

Новый композиционный метод решения ОДУ на основе полуявного интегрирования

А. А. Терентьев¹, Д. Н. Бутусов², П. С. Федосеев³

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

Санкт-Петербург, Россия

¹arter2011@gmail.com, ²dnbutusov@etu.ru, ³psfedoseev@etu.ru

Аннотация. Композиционные полуявные методы интегрирования являются эффективным инструментом для получения численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений. В работе исследована применимость полуявных схем к решению задач моделирования биологических нейронов, а также предложен новый способ численного решения дифференциальных уравнений на основе композиции трех сопряженных полуявных методов. Предлагаемый новый подход использует принцип предварительной коррекции решения на одном шаге интегрирования за счет обратимости опорного метода. Приводится математическое описание и доказательство порядка предложенного метода. Дана сравнительная оценка вычислительной эффективности полуявных методов с известными решателями: методом явной средней точки, методом Рунге–Кутты второго порядка, методом неявной средней точки и методом Паде. На примере модели нейрона Хиндмарша–Роуза показано, что полуявные алгоритмы численного решения ОДУ эффективны при моделировании моделей биологических нейронов.

Ключевые слова: полуявные методы; композиционные методы; обыкновенные дифференциальные уравнения; модель Хиндмарша–Роуза

I. ВВЕДЕНИЕ

Численное моделирование систем обыкновенных дифференциальных уравнений используется во многих задачах, в том числе для моделирования нейронной активности. За последнее время разработано множество новых численных методов, обладающих повышенной производительностью, численной устойчивостью, сохраняющих геометрические свойства моделируемой системы на длительных интервалах [1, 2]. Одним из наиболее перспективных классов методов численного интегрирования являются полуявные алгоритмы, предлагающие своего рода «золотую середину» между высокой численной устойчивостью неявных методов и высокой производительностью явных решателей.

В нашем исследовании мы предлагаем новый полуявный метод второго порядка алгебраической точности с предварительной коррекцией решения. Метод имеет три обращения к правой части моделируемой системы, из которых две относятся к предварительной коррекции решения на шаге, и одна используется для

расчета решения. Для оценки свойств предлагаемого метода проведено сравнение вычислительной эффективности нового и известных полуявных методов с популярными решателями ОДУ второго порядка: методом явной средней точки, методом Рунге–Кутты второго порядка, методом неявной средней точки и нелинейным методом Паде.

Статья структурирована следующим образом. В разделе II описана модель Хиндмарша–Роуза и даны пояснения по ее динамике. В разделе III рассматриваются полуявные схемы численного интегрирования, дано аналитическое доказательство порядка нового метода. В разделе IV приводится псевдокод полуявных методов для выбранной тестовой задачи, а также производится сравнительная оценка вычислительной эффективности методов. В разделе V сделаны выводы по результатам исследования.

II. МОДЕЛЬ ХИНДМАРША–РОУЗА

Система Хиндмарша–Роуза представляет собой математическую модель биологического нейрона и описывается нелинейной системой дифференциальных уравнений 3-го порядка [3]:

$$\begin{cases} \dot{x} = y - ax^3 + bx^2 - z + I \\ \dot{y} = c - dx^2 - y \\ \dot{z} = r(s(x - \alpha) - z) \end{cases} \quad (1)$$

где $x(t)$ описывает динамику мембранного потенциала нейрона, а переменные $y(t)$ и $z(t)$ – калий-натриевый насос.

Поскольку скорость изменения переменной $z(t)$ определяется малым параметром $0 < r \ll 1$, то $z(t)$ описывает динамику медленного калиевого тока, а $y(t)$ быстрого натриевого тока. Внешнее воздействие на нейрон определяется переменной $I(t)$ [4].

Благодаря третьему уравнению модель учитывает изменение частоты возбуждения нейрона. При правильном выборе параметров s и r модель Хиндмарша–Роуза корректно моделирует поведение биологических нейронов в пределах описываемых ей электрохимических процессов, включая берстинг, хаотические режимы осцилляций и пост-ингибиторное восстановление [5].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №19-71-00087

III. ПОЛУЯВНЫЕ МЕТОДЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Рассмотрим задачу Коши второго порядка, записанную в скалярной форме:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = f_1(x_1, x_2, t) \\ \dot{x}_2 = f_2(x_1, x_2, t) \end{cases} \quad (2)$$

с начальными условиями $x_1(0) = x_1^0, x_2(0) = x_2^0$.

Полужавный метод Эйлера для системы (2) имеет следующий вид [2]:

$$\begin{aligned} x_1^{n+1} &= x_1^n + hf_1(x_1^n, x_2^n, t_n) \\ x_2^{n+1} &= x_2^n + hf_2(x_1^{n+1}, x_2^{n+1}, t_n) \end{aligned} \quad (3)$$

Для метода (3) можно записать сопряженный к нему метод:

$$\begin{aligned} x_2^{n+1} &= x_2^n + hf_2(x_1^{n+1}, x_2^{n+1}, t_n) \\ x_1^{n+1} &= x_1^n + hf_1(x_1^n, x_2^n, t_n) \end{aligned} \quad (4)$$

Последовательная композиция (3) и (4) с половинным шагом дает симметричный метод второго порядка CD (composition diagonally implicit) [1,6].

Предлагаемый метод PCSE (pre-corrected semi-explicit method) основывается на последовательной композиции двух методов (3) с шагами $h/\sqrt{2}$; $-h/\sqrt{2}$ и метода (4) с шагом h . Получаемый в результате такой композиции метод обладает вторым порядком алгебраической точности.

Доказательство порядка. Рассмотрим разложение исходной системы (2) в ряд Тейлора по обеим переменным:

$$x_1^{n+1} = x_1^n + hf_1^n + \frac{h^2}{2}(f_{11}^n f_1^n + f_{12}^n f_2^n + f_{1r}^n) + O(h^3)$$

$$x_2^{n+1} = x_2^n + hf_2^n + \frac{h^2}{2}(f_{21}^n f_1^n + f_{22}^n f_2^n + f_{2r}^n) + O(h^3)$$

$$f_1^n = f_1(x_1^n, x_2^n, t_n)$$

$$f_{12}^n = \frac{df_1^n}{dx_2}$$

$$f_{1r}^n = \frac{df_1^n}{dt}$$

Применим к системе (2) метод PCSE и вычислим его разложение на шаге:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$x_1^{n+\alpha} = x_1^n + \alpha hf_1^n$$

$$\begin{aligned} x_2^{n+\alpha} &= x_2^n + \alpha hf_2^n(x_1^n + \alpha hf_1^n, x_2^n + \alpha hf_2^n + O(h^2), t_n + \alpha h) = \\ &= x_2^n + \alpha h(f_2^n + \alpha h(f_{21}^n f_1^n + f_{22}^n f_2^n + f_{2r}^n)) + O(h^3) = \\ &= x_2^n + \alpha hf_2^n + \alpha^2 h^2(f_{21}^n f_1^n + f_{22}^n f_2^n + f_{2r}^n) + O(h^3) \end{aligned}$$

$$x_1^{\tilde{n}} = x_1^{n+\alpha} - \alpha hf_1^{n+\alpha}$$

$$\begin{aligned} x_2^{\tilde{n}} &= x_2^{n+\alpha} - \alpha hf_2(x_1^{n+\alpha} - \alpha hf_1^{n+\alpha}, x_2^n - \alpha hf_2^{n+\alpha} + O(h^2), t_{n+\alpha} - \alpha h) = \\ &= x_2^{n+\alpha} - \alpha h(f_2^{n+\alpha} - \alpha h(f_{21}^n f_1^{n+\alpha} + f_{22}^n f_2^{n+\alpha} + f_{2r}^{n+\alpha})) + O(h^3) = \\ &= x_2^{n+\alpha} - \alpha hf_2^{n+\alpha} - \alpha^2 h^2(f_{21}^n f_1^{n+\alpha} + f_{22}^n f_2^{n+\alpha} + f_{2r}^{n+\alpha}) + O(h^3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_2^{n+1} &= x_2^{\tilde{n}} + hf_2^{\tilde{n}} = \\ &= x_2^{\tilde{n}} + hf_2(x_1^{\tilde{n}} - \alpha hf_1^{n+\alpha}, x_2^n - \alpha hf_2^{n+\alpha} + O(h^2), t_{n+\alpha} - \alpha h) = \\ &= x_2^{\tilde{n}} + [hf_2^{n+\alpha} - \alpha h^2(f_{21}^n f_1^{n+\alpha} + f_{22}^n f_2^{n+\alpha} + f_{2r}^{n+\alpha})] + O(h^3) = \\ &= x_2^{n+\alpha} + [(h - \alpha h)f_2^{n+\alpha} + (\alpha^2 h^2 - \alpha h^2)(f_{21}^n f_1^{n+\alpha} + \\ &+ f_{22}^n f_2^{n+\alpha} + f_{2r}^{n+\alpha})] + O(h^3) = \\ &= \{x_2^n + \alpha^2 h^2(f_{21}^n f_1^n + f_{22}^n f_2^n + f_{2r}^n) + \alpha hf_2^n\} + [\dots] + O(h^3) = \\ &= \{\dots\} + [(h - \alpha h)(f_2^n + \alpha h(f_{21}^n f_1^n + f_{22}^n f_2^n + f_{2r}^n)) + \\ &+ (\alpha^2 h^2 - \alpha h^2)(f_{21}^n f_1^n + f_{22}^n f_2^n + f_{2r}^n) + O(h)] = \\ &= \{\dots\} + [(h - \alpha h)f_2^n] + O(h^3) = \\ &= x_2^n + hf_2^n + \alpha^2 h^2(f_{21}^n f_1^n + f_{22}^n f_2^n + f_{2r}^n) + O(h^3). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_1^{n+1} &= x_1^{\tilde{n}} + h[f_1^{\tilde{n}}(x_1^{\tilde{n}} + hf_1^{\tilde{n}} + O(h^2), x_2^{\tilde{n}} + hf_2^{\tilde{n}}, t_n + h)] = \\ &= x_1^n + \alpha hf_1^n - \alpha hf_1^{n+\alpha} + h[f_1^{\tilde{n}} + h(f_{11}^n f_1^{\tilde{n}} + f_{12}^n f_2^{\tilde{n}} + f_{1r}^{\tilde{n}})] = \\ &= x_1^n + \alpha hf_1^n - \alpha h(f_1^n + \alpha h(f_{11}^n f_1^n + f_{12}^n f_2^n + f_{1r}^n)) + \\ &+ h[f_1^n + h(f_{11}^n f_1^n + f_{12}^n f_2^n + f_{1r}^n)] + O(h^3) = \\ &= x_1^n + hf_1^n + \frac{h^2}{2}(f_{11}^n f_1^n + f_{12}^n f_2^n + f_{1r}^n) + O(h^3). \end{aligned}$$

Полученные значения переменных состояния на шаге совпадают с разложением системы (2) в ряд Тейлора с точностью до $O(h^3)$. Таким образом, доказано, что метод имеет третий порядок локальной погрешности и второй порядок глобальной погрешности. Стоит отметить, что несмотря на ожидаемо большие вычислительные затраты, метод PCSE представляет собой алгоритм, открывающий потенциальные возможности для введения коррекции в многоступенчатые методы за счет возврата на первых двух стадиях в точку начальных условий, скорректированную относительно погрешности сопряженного метода.

IV. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Запишем алгоритмы решения системы (1) методами CD и PCSE. В работе [7] показано, что неявное вычисление диагонали можно заменить методом простых итераций. Получаемый в результате метод решения системы (1) выглядит следующим образом:

$$x_1^{n+1/2} = x_1^n + \frac{h}{2}(x_2^n - \alpha(x_1^n)^3 + b(x_1^n)^2 - x_3^n + I)$$

$$\begin{aligned}
x_1^{n+1/2} &= x_1^n + \frac{h}{2}(x_2^n - \alpha(x_1^{n+1/2})^3 + b(x_1^{n+1/2})^2 - x_3^n + I) \\
x_2^{n+1/2} &= \frac{x_2^n + \frac{h}{2}(c - d(x_1^{n+1/2})^2)}{1 + h/2} \\
x_3^{n+1/2} &= \frac{x_3^n + \frac{h}{2}(rs(x_1^{n+1/2}) - \alpha)}{1 + rh/2} \\
x_3^{n+1} &= x_3^{n+1/2} + \frac{h}{2}(r(s(x_1^{n+1/2}) - \alpha) - x_3^{n+1/2}) \\
x_2^{n+1} &= x_2^{n+1/2} + \frac{h}{2}(c - d(x_1^{n+1/2})^2 - x_2^{n+1/2}) \\
x_1^{n+1} &= x_1^{n+1/2} + \frac{h}{2}(x_2^{n+1/2} - \alpha(x_1^{n+1/2})^3 + b(x_1^{n+1/2})^2 - x_3^{n+1} + I)
\end{aligned}$$

Аналогично запишем алгоритм метода PCSE для системы (1):

$$\begin{aligned}
x_1^{n+\gamma} &= x_1^n + \frac{h}{\sqrt{2}}(x_2^n - \alpha(x_1^n)^3 + b(x_1^n)^2 - x_3^n + I) \\
x_1^{n+\gamma} &= x_1^n + \frac{h}{\sqrt{2}}(x_2^n - \alpha(x_1^{n+\gamma})^3 + b(x_1^{n+\gamma})^2 - x_3^n + I) \\
x_2^{n+\gamma} &= \frac{x_2^n + \frac{h}{\sqrt{2}}(c - d(x_1^{n+\gamma})^2)}{1 + h/\sqrt{2}} \\
x_3^{n+\gamma} &= \frac{x_3^n + \frac{h}{\sqrt{2}}(rs(x_1^{n+\gamma}) - \alpha)}{1 + rh/\sqrt{2}} \\
x_1^{\bar{n}} &= x_1^{n+\gamma} - \frac{h}{\sqrt{2}}(x_2^{n+\gamma} - \alpha(x_1^{n+\gamma})^3 + b(x_1^{n+\gamma})^2 - x_3^{n+\gamma} + I) \\
x_1^{\bar{n}} &= x_1^{n+\gamma} - \frac{h}{\sqrt{2}}(x_2^{n+\gamma} - \alpha(x_1^{\bar{n}})^3 + b(x_1^{\bar{n}})^2 - x_3^{n+\gamma} + I)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_2^{\bar{n}} &= \frac{x_2^{n+\gamma} - \frac{h}{\sqrt{2}}(c - d(x_1^{\bar{n}})^2)}{1 + h/\sqrt{2}} \\
x_3^{\bar{n}} &= \frac{x_3^{n+\gamma} - \frac{h}{\sqrt{2}}(rs(x_1^{\bar{n}}) - \alpha)}{1 - rh/\sqrt{2}} \\
x_3^{n+1} &= x_3^{\bar{n}} + h(r(s(x_1^{\bar{n}}) - \alpha) - x_3^{\bar{n}}) \\
x_2^{n+1} &= x_2^{\bar{n}} + h(c - d(x_1^{\bar{n}})^2 - x_2^{\bar{n}}) \\
x_1^{n+1} &= x_1^{\bar{n}} + h(x_2^{\bar{n}} - \alpha(x_1^{\bar{n}})^3 + b(x_1^{\bar{n}})^2 - x_3^{\bar{n}}) + I
\end{aligned}$$

где $\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Существует также модификация PCSE (PCSEmod) с заменой строки на вычисление с нескорректированными значениями:

$$x_2^{n+1} = x_2^{\bar{n}} + h(c - d(x_1^{\bar{n}})^2 - x_2^{\bar{n}})$$

Данная модификация обладает лучшей точностью и сходимостью, но требует настройки порядка вычислений для каждой конкретной моделируемой системы.

A. Оценка производительности

Основной целью данного этапа исследования было получение оценки вычислительной эффективности полувывных методов по сравнению с известными решателями ОДУ второго порядка: методом явной средней точки (EMP), методом Рунге–Кутты второго порядка (RK2), методом неявной средней точки (IMP) и нелинейным методом на основе аппроксимации Паде (Pade) [8].

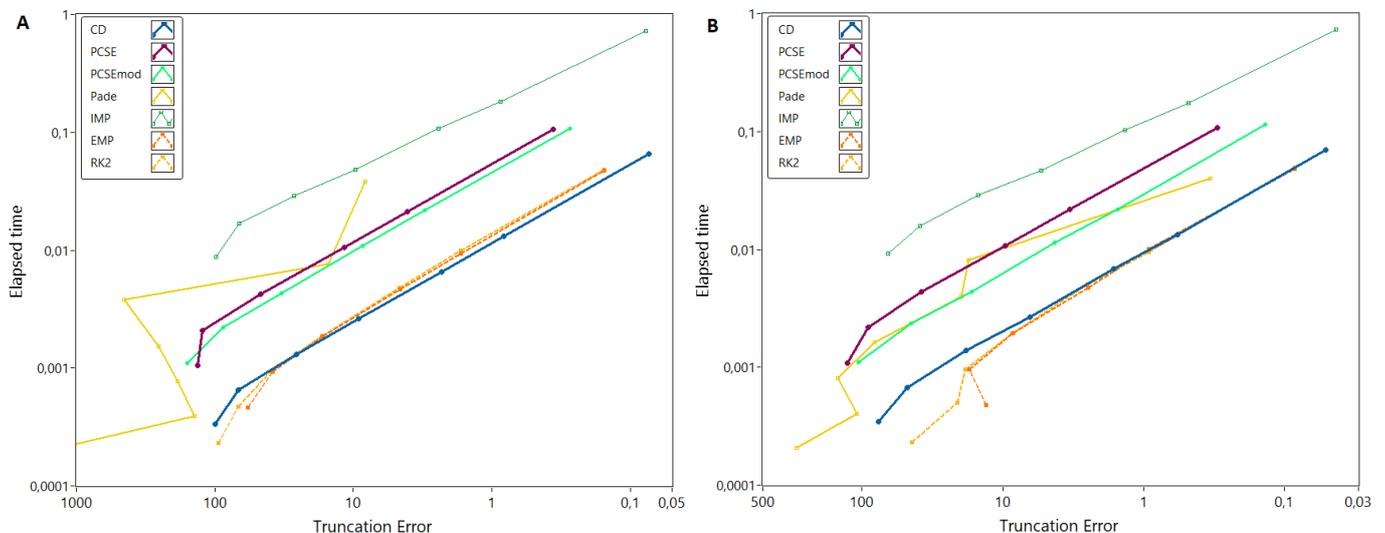


Рис. 1. Погрешность и время работы методов I=3; r=0.001, s=1 (A); r=0.005, s=4 (B)

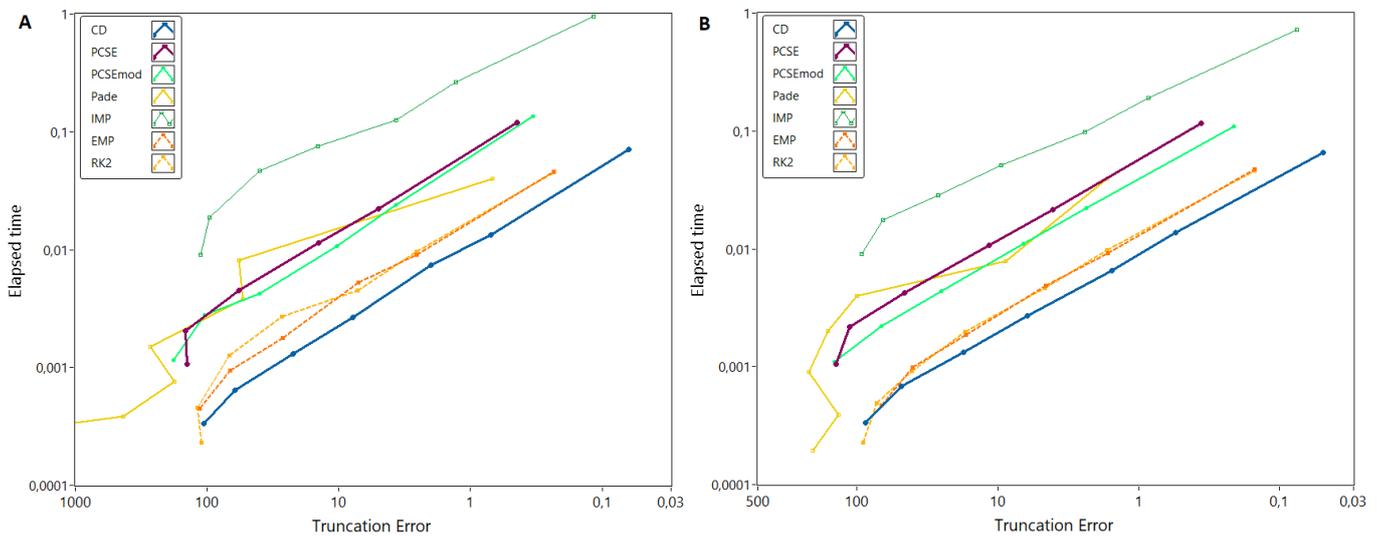


Рис. 2. Погрешность и время работы методов при параметрах $I=4$; $r=0.001$, $s=1$ (A); $r=0.005$, $s=4$ (B)

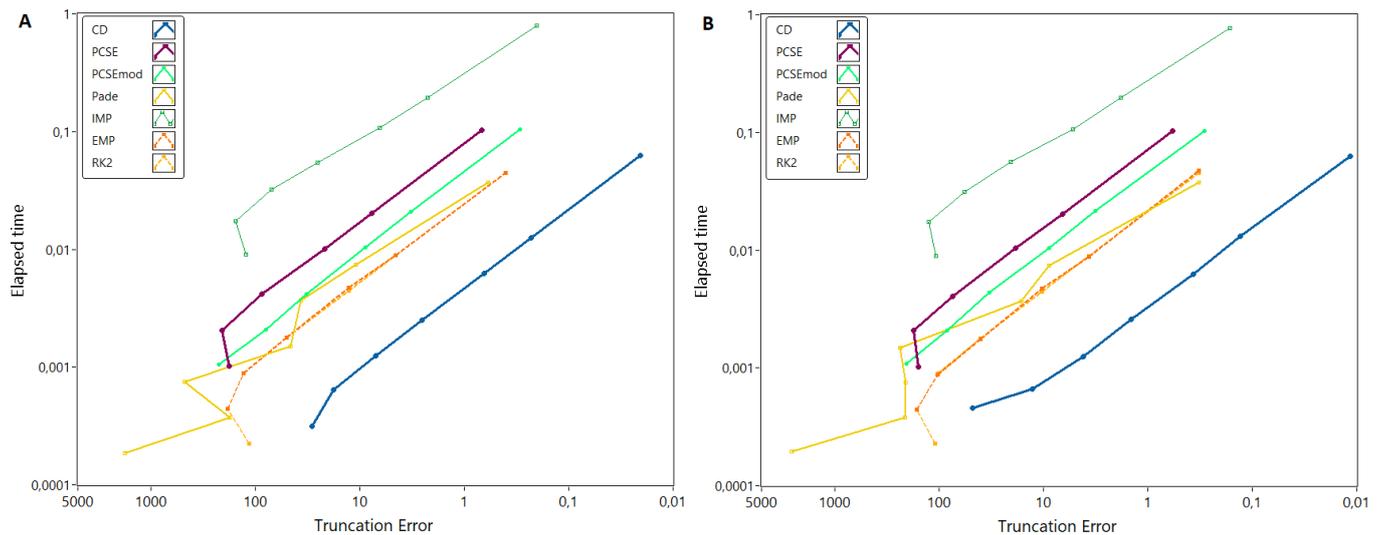


Рис. 3. Погрешность и время работы методов при параметрах $I=7$; $r=0.001$, $s=1$ (A); $r=0.005$, $s=4$ (B)

