C20

BATERÍA DE TESTS NUMÉRICOS PARA ECOSIMPRO

Autor: Luis Ordóñez Inda
Empresarios Agrupados A.I.E.
C/ Magallanes 3, 28015 Madrid
E-mail; loi@empre.es

Resumen

Análisis de una batería de tests numéricos realizados para EcosimPro, en el que se trata de probar la precisión del integrador, la bondad del detector de eventos y la posibilidad de resolver algunos casos especiales. Se incluye la descripción detallada de los tests más interesantes:
- Modelo de la suspensión de un coche.
- Circuito eléctrico amplificador
- Sistema de ecuaciones simple para detección de eventos
- Problema de mecánica celeste.

Palabras clave:
DASSL: Método de integración, desarrollado por Linda Petzold [1], que usa por defecto EcosimPro. Devuelve los valores de las variables en función del tiempo con una entrada de la forma:

$f(y,y',t) = 0$ (1)

RADAU5: Algoritmo de integración usado en la mayoría de las soluciones de referencia [2]. Devuelve los valores de las variables en función del tiempo con una entrada de la forma:

$Ay' = f(y,t)$ (2)

donde A es una matriz que puede ser singular.

High Index Wizard: Asistente que presenta EcosimPro para ayudar a resolver problemas de alto índice. En él hay que introducir las variables que, debido a las ligaduras, van a dejar de ser variables de estado. Nos ofrece siempre una solución por defecto.

1 INTRODUCCIÓN

Este trabajo tiene por objetivo comprobar que los resultados numéricos obtenidos en EcosimPro son buenos. Para ello se han se han seleccionado casos de tests numéricos que nos ayudarán a evaluar la precisión de estos resultados.

La batería consta de catorce tests, que se pueden clasificar en tres categorías. La primera incluye tests puramente numéricos, los cuales pretenden básicamente encontrar hasta qué decimal llega la precisión de EcosimPro. En una segunda categoría se encuentran tres tests especiales en los que se intenta hallar una manera de integrar las ecuaciones, bien sea mediante la adición de funciones especiales que, como veremos en el ejemplo 3.1, permiten integrar casos en principio singulares, o bien resolviendo problemas de alto índice, que en principio no admiten integración directa. En una tercera categoría se incluye una serie tests cuya mayor dificultad radica en la detección de eventos. A continuación se muestra una lista de los tests realizados:

<u>TESTS NUMÉRICOS:</u> En esta categoría nos encontramos los siguientes tests:
N1: Un típico problema predador-presa, en el que tenemos quince especies en interacción.
N2: Tres modelos de química, uno tratando la contaminación atmosférica, otro que analiza las reacciones en el interior de una planta, y un tercero que modela la fabricación de un compuesto a nivel industrial.
N3: Un problema de mecánica celeste.
N4: Un problema sacado de la física del estado sólido, en el que se analiza la dinámica de defectos en las paredes de una muestra de Litio, donde las ecuaciones diferenciales son análogas a las de un modelo predador-presa.

<u>TESTS ESPECIALES</u>: Esta segunda categoría comprende:
ES1: Dos problemas mecánicos. En estos tests la dificultad numérica no es tal, pero son problemas de alto índice.
ES2: Un problema eléctrico singular, que sólo se ha podido resolver mediante el añadido de una función especial. Este último y uno de los anteriores serán tratados en detalle.

<u>DETECCIÓN DE EVENTOS</u>: En este último apartado tenemos:
EV1: Un péndulo con constricción.
EV2: Un modelo de colisión entre esferas.
EV3: Un modelo eléctrico con interruptores.

EV4: Un sistema de ecuaciones simple con cambios repentinos en los datos.

2 TESTS NUMÉRICOS

Son los tests más precisos, desde el punto de vista de los resultados obtenidos. Como ya se ha comentado anteriormente, estos tests son, básicamente, sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden no lineales. EcosimPro no presenta ningún problema para integrarlos, y simplemente se trata de saber hasta qué decimal es fiable el resultado obtenido. La comparación está hecha con los resultados de RADAU5 [2]. Trataremos aparte el test de las pléyades, ya que los problemas de mecánica celeste son menos exactos que los demás. La figura 1 muestra, para los tests químicos, la evolución del error cometido con respecto a la referencia, calculado como la media de la dispersión cuadrática específica en cada una de las variables en función del valor de la tolerancia usado en EcosimPro. Es decir:

$$\overline{\sigma} = \frac{1}{N}\sum_{i}\left(\frac{y_i - y_{i,ref}}{y_{i,ref}}\right)^2 \qquad (3)$$

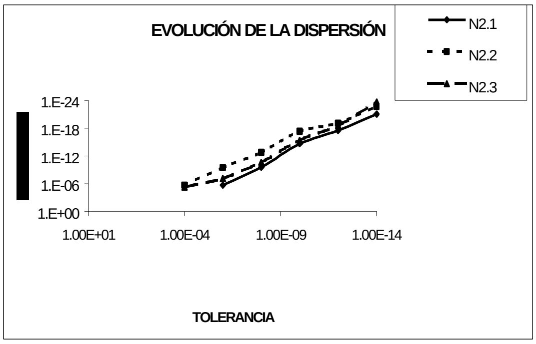

Figura 1

En ella se ve claramente que el error sigue una evolución análoga para los tres casos y que éste decrece con la tolerancia usada por DASSL, que se puede variar por medio de las variables **ABS_ERROR** y **REL_ERROR.**

La precisión alcanzada por EcosimPro se puede calcular a partir de la figura 1. Por ejemplo, para una tolerancia de 10^{-14}, tenemos, en el peor de los casos, una σ = 10^{-20}, por lo que el error relativo está en la décima cifra significativa.

3 TESTS ESPECIALES

Estos tests se caracterizan por la dificultad del sistema de ecuaciones, ya sea por la existencia de singularidades, o bien por que son problemas de alto índice. En cualquier caso la precisión obtenida es menor, aunque esto es debido a que no admiten valores muy bajos de la tolerancia.

Otra característica de estos tests es el tiempo que dura la integración, que es muy grande comparada con la duración de los tests numéricos.

La explicación de estas dos últimas afirmaciones es la aparición de lazos algebraicos, que hacen necesaria la iteración, lo que eleva mucho el tiempo de integración. La figura 2 muestra un gráfico análogo a la figura 1 para estos tests.

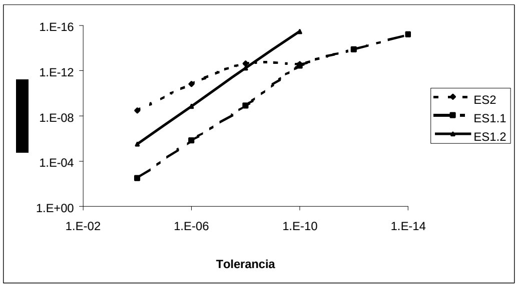

Figura 2

Si comparamos ambos gráficos, veremos que el error cometido es ligeramente superior en estos tests, que en los numéricos, exceptuando el caso de las pléyades. En este caso tenemos una precisión que llega hasta la octava cifra significativa.

3.1 TRANSISTOR

Este test trata de integrar las ecuaciones que se originan de un circuito como el de la figura 3.

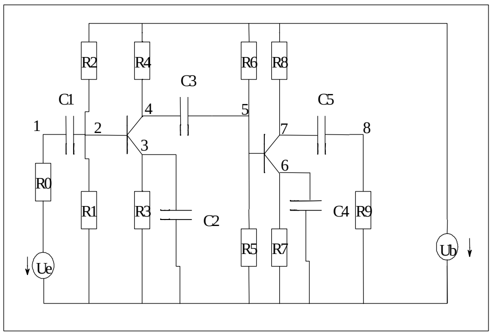

Figura 3. Circuito equivalente del transistor

El sistema de ecuaciones que se obtiene es singular, es decir, de la forma:

$$M \cdot \frac{dy}{dt} = f(y) \qquad (4)$$

Donde M es una matriz de dimensiones 8x8 y de rango cinco, e "y" es un vector de ocho componentes. Más concretamente:

$$M = \begin{pmatrix} -\mathbf{C_1} & \mathbf{C_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{C_1} & -\mathbf{C_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{C_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathbf{C_3} & \mathbf{C_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{C_3} & -\mathbf{C_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathbf{C_4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathbf{C_5} & \mathbf{C_5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{C_{51}} & -\mathbf{C_5} \end{pmatrix}$$

El problema está preparado para que lo integre RADAU5. DASSL lo puede integrar, pero EcosimPro detectará un sistema de ecuaciones lineales y, por comodidad, intentará invertir la matriz, cosa que evidentemente no puede hacer. Por tanto, es necesario introducir alguna modificación que haga que EcosimPro no detecte que el sistema es lineal. En este caso es suficiente definir una función DIF, que simplemente reste sus dos argumentos. La sintaxis en EL es la siguiente:

```
FUNCTION REAL DIF (
        IN REAL V1,
        IN REAL V2)
BODY
        RETURN V1-V2
END FUNCTION
```

Ahora podremos escribir las ecuaciones de la primera caja, por ejemplo, de la siguiente manera:

$DIF(y_2,y_1) = f_1(y, t)$ (5)
$DIF(y_1,y_2) = f_2(y, t)$ (6)

Este procedimiento no es general para resolver este tipo de sistemas, pero siempre se podrá hacer algo similar, adaptándose a cada caso particular.

3.2 SUSPENSIÓN DE UN COCHE

Este test trata un modelo sencillo para la suspensión de un coche, como muestra la figura 4.

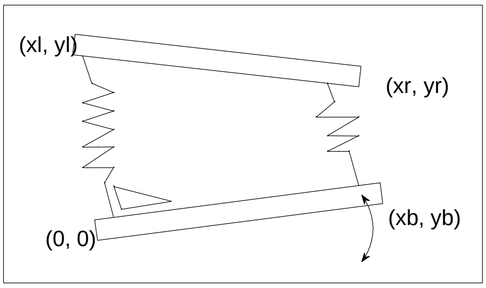

Figura 4. Modelo de suspensión de un coche

Las ecuaciones de movimiento, con las restricciones correspondientes, son las siguientes:

$$\frac{\varepsilon^2 M}{2}\frac{d^2\overline{x_l}}{dt^2} = (l_0 - |\overline{x_l}|)\frac{\overline{x_l}}{|\overline{x_l}|} + \lambda_1\overline{x_b} + 2\lambda_2(\overline{x_l} - \overline{x_r}) - \frac{\varepsilon^2 M}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\frac{\varepsilon^2 M}{2}\frac{d^2\overline{x_r}}{dt^2} = (l_0 - |\overline{x_r} - \overline{x_b}|)\frac{\overline{x_r} - \overline{x_b}}{|\overline{x_r} - \overline{x_b}|} - 2\lambda_2(\overline{x_l} - \overline{x_r}) - \frac{\varepsilon^2 M}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \quad (8)$$

$$x_b^2 + y_b^2 = 1 \quad (9)$$

$$(x_l - x_r)^2 + (y_l - y_r)^2 = 1 \quad (10)$$

$$x_l x_b + y_l y_b = 0 \quad (11)$$

Las ecuaciones (7)-(11) son de segundo orden. La ventaja que presenta EcosimPro es que admite ecuaciones de segundo orden, que ya se encargará de reducir de orden para que DASSL las integre, mientras que RADAU5 y otros muchos integradores necesitan que la reducción del orden se haga anteriormente.
Este sistema presenta un problema de alto índice, en el que EcosimPro nos dará ayuda para resolver las ecuaciones. El test se supera con facilidad observando la física del problema. El método consiste en detectar los grados de libertad del problema y encontrar variables que los reproduzcan.
Ya sólo quedará introducir en el *"High Index Wizard"* las demás variables, que EcosimPro ya no tomará como variables de estado. En el caso que nos preocupa, es fácil ver, observando la figura 4, que el problema no tiene más que dos grados de libertad. Tres ángulos determinan la posición de las dos barras y el estiramiento de los muelles: los dos que forman las barras con la horizontal, y el que forma el muelle de la derecha con la vertical, ya que el muelle de la izquierda está obligado a formar ángulo recto con la barra de abajo. Uno de ellos lo determina la excitación que produce la carretera, que supondremos sinusoidal para simular los baches, por lo que efectivamente sólo tenemos dos ángulos. Luego se pueden escoger las variables y_l e y_r como variables reales de estado. Esta elección ha de ser tomada con cuidado ya que es fundamental conocer las buenas variables de estado para resolver este tipo de problemas.
Otra manera de resolver el problema es estudiando la forma de las ecuaciones (7) - (11). Este procedimiento lo hace la propia herramienta, pero no siempre llega al resultado correcto, especialmente cuando las ecuaciones son complicadas, ya que la forma de éstas no es suficientemente indicativa.

4 DETECCIÓN DE EVENTOS

Estos tests se caracterizan no tanto por la precisión del resultado final, sino por la exactitud en la medida del tiempo en el que ocurren los eventos. El ejemplo más clarificador es un sistema de dos ecuaciones diferenciales sencillo, en el que los valores de los datos cambian según el sistema se encuentre en un estado o en otro:

$y_1' = c_1 (y_2 + c_2 - y_1)$ (12)
$y_2' = c_3 (c_4 - y_2)$ (13)

Los valores de las constantes c_1y c_3 son fijos:
$c_1 = 2.7E6$; $c_3 = 3.5651205$
Los valores de c_2y c_4 dependen del estado en que se encuentre el sistema:

Estado1: $c_2 = 0.4$; $c_4 = 5.5$
Estado2: $c_2 = -0.3$; $c_4 = 2.73$

Los dos estados dan una solución exponencial para ambas variables, pero en el estado 1 la solución para y_1 es creciente y en el estado 2 la solución es decreciente. Al alcanzar y_1 cierta cota superior, el estado cambia. Ahora la solución es decreciente y el cambio de estado se da cuando y_1 alcanza una cota mínima. La evolución se puede observar en la figura 5.

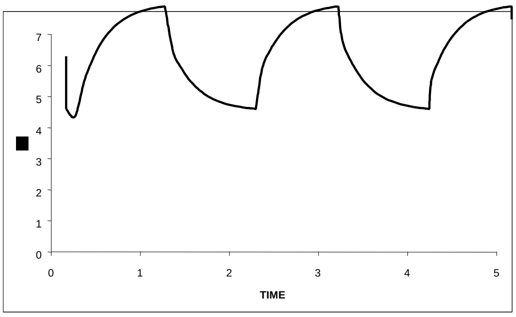

Figura 5

La dificultad de este test radica en que la ultima discontinuidad se produce prácticamente al final del intervalo de integración, y una mala localización del evento puede llevar a valores finales de y_1 muy diferentes de la referencia. El problema tiene solución analítica [3]:

$y(5) \approx 5.369$ (14)
tiempo $\approx$ 4.999999646 (15)

En la tabla 1 se muestra el tiempo en el que se localiza la última discontinuidad, en función de la tolerancia.

Tabla 1. Tiempo de discontinuidad

Tolerancia	Tiempo(s)
1e-6	4.9999996619500
1e-8	4.9999996464032
1e-10	4.9999996462670
1e-12	4.9999996462643
1e-14	4.9999996462705

Los valores finales de la variable y_1 se encuentran en la tabla 2.

Tabla 2. Valores finales de y_1

Tolerancia	$y_1(5)$
1e-6	5.3809963055899
1e-8	5.3694451321339
1e-10	5.3693460753435
1e-12	5.3693441563171
1e-14	5.3693486655019

Como se ha comentado anteriormente, un error relativo del orden de 10^{-8} en la determinación del tiempo en el que ocurre el último evento, arroja, en el resultado final, un error relativo del orden de 10^{-2}.
En cualquier caso, se tienen resultados muy precisos, y el valor correcto se alcanza con una tolerancia de 1e-8, que es relativamente alta.
Cabe señalar que la tolerancia de la que se habla en este test no es la misma de la que hemos tratado anteriormente. Mientras que en el resto de tests la tolerancia mencionada es la que nos pide DASSL, que para este problema se ha fijado en un valor de 10^{-13}, en este caso la tolerancia es la de la sentencia WHEN, que es el que interviene en la detección de eventos. Esta tolerancia se encuentra fijada en 10^{-6} por defecto, pero se puede modificar en el componente.
A continuación se muestra un listado del componente realizado para resolver el problema:

```
COMPONENT Two_state
DATA
  REAL C1 = 2.7e6
  REAL C3 = 3.5651205
  REAL y1_o = 5.8
  REAL y2_o = 2.5
  REAL C21 = 0.4
  REAL C41 = 5.5
  REAL C22 = -0.3
  REAL C42 = 2.73
DECLS
  REAL y1, y2
  REAL C2, C4
INIT
  C2 = C21
  C4 = C41
DISCRETE
   WHEN ( y1 == y1_o) TOL 1e-8 THEN
     C2 = C22
     C4 = C42
   END WHEN
   WHEN ( y1 == y2_o) TOL 1e-8 THEN
     C2 = C21
     C4 = C41
   END WHEN
CONTINUOUS
  y1' = C1 * (y2 + C2 - y1)
  y2' = C3 * (C4 - y2)
END COMPONENT
```

El resto de tests de este tipo arrojan resultados cualitativamente buenos, pero las referencias no son tan exactas, y no permiten una comparación exhaustiva.

