

# ¿DISCRETIZACIÓN TEMPORAL O DE ESTADOS? CONVENIENCIA SEGÚN EL CONCEPTO DE ACTIVIDAD HOMOGENEA

Mariana Bergonzi<sup>†</sup>, Ernesto Kofman<sup>†</sup> y Rodrigo Castro<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>CIFASIS - CONICET, FCEIA, Universidad Nacional de Rosario, Argentina, [bergonzi@cifasis-conicet.gov.ar](mailto:bergonzi@cifasis-conicet.gov.ar)

<sup>‡</sup>ICC - CONICET, Departamento de Computación - UBA, Argentina

**Resumen:** Este trabajo define el concepto de *homogeneidad de la actividad* de las soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs), que mide la semejanza en el cambio que experimentan las distintas variables. Se muestra que esta medida permite establecer criterios que señalan la conveniencia de usar esquemas de integración numérica clásicos basados en la discretización temporal o métodos basados en la cuantificación de las variables de estado.

**Palabras clave:** *ecuaciones diferenciales ordinarias, métodos de integración numérica, métodos de QSS.*

2000 AMS Subject Classification: 37M05

## 1. INTRODUCCIÓN

Los métodos clásicos de simulación de sistemas continuos representados por EDOs se basan en la discretización temporal [3, 4, 2]. Una alternativa a estos algoritmos la brindan los métodos de cuantificación de estados (QSS, por *Quantized State Systems* [6, 2, 7]) que sólo realizan pasos individuales sobre las variables de estado a medida que estas experimentan cambios significativos. Los métodos de QSS, por lo tanto, suelen ser convenientes cuando los cambios se concentran en pocas variables de estado, es decir, cuando la *actividad* [1] del sistema es *heterogénea*.

En este trabajo definimos formalmente el concepto de *homogeneidad de la actividad* de un sistema brindando una medida que permite dirimir sobre la potencial conveniencia de usar un enfoque clásico o uno basado en QSS. Este concepto es ilustrado con un ejemplo de simulación en el que variando un parámetro cambia la medida de homogeneidad y con ella la conveniencia de usar uno u otro esquema numérico.

## 2. ANTECEDENTES

### 2.1. MÉTODOS DE QSS

Consideremos un sistema continuo de la forma:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (1)$$

donde  $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^N$  es el vector de estados y  $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^m$  es una trayectoria conocida. El método de QSS de primer orden (QSS1) [6] resuelve dicho sistema mediante la siguiente aproximación:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t)), \quad (2)$$

donde  $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^N$  es el *vector de estados cuantificados* y  $\mathbf{v}(t) \in \mathbb{R}^m$  es una aproximación seccionalmente constante de  $\mathbf{u}(t)$ . Cada componente  $q_i(t)$  sigue una trayectoria seccionalmