

# ***Modul OMSI-2*** ***im SoSe 2011***

## ***Objektorientierte Simulation*** ***mit ODEMx***

Prof. Dr. Joachim Fischer  
Dr. Klaus Ahrens  
Dipl.-Inf. Ingmar Eveslage  
Dipl.-Inf. Andreas Blunk

[fischer|ahrens|eveslage|blunk@informatik.hu-berlin.de](mailto:fischer|ahrens|eveslage|blunk@informatik.hu-berlin.de)

- Homepage

<http://www.informatik.hu-berlin.de/sam/lehre>

- Vorlesungen

Mo: 9.15 Uhr RUD 25 IV.113

Mi: 9.15 Uhr RUD 25 IV.113

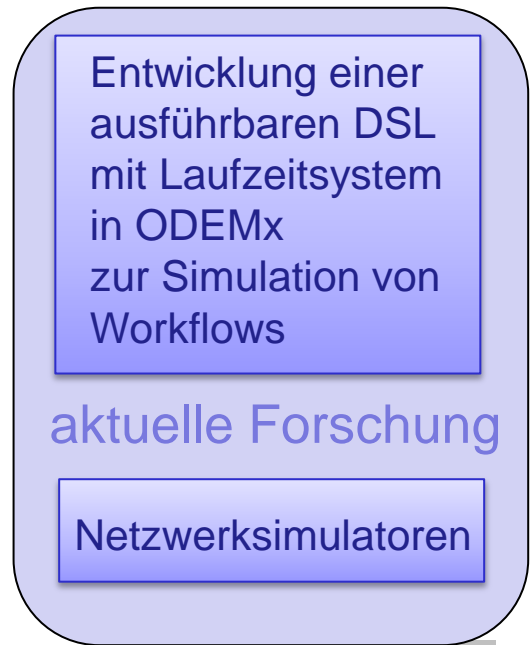
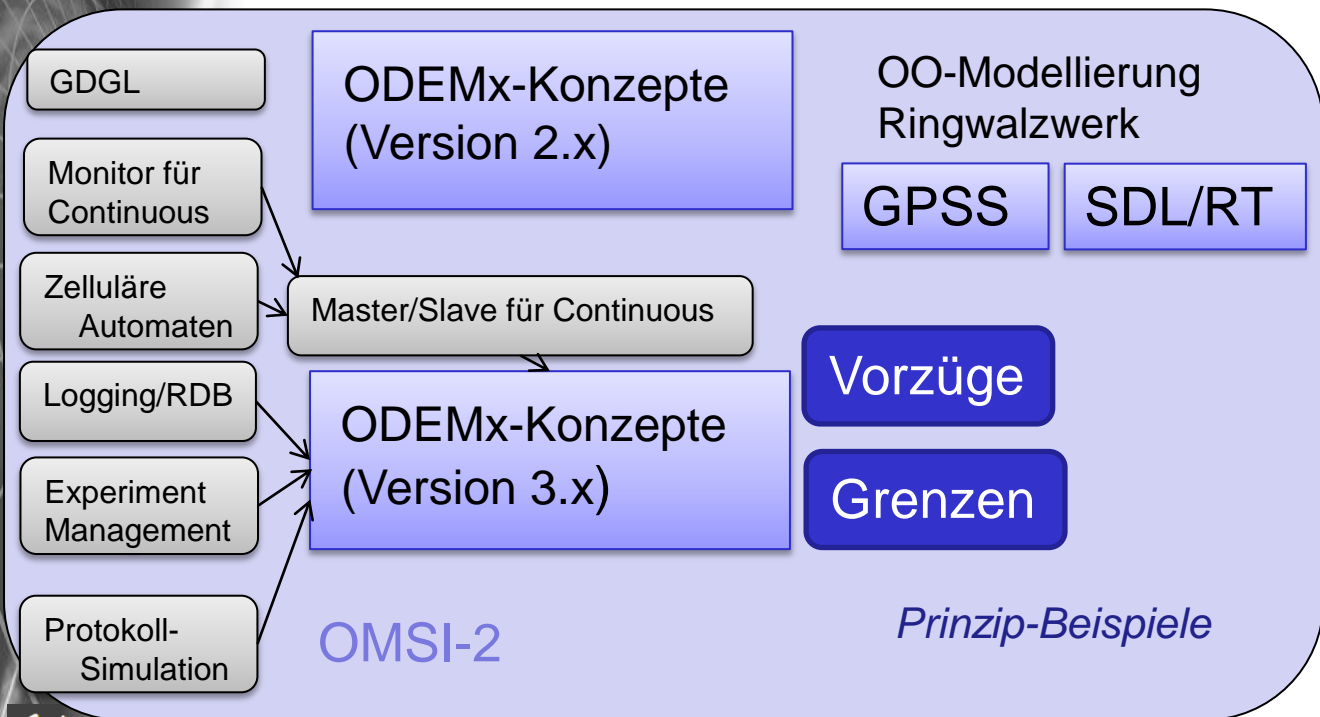
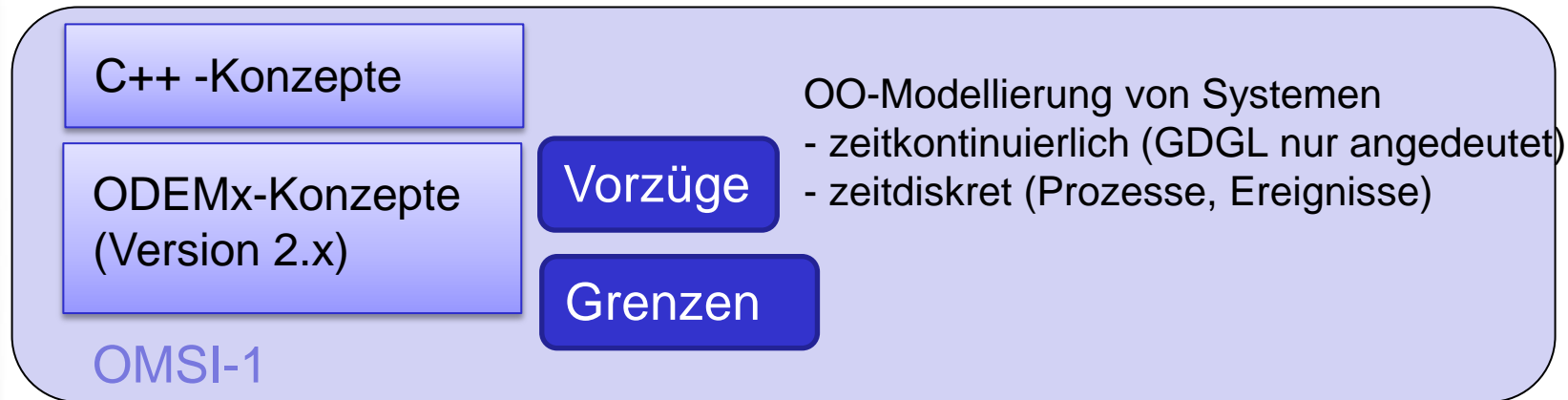
- Praktikum

*(Beginn 18.04.2011)*

Mo: 11.00 Uhr RUD 25 IV.113

➔ **Praktikumsschein, mündliche Prüfung**

# Ziele von OMSI-1 und OMSI-2



# Zur Erinnerung (OMSI-1)

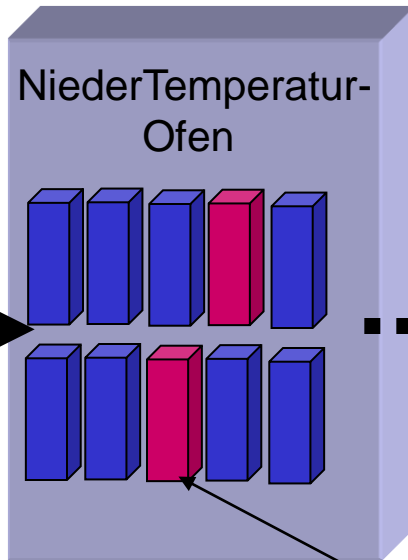
## Modellierung der Änderung der Ofentemperatur

Ofentemperatur  $y$  als  $y(t)$

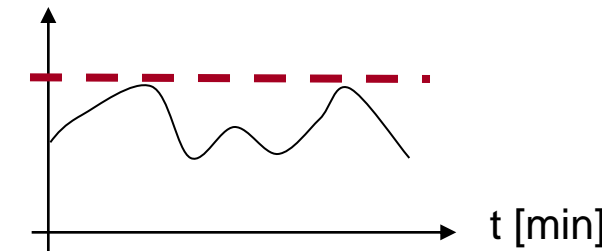
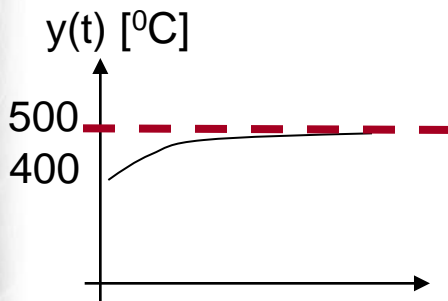
$$y'(t) = 500 - y(t) - n(t) * \{y(t) - m(t)\}$$

Furnace.deriveTemp

Furnace.temp



- Energiezufuhr: max. 500°C
- $n(t)$ : Anzahl von Barren im Ofen
- $m(t)$ : mittlere Temperatur der Barren im Ofen
- Anfangstemperatur: 400°C



Zieltemperatur

$x(t) = 380 \text{ } ^\circ\text{C}$   
per Beobachtung

Objektorientierte Simulation mit ODEMX

# 1. *Behandlung zeitkontinuierlicher Prozesse*

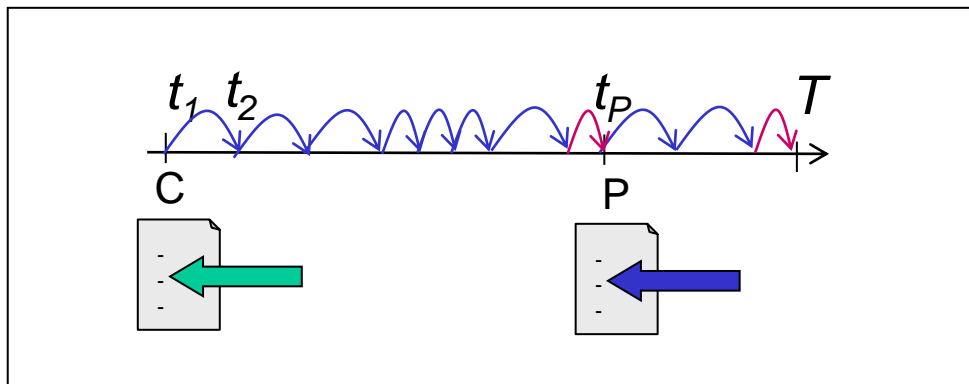
1. Scheduling von Process- und Continuous-Objekten
2. DGL, Richtungsfeld(Phasenraum), Trajektorie, Zustandsraum
3. Näherungsverfahren, Diskretisierungs/Verfahrensfehler
4. Runge-Kutta-Merson-Verfahren (ODEMx-Bibliothek)
5. Continuous-Implementierungskonzept
6. Ablauf am Beispiel (Barrentemperatur)
7. Synchronisationsprobleme und alternative Modellierungsmöglichkeiten in ODEMx

# Erste Vorstellung: Scheduling von Continuous-Objekten

$$t_0 \leq t \leq T$$

$$\begin{aligned} \vec{y}' &= \vec{F}(\vec{y}, t) \\ \vec{y}(t_0) &= \vec{y}_0 \quad \vec{y}_0 \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y' &= f(y, t) \\ y(t_0) &= y_0 \quad y_0 \in \mathbb{R}^1 \end{aligned}$$



$t_p$ : Steuerungswechsel  
in der Prozessausführung

## Continuous-Objekt

berechnet für jeden Diskretisierungsschritt  $t_i$

- den Zustandsvektor  $y(t_i)$  STATE mit Hilfe eines numer. Integrationsverfahrens (bei Berechnung aktueller Zustandsänderungen  $y'(t_i)$ : RATE)  $\rightarrow$  derivatives()
- Umsortierung in der ExL um die Integrationsschrittweite (SW) nach jedem Integrationsschritt
- dynamische Variation der SW  $\searrow$  nach numerischen Kriterien
- dynamische Anpassung der SW  $\searrow$  an Ereigniszeitpunkte diskreter Prozesse  $t_p$  und an das Integrationsende  $T$

initiale Wertebelegung des State-Vektors

# NextEvent-Prinzip des Simulators

bleibt auch für die Behandlung zeitkontinuierlicher Prozesse und damit im Mix mit zeitdiskreten Prozessen erhalten:

- Laden der initialen Prozesse in die ExL (mindestens einen)
- Starten des ersten Prozesses (kleinste Ereigniszeit, höchste Priorität)

(Re-)Aktivierung seiner virtuellen Lebenslauf-Methode

diskret

- Zustandsänderungen  
Zeitverbrauch (erneutes Scheduling mit evtl. Prozesswechsel)

kontinuierlich:  
integrate()

ODER

- Blockierung (Entfernung aus der ExL, Prozesswechsel)

ODER

- Terminierung (Entfernung aus dem ExL, Prozesswechsel)

**zyklisch:**  
nächster  
Prozess  
im Terminkalender  
**Next-Event-Prinzip**

- Auswertung, Abbruch der Simulation

# 1. *Behandlung zeitkontinuierlicher Prozesse*

1. Scheduling von Process- und Continuous-Objekten
2. DGL, Richtungsfeld(Phasenraum), Trajektorie, Zustandsraum
3. Näherungsverfahren, Diskretisierungs/Verfahrensfehler
4. Runge-Kutta-Merson-Verfahren (ODEMx-Bibliothek)
5. Continuous-Implementierungskonzept
6. Ablauf am Beispiel (Barrentemperatur)
7. Synchronisationsprobleme und alternative Modellierungsmöglichkeiten in ODEMx



# Grundsätzliche Einteilung von Systemen und Modellen (Erinnerung)

- Einteilung von (Teil-) Systemen
  - zeitdiskrete Prozesse
    - kennen wir bereits
  - zeitkontinuierlich Prozesse
    - nach Anzahl der Zustandsgrößen
    - System  $n$ -ter Ordnung hat  $n$  Zustandsgrößen

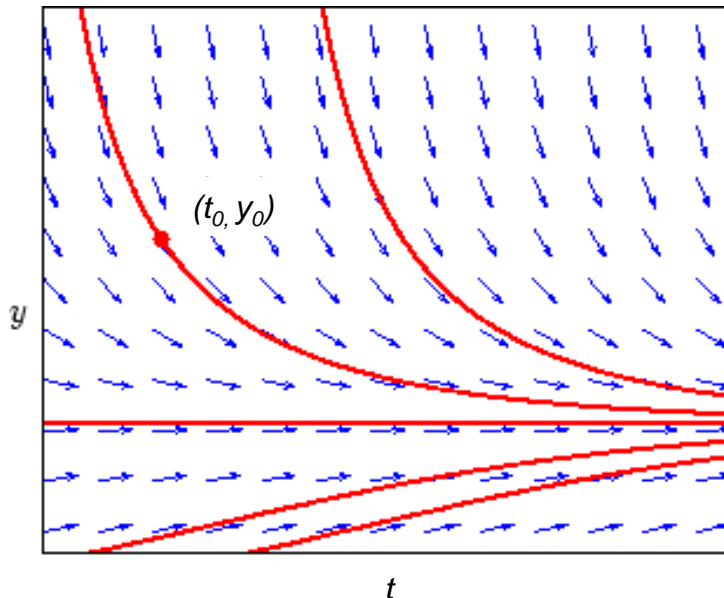
modelliert als System  
von  $n$  Differentialgleichungen 1. Ordnung

(math. äquivalent zu einer Differentialgleichung  $n$ -ter Ordnung)

kombinierte  
Systeme  
(Beispiel:  
Niedrigtemperaturofen)

# Lösung einer DGL

Das **Richtungsfeld** einer Differentialgleichung  $\vec{y}' = \vec{F}(\vec{y}, t)$  ordnet jedem Punkt in der  $(t, y)$ -Ebene eine Tangente mit Steigung  $y'$  zu (wenn  $y$  1-dimensional ist).



Existenz und Eindeutigkeit einer AWA-Lösung ist bei stetiger Differenzierbarkeit der Funktion  $F$  gesichert.

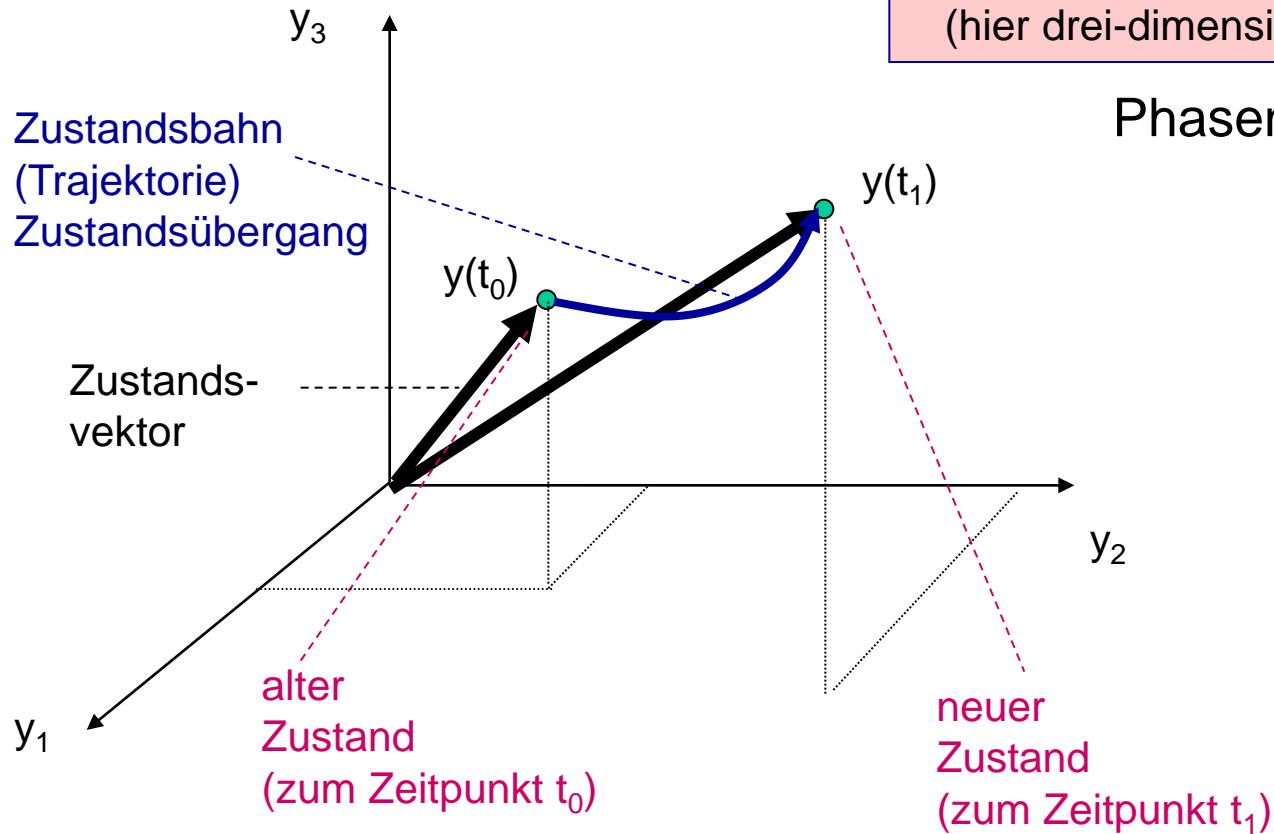
Die Aufgabe, eine Lösung  $y(t)$  für der Differentialgleichung mit  $\vec{y}' = \vec{F}(\vec{y}, t)$  zu finden, heißt **Anfangswertaufgabe (AWA)**.

$$\vec{y}(t_0) = \vec{y}_0 \quad \vec{y}_0 \in \mathbb{R}^n$$

# Zustandsraum, Zustandsbahnen

$n$  Zustandsgrößen spannen  $n$ -dimensionalen Zustandsraum auf (hier drei-dimensional)

Phasenporträt



# 1. *Behandlung zeitkontinuierlicher Prozesse*

1. Scheduling von Process- und Continuous-Objekten
2. DGL, Richtungsfeld(Phasenraum), Trajektorie, Zustandsraum
3. Näherungsverfahren, Diskretisierungs/Verfahrensfehler
4. Runge-Kutta-Merson-Verfahren (ODEMx-Bibliothek)
5. Continuous-Implementierungskonzept
6. Ablauf am Beispiel (Barrentemperatur)
7. Synchronisationsprobleme und alternative Modellierungsmöglichkeiten in ODEMx

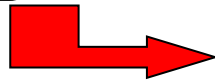
# Näherungsverfahren

betrachten der Einfachheit halber den 1-dimensionalen Fall

Ausgangspunkt: äquivalente Integralgleichung

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

$$y(t_0) = y_0$$



$$y(t_{k+1}) - y(t_k) = \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(t, y(t)) dt$$
$$y(t_{k+1}) = y(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(t, y(t)) dt$$

Einschrittverfahren

Näherungsverfahren unterschiedlicher Güte  
(Fehlerordnung im Abgleich mit Taylor-Reihenentwicklung)

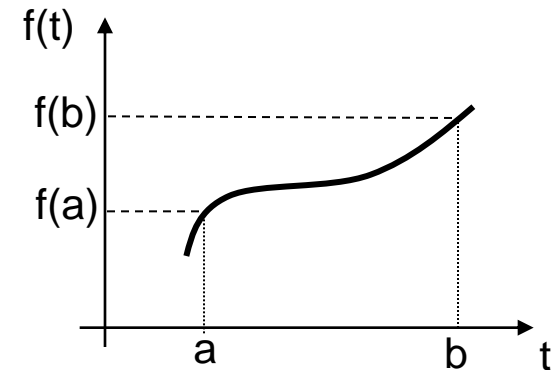
$$y' = f(y, t)$$

Prinzip:

- Intervall  $[t_{k+1}, t_k]$  wird weiter unterteilt  
Ableitungsberechnung auch zu den Zwischenzeitpunkten innerhalb eines Integrationsschrittes
- Prädiktor- und Korrektorschritte mit gewichteten Anteilen der zu den Zwischenzeiten berechneten Ableitungen

# Numerische Integrationsverfahren

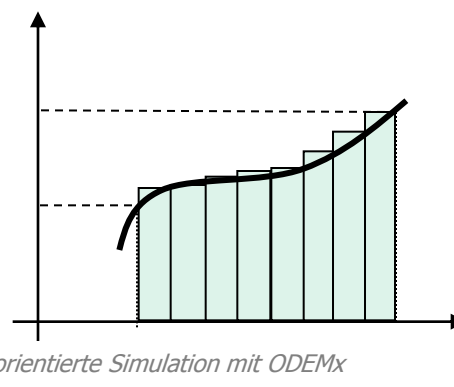
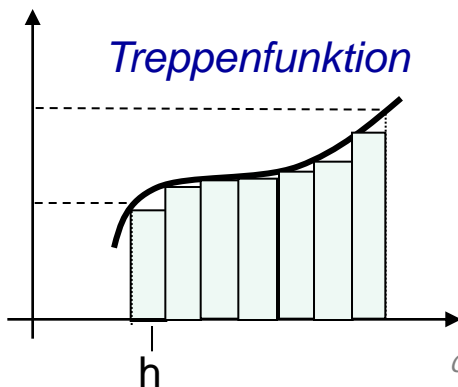
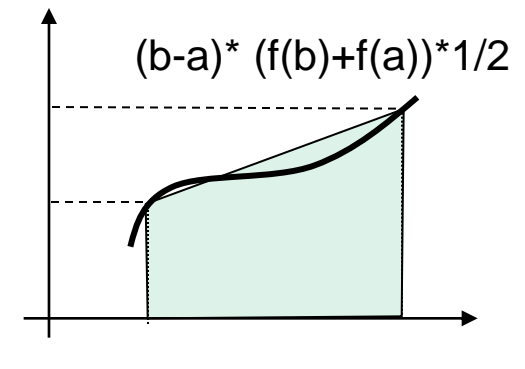
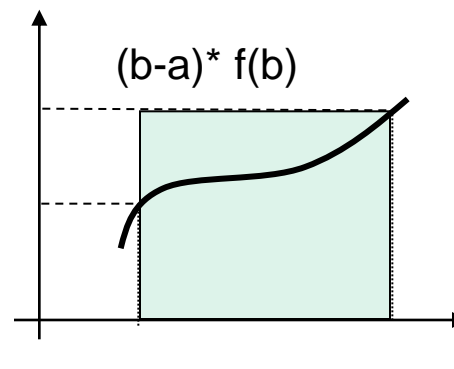
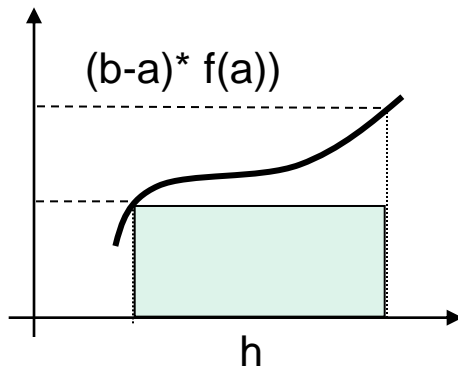
- Approximation des Integrals über  $f$   
 $a = t_0, b = T$



Wie groß ist der **Diskretisierungsfehler** ?

(auch Verfahrensfehler genannt)

Fehlerbetrachtungen, wenn  $h$  gegen Null geht



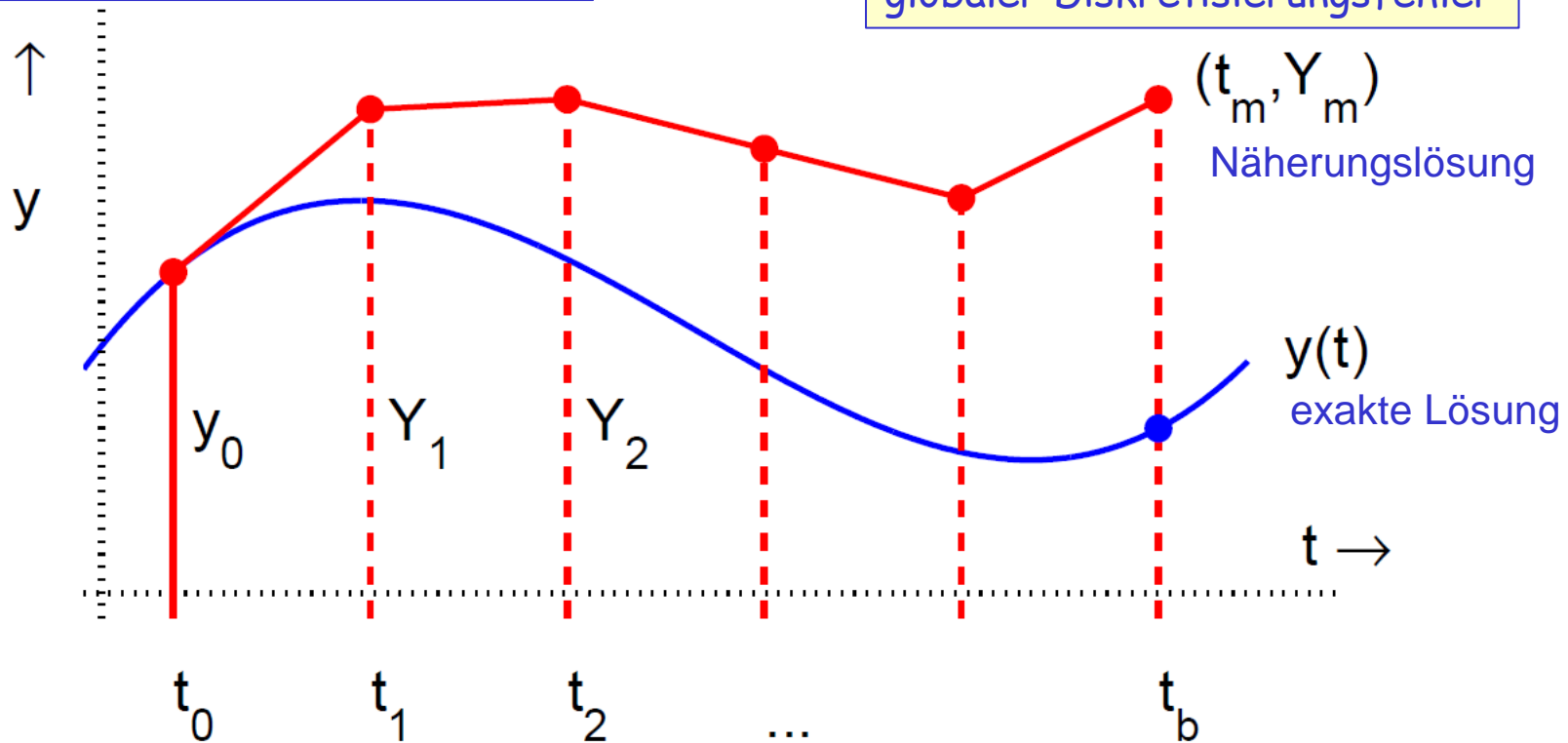
Objektorientierte Simulation mit ODEmx

# Diskretisierungsfehler

Prinzipdarstellung

betrachten jetzt  $y$  (nicht Funktion  $f$ )

lokaler Diskretisierungsfehler  
globaler Diskretisierungsfehler



$$\begin{aligned} y' &= f(y, t) & t_k &= t_0 + kh & (k = 1, 2, \dots) \\ y(t_0) &= y_0 & y_{k+1} &= y_k + hf(y_k, t_k) & (k = 1, 2, \dots) \end{aligned}$$

# Ordnung des Diskretisierungsfehlers (ein Gütekriterium des Verfahrens)

Verfahren unterscheiden sich durch die Ordnung ihres Diskretisierungsfehlers

## Wie bestimmt man diese Ordnung?

1. Differenzbildung von
  - Termen der exakten Funktion  $f$  (dargestellt als Taylor-Reihe) und
  - Termen der Approximation von  $f$Dabei heben sich Terme kleiner Ordnungen gegenseitig auf
2. kleinste Ordnung der verbleibenden Terme in der Differenz bestimmt die **Ordnung des Fehlers**

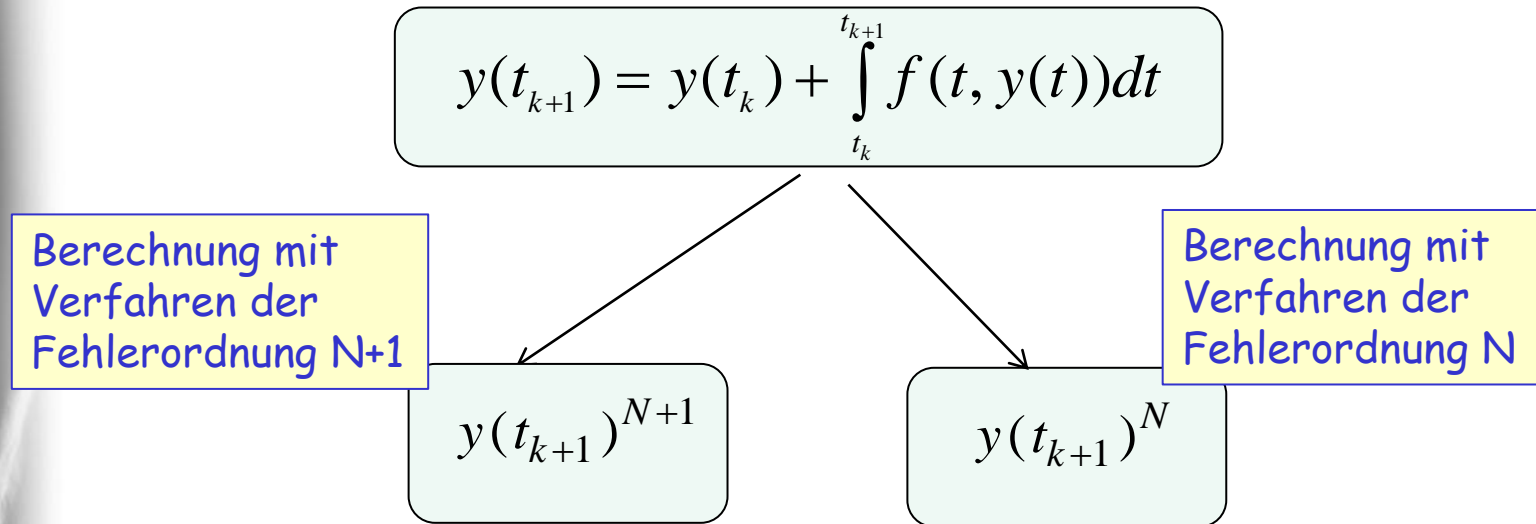
weiteres Gütekriterium: **globale Fehler (schwieriger zu bestimmen)**

### FRAGE:

wie unterscheiden sich exakter Verlauf und approximierter Verlauf nach einer Reihe von Diskretisierungsschritten (Fortpflanzung des lokalen Fehlers) ?



# Abschätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers



## Abschätzung als:

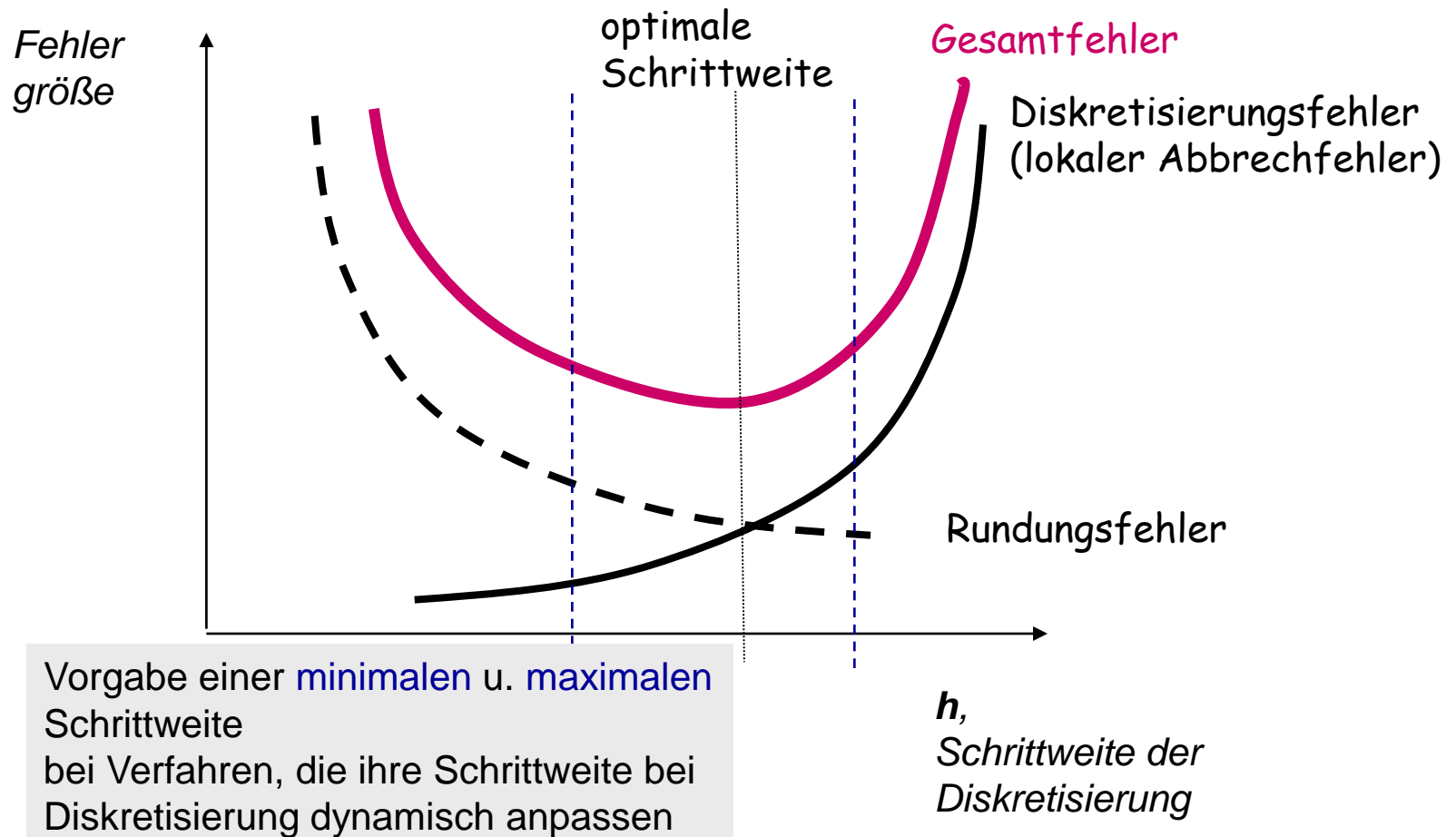
- Differenz der Lösungen (nach Verfahren unterschiedlicher Ordnung) zum jeweils aktuellen diskretisierten Zeitpunkt

## Prinzip einer üblichen Integrationsschrittweitensteuerung:

- berechneter Diskretisierungsfehler **zu groß**: Wiederholung des letzten Integrationsschrittes mit halbiertes Schrittweite
- berechneter Diskretisierungsfehler **sehr klein**: Verdopplung der Schrittweiten beim nächsten Schritt

# Fehlerüberlagerung

... gilt für alle Diskretisierungsverfahren





# 1. *Behandlung zeitkontinuierlicher Prozesse*

1. Scheduling von Process- und Continuous-Objekten
2. DGL, Richtungsfeld(Phasenraum), Trajektorie, Zustandsraum
3. Näherungsverfahren, Diskretisierungs/Verfahrensfehler
4. Runge-Kutta-Merson-Verfahren (ODEMx-Bibliothek)
5. Continuous-Implementierungskonzept
6. Ablauf am Beispiel (Barrentemperatur)
7. Synchronisationsprobleme und alternative Modellierungsmöglichkeiten in ODEMx

# Runge-Kutta-Merson (ODEMx-Verfahren)

berechnet  
 $y(t_{k+1})$  aus  $y(t_k)$  in 5 Zwischenschritten:

$$k_1 = hf(t_0, y_0)$$

$$k_2 = hf\left(t_0 + \frac{1}{3}h, y_0 + \frac{1}{3}k_1\right),$$

$$k_3 = hf\left(t_0 + \frac{1}{3}h, y_0 + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{6}k_2\right),$$

$$k_4 = hf\left(t_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{8}k_1 + \frac{3}{8}k_2\right),$$

$$k_5 = hf\left(t_0 + h, y_0 + \frac{1}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3 + 2k_4\right),$$

$$y^1(t_0 + h) = y_0 + \frac{1}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3 + 2k_4,$$

$$y^2(t_0 + h) = y_0 + \frac{1}{6}k_1 - \frac{2}{3}k_4 + \frac{1}{6}k_5,$$

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

$$y(t_0) = y_0 \quad t_0 \leq t \leq T$$

lokaler Diskretisierungsfehler

$$R = 0.2|y^1 - y^2|$$

Norm des Differenzvektors

falls  $R > \varepsilon$ , dann  $h := h/2$   
falls  $R \leq \varepsilon$ , dann  $h := h \cdot 2$

$\varepsilon$  vorgegebene Schranke

Verfahren der Ordnung 4

Verfahren der Ordnung 5

# Runge-Kutta-Merson (ODEMx-Verfahren)

## Charakteristik

- implementiert als virtuelle Methode `takeAStep (double h)`  
d.h.: vorab-installiertes Verfahren, das ersetzt werden kann
- Ein-Schritt-Verfahren
- Verfahren 4.Ordnung
- automatische SW-Korrektur (erfolgt über `integrate!`)  
bei Vorgabe
  - (a) des maximalen Diskretisierungsfehlers  $\varepsilon$
  - (b) und SW-Grenzen (`minh`, `maxh`)
- Fehlerabbruch,  
falls Diskretisierungsfehler auch bei minimaler SW auftritt

SW=Schrittweite

# 1. *Behandlung zeitkontinuierlicher Prozesse*

1. Scheduling von Process- und Continuous-Objekten
2. DGL, Richtungsfeld(Phasenraum), Trajektorie, Zustandsraum
3. Näherungsverfahren, Diskretisierungs/Verfahrensfehler
4. Runge-Kutta-Merson-Verfahren (ODEMx-Bibliothek)
5. Continuous-Implementierungskonzept
6. Ablauf am Beispiel (Barrentemperatur)
7. Synchronisationsprobleme und alternative Modellierungsmöglichkeiten in ODEMx

# Continuous: die zentralen Funktionen

## Member-Funktionen:

- **virtual int** main() = 0;
- **int** integrate (SimTime timeEvent, Condition stateEvent=0);  
realisiert zeitkontinuierliche Verhaltensphase (mehrere möglich):

Ausführung einer Folge von Integrationsschritten  
inläufig stattfindenden Abläufen

*ruft sukzessive  
RKM-Verfahren mit aktualisierter SW*

- **virtual void** takeAStep (double h);
- **virtual void** derivatives (double t) = 0;

*ruft für jeden  
Zwischenzeitpunkt  
(5-mal) s. 10.25*

- **virtual double** errorNorm();  
Maximumnorm, Euklidische Norm

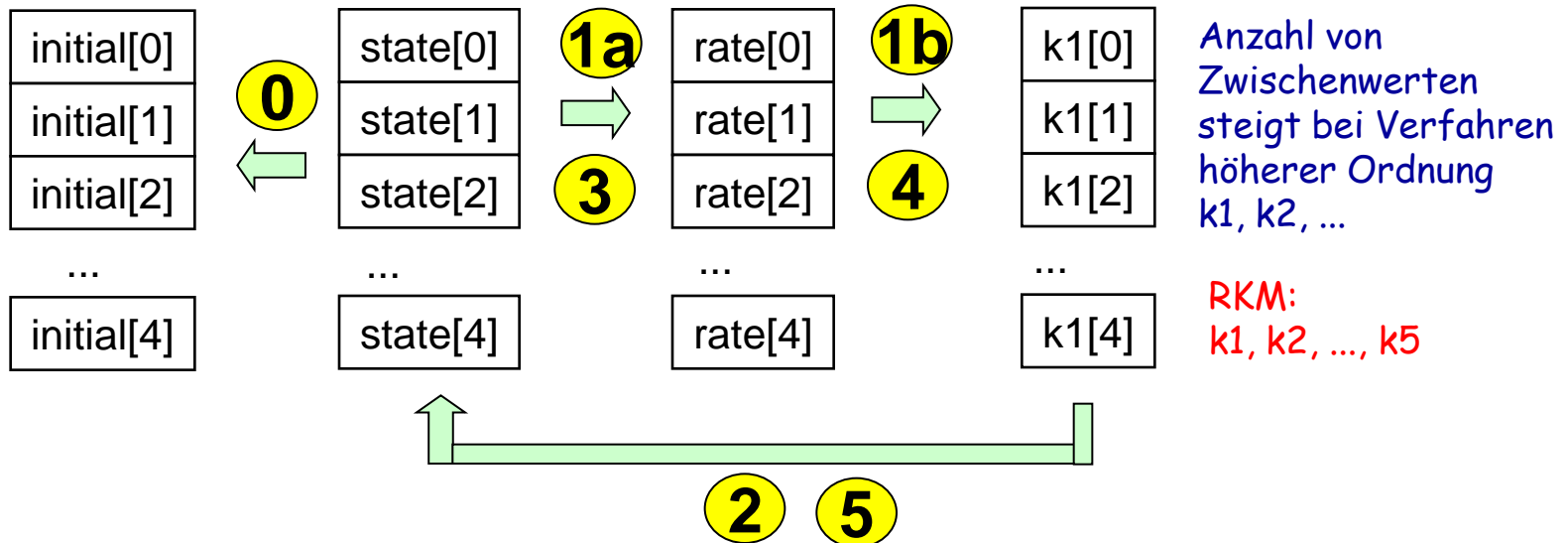
$$R = 0.2 |y^1 - y^2|$$

*nach jedem takeAStep-Ruf*



# Continuous-Implementationschema

- Datenstruktur:  
Vektoren der entsprechenden Dimension des Zustandsraumes



0. retten der Anfangswerte im **initial-Vektor**
- 1a. **rate-Vektor** speichert die aktuellen Ableitungswerte  $f(\text{state}[], t)$
- 1b. retten der aktuellen Ableitungen (**rate**) im **k1-Vektor**
2. Berechnung des neuen **state-Vektors** (mit **k1**) nach Euler-Vorwärts
3. **rate-Vektor** speichert die aktuellen Ableitungswerte  $f(\text{state}[], t+h)$
4. Mittelwert von **rate** und **k1** mit Speicherung in **k1**
5. Wiederholung Euler-Vorwärts mit diesem Mittelwert der Ableitungen: **state[]**
6. ...

# 1. *Behandlung zeitkontinuierlicher Prozesse*

1. Scheduling von Process- und Continuous-Objekten
2. DGL, Richtungsfeld(Phasenraum), Trajektorie, Zustandsraum
3. Näherungsverfahren, Diskretisierungs/Verfahrensfehler
4. Runge-Kutta-Merson-Verfahren (ODEMx-Bibliothek)
5. Continuous-Implementierungskonzept
6. Ablauf am Beispiel (Barrentemperatur)
7. Synchronisationsprobleme und alternative Modellierungsmöglichkeiten in ODEMx

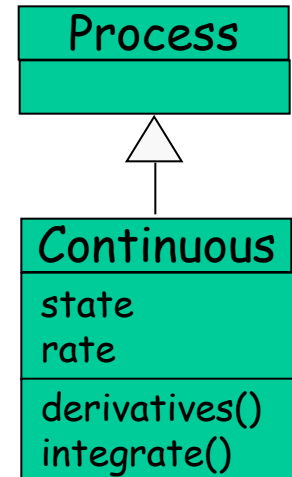
# Ablauf am Beispiel: Barrentemperatur

jeder kontinuierliche Prozess (Continuous) verfügt über

1. Zustandsattribut **state** (n-dim. Vector) ~ Temperatur
2. erste Ableitung des Zustandsattributs **rate** (n-dim. Vector)

Werte zum aktuellen Zeitpunkt

3. *Pure Virtual Function* **dervatives (double t)** zur Codierung der Funktion **f** zur Berechnung von **rate**



Temperatur  $x$  eines Barrens als  $x(t)$

$$x'(t) = \{ u(t) - x(t) \} / 7$$

```
class Ingot : public Continuous {
    ...
    Ingot ();
    void derivatives (double);
    int main();
}
```

```
void Ingot::dervatives (double t) {
    rate[0] = { u() - state[0] } / 7
}
```

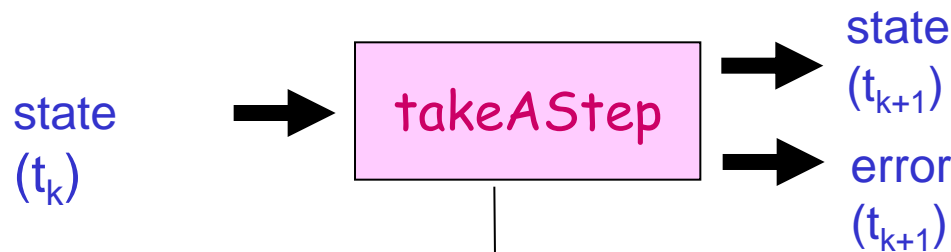
# Zur Umsetzung der numerischen Berechnung

...

4. virtuelle Integrationsmethode: hier RKM

```
void takeOneStep(double h)
```

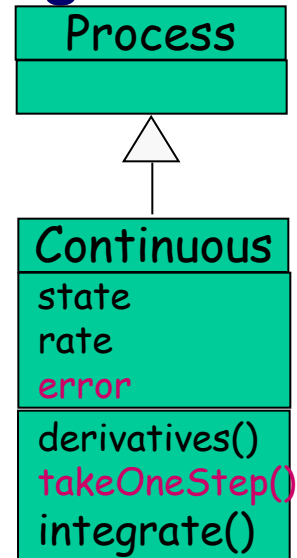
führt einen **einzelnen** Integrationsschritt aus



bei Berechnung von **rate**  
zu verschiedenen Zwischenzeitpunkten

```
void dervatives (double t) {  
    rate[0] = { u() - state[0] } / 7  
}
```

durch Aufruf von **derivatives**  
und Verarbeitung der zwischenzeitlichen  
**rate**-Werte



zusätzliches  
Feld der Dim. n

# Zur Umsetzung der numerischen Berechnung

...

## 5. Methode zur globalen Steuerung der numerischen Integration:

`int integrate (SimTime timeEvent, Condition stateEvent=0)`

- startet die numerische Integration zum aktuellen Zeitpunkt ausgehend vom initialen `state`-Wert
- benutzt eine vorgegebene Schrittweite `h`: Bereichsangabe ( $10^{-4} .. 10^{-2}$ )
- benutzt eine vorgegebene Fehlerschranke `errorLimit`: Wert aus ( $10^{-5} .. 10^{-3}$ )
- benutzt einer vorgegebene virtuelle Methode einer Vektornorm `double errorNorm()`  
(Euklidische Norm, Maximum-Norm)

`initialState`  
zusätzliches  
Feld der Dim.  $n$

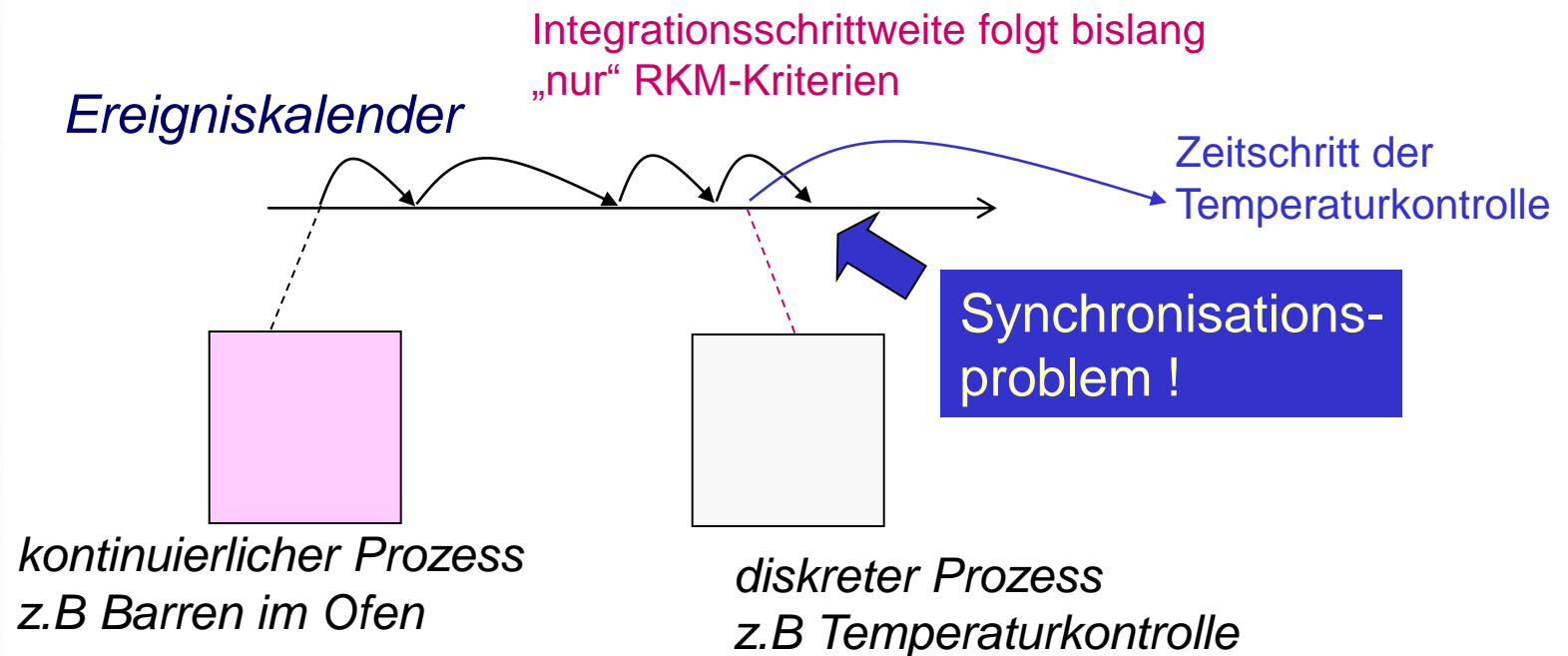
- ➔ d.h. führt einen Integrationsschritt mit SW `h` aus
- berechnet die Norm vom `error`-Vektor → double-Wert
  - vergleicht diesen mit vorgeg. `errorLimit`  
**Fall wesentlich kleiner:** nächster Integrationsschritt mit doppelter Schrittweite  $h$
  - **Fall größer:** Wiederholung des Integrations schrittes mit halbiertes Schrittweite  
(vorher: `state= initialState`)
  - **Fall sonst:** nächster Integrationsschritt mit unveränderter Schrittweite  $h$

# Zur Umsetzung der numerischen Berechnung

...

6. zusätzliche Nebenbedingungen zur Steuerung der numerischen Schrittweite:

```
int integrate (SimTime timeEvent, Condition stateEvent=0)
```



# Zur Umsetzung der numerischen Berechnung

...

6. zusätzliche Nebenbedingungen zur Steuerung der numerischen Schrittweite:

`int integrate (SimTime timeEvent, Condition stateEvent=0)`

*Ereigniskalender*