Все эксперименты проводились в рамках унифицированной виртуальной среды оценки производительности численных методов, разработанной в пакете NI LabVIEW 2018 для этого исследования. Разработанные программные средства позволяли измерить фактическое время выполнения кода и величину глобальной погрешности. Решатели были реализованы с постоянным шагом. Последовательность шагов, на которых были получены значения ошибок, выглядит следующим образом: [0,2; 0,1; 0,05; 0,025; 0,01; 0,005; 0,001]. В качестве референсного решения использовалось решение, полученное методом Дормана–Принса 8 порядка с шагом 10^{-5} с. Методы исследовались при следующих значениях параметров: $a = 1$; $b = 5$; $c = 1$; $d = 5$; $\alpha = -1.6$. Параметры r , s , I изменялись в различных экспериментах. Начальные условия: $x_1(0) = -1.6$, $x_2(0) = -12$, $x_3(0) = 0$. Время моделирования: 100 с.

Из рис. 1–3 видно, что метод CD показывает наилучшие результаты из всех исследованных алгоритмов. Метод PCSE и его модификация обладают худшей производительностью, нежели методы Рунге-Кутты 2 и явной средней точки, однако превосходят метод Раде и метод неявной средней точки. Отметим, что с ростом входного воздействия I , полуявные методы демонстрируют улучшение эффективности по сравнению с явными схемами, так при $I=7$ (рис. 3) модификация PCSE (Pre-corrected semi-explicit modified method) вплотную приближается к явным схемам по производительности.

V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В исследовании были рассмотрены полуявные методы решения ОДУ. Предложено две версии нового метода с предварительной коррекцией PCSE. Продemonстрировано что полуявные методы имеют высокую вычислительную эффективность при моделировании нелинейных систем, а

также показана возможность их применения при моделировании биологических нейронов на примере модели Хиндмарша–Роуза. Для повышения порядка точности предлагаемых методов можно использовать стандартные способы повышения порядка, такие как экстраполяция Эйткена–Невилла [2], композиционные методы [9] и др.

Основной потенциал нового полуявного метода PCSE заключается в возможности предварительной коррекции решения, что очень актуально для создания перспективных многошаговых полуявных схем решения систем ОДУ. Этому вопросу будут посвящены наши дальнейшие исследования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Butusov D.N., Andreev V.S., Pesterev D.O. Composition semi-implicit methods for chaotic problems simulation. DOI:10.1109/SCM.2016.7519698.
- [2] Hairer E., Lubich C. and Wanner G. Geometric numerical integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Second Edition, 2006
- [3] Hindmarsh J.L.; Rose R.M. A model of neuronal bursting using three coupled first order differential equations // Proceedings of the Royal Society of London. Series B. Biological Sciences. vol. 221(1222), pp. 87–102.
- [4] Semenov D.M. Synchronization control of two coupled non-identical Hindmarsh-Rose systems. DOI:10.25728/ubs.2018.75.2.
- [5] Steur E. Parameter estimation in Hindmarsh-Rose neurons. DCT rapporten; Vol. 2006.073 Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven, 2006.
- [6] Butusov D.N., Karimov A.I., Tutueva A.V. Symmetric extrapolation solvers for ordinary differential equations. DOI:10.1109/EIConRusNW.2016.7448145.
- [7] Butusov D.N., Ostrovskii V.Y., Karimov A.I., Andreev V.S. Semi-explicit composition methods in memcapacitor circuit simulation // International Journal of Embedded and Real-Time Communication Systems (IJERTCS), 2019, vol. 10(2), pp. 37–52.
- [8] Butusov D., Karimov A., Tutueva A., Kaplun D., Nepomucheno E.G. The Effects of Padé Numerical Integration in Simulation of Conservative Chaotic Systems // Entropy, 2019,21(4), p. 362
- [9] Yoshida H., Construction of higher order symplectic integrators // Physics Letters A, vol. 150(1990), pp. 262–268.