. Habilitation work.
11. Jiří Kunovský, Václav Šátek, Gabriela Nečasová, Petr Veigend, and Filip Kocina. The Positive Properties of Taylor Series Method. In *Proceedings of the 13th International Conference Informatics' 2015*, pages 156–160. Institute of Electrical and Electronics Engineers, 2015.
12. A. Martinkovičová, J. Chaloupka, J. Kunovský, V. Šátek, and P. Veigend. Numerical integration of multiple integrals using Taylor's polynomial. In *Proceedings of the 5th International Conference on Simulation and Modeling Methodologies, Technologies and Applications*, pages 163–171. SciTePress - Science and Technology Publications, 2015.

13. Nedialko S. Nedialkov and J. Pryce. Solving differential algebraic equations by Taylor series III. the DAETS code. *JNAIAM J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math.*, 3:61–80, 2008.
14. TKSL software. *High Performance Computing*, [cit. 21-3-2017]. URL: <http://www.fit.vutbr.cz/~kunovsky/TKSL/index.html.en> [online].
15. Václav Valenta, Gabriela Nečasová, Jiří Kunovský, Václav Šátek, and Filip Kocina. Adaptive solution of the wave equation. In *Proceedings of the 5th International Conference on Simulation and Modeling Methodologies, Technologies and Applications*, pages 154–162. SciTePress - Science and Technology Publications, 2015.
16. Wolfram. *MATHEMATICA software*, [cit. 21-3-2017].

MODERNÍ METODA TAYLOROVY ŘADY V NUMERICKÉ INTEGRACI

Abstrakt: Článek se zabývá přesným, stabilním a rychlým řešením soustav diferenciálních rovnic. Soustavou diferenciálních rovnic lze reprezentovat velké množství reálných problémů. Numerické řešení je založeno na unikátní numerické metodě, která netradičně využívá Taylorovu řadu. I přesto, že tato metoda není v literatuře příliš preferována, experimentální výpočty potvrdily, že přesnost a stabilita této metody přesahuje aktuálně používané numerické algoritmy pro numerické řešení diferenciálních rovnic. Moderní metoda Taylorovy řady je založena na rekurentním výpočtu členů Taylorovy řady v každém časovém intervalu. Derivace vyšších řádů nejsou pro výpočet přímo využity, derivace jsou zahrnuty do členů Taylorovy řady, které se počítají rekurentně numericky. Důležitou vlastností metody je automatická volba řádu metody v závislosti na velikosti integračního kroku, tzn. je využito tolik členů Taylorovy řady, kolik vyžaduje zadaná přesnost výpočtu. Cílem výzkumu je navrhnout velmi přesný, stabilní a rychlý nástroj pro modelování technických počátečních problémů využitých v praxi při modelování elektrických obvodů, mechaniky tuhých těles, problematiky zpětnovazebního řízení a další..

Klíčová slova: metoda Taylorovy řady; obyčejné diferenciální rovnice; technické počáteční úlohy.

MODERN TAYLOR SERIES METHOD IN NUMERICAL INTEGRATION

Abstract: The paper deals with extremely exact, stable, and fast numerical solutions of systems of differential equations. It also involves solutions of problems that can be reduced to solving a system of differential equations. The approach is based on an original mathematical method, which uses the Taylor series method for solving differential equations in a non-traditional way. Even though this method is not much preferred in the literature, experimental calculations have verified that the accuracy and stability of the Taylor series method exceed the currently used algorithms for numerically solving differential equations. The Modern Taylor Series Method (MTSM) is based on a recurrent calculation of the Taylor series terms for each time interval. Thus, the complicated calculation of higher order derivatives (much criticised in the literature) need not be performed but rather the value of each Taylor series term is numerically calculated. An important part of the method is an automatic integration order setting, i.e. using as many Taylor series terms as the defined accuracy requires. The aim of our research is to propose the extremely exact, stable, and fast numerical solver for modelling technical initial value problems that offers wide applications in many engineering areas including modelling of electrical circuits, mechanics of rigid bodies, control loop feedback (controllers), etc.

Keywords: Taylor series method; ordinary differential equations; technical initial value problems.



Projekt jest współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego oraz z budżetu państwa RP "Przekraczamy Granice"

Datum odeslání článku do redakce: 04.2017

Datum přijetí článku redakcí: 05.2017

Ing. Jan CHALOUPKA^(*); Ing. Gabriela NEČASOVÁ^(*); Ing. Petr VEIGEND^(*);

Doc. Ing. Jiří KUNOVSKÝ, CSc.^(*); Ing. Václav ŠÁTEK, Ph.D.^{(*),(**)},

^(*)Vysoké učení technické v Brně, Fakulta informačních technologií

Božetěchova 2, 612 66

Brno, Česká republika

email: ichaloupka@fit.vut.cz; inecasova@fit.vut.cz; iveigend@fit.vut.cz;

kunovsky@fit.vut.cz; satek@fit.vut.cz

^(**)IT4Innovations, VŠB – Technická univerzita Ostrava

17. listopadu 15/2172, 708 33

Ostrava-Poruba, Česká republika