5 PROBLEMA DE LAS PLÉYADES

Uno de los tests más interesantes que se han realizado trata un problema de mecánica celeste reducido a un plano. Simula el movimiento de siete cuerpos en interacción gravitatoria la cual, como es bien sabido, da muchos problemas a la hora de integrar. Esto se explica en parte por la forma de las ecuaciones:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} \frac{m_i m_j (r_i - r_j)}{\left| r_i - r_j \right|^3} \qquad i = 1,\ldots,7 \qquad (16)$$

De nuevo cabe resaltar que EcosimPro no necesitará reducir el orden del sistema de ecuaciones, a diferencia de otros algoritmos integradores. Además nos permite escribir las ecuaciones de manera compacta, como muestra el código EL de este componente:

```
COMPONENT PLEIADES
DATA
   REAL  m[7] = {1, 2, 3, 4, 5, 6, 7}
DECLS
  REAL   x[7]
  REAL   y[7]
  REAL   r[7,7]
CONTINUOUS
  EXPAND_BLOCK(i IN 1,7)
    EXPAND (j IN 1,7)
      r[i,j] = ((x[i] - x[j])**2 + (y[i] - y[j])**2)**1.5
        x[i]'' = SUM(j IN 1,7 EXCEPT i ; m[j] * (x[j] - x[i]) / r[i,j])
        y[i]'' = SUM(j IN 1,7 EXCEPT i ; m[j] * (y[j] - y[i]) / r[i,j])
  END EXPAND_BLOCK
END COMPONENT
```

Si ocurre que las estrellas sufren cuasi-colisiones, es decir, que se acerquen mucho entre ellas, un pequeño error en el cálculo de la distancia entre ellas, puede provocar un gran error en el resultado final, debido a la aparición del término r_{ij}^3 en el denominador de laa ecuaciones (16). Podemos ver que efectivamente ocurren estas colisiones, observando la figura 6, en la que se representa la evolución de la posición de dos de ellas durante el tiempo de integración:

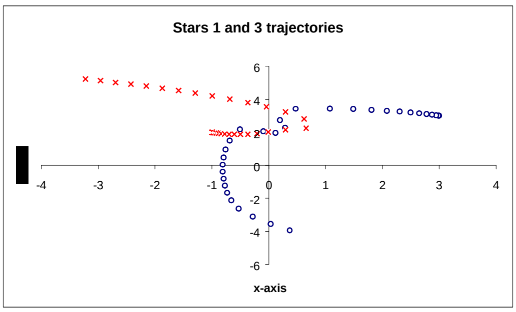

Figura 6. Movimiento de dos estrellas

Este acercamiento entre estrellas es el que provoca los grandes errores cometidos para tolerancias altas.
En cualquier caso, para valores bajos de la tolerancia se mejora mucho la precisión.
La figura 7 representa la evolución del error cometido, calculando mediante la ecuación (3), en función de la tolerancia introducida en DASSL.

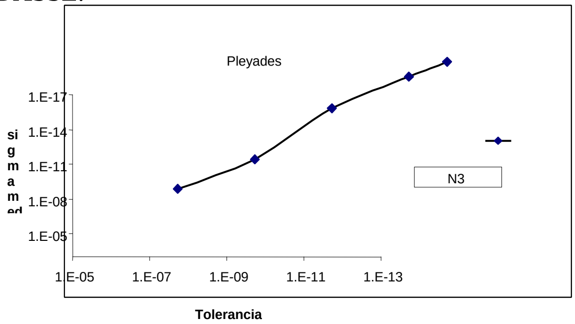

Figura 7. Problema de las pléyades

Como se puede deducir comparando los resultados con los presentados en la figura 1, la evolución del error cometido es similar, pero los valores están seis órdenes de magnitud por encima de los anteriores. En cualquier caso, bajando la tolerancia se obtienen resultados con precisión suficientemente alta, que llega hasta la octava cifra significativa.

6 CONCLUSIONES

A modo de conclusión, se pueden señalar varios puntos importantes:
- Los resultados numéricos obtenidos por EcosimPro son muy precisos.
- La respuesta ante problemas singulares o de alto índice es buena en el sentido en que EcosimPro permite tratar estos problemas, aunque para resolverlos se necesita el conocimiento del modelo por parte del usuario.
- La detección de eventos es muy buena, y no requiere tolerancias muy bajas para obtener resultados precisos.

7 REFERENCIAS

[Ref. 1] *L.R. Petzold, "A description of DASSL: A Differential/Algebraic System Solver" SAN82-8637, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, January 1984*

[Ref. 2] *"Test set for Initial Value Problems"* www.cwi.nl/cwi/projects/IVPtestset/index.htm

[Ref. 3] *"EUROSIM Software Comparison"* http://eurosim.tuwien.ac.at/comparisons/comp_text.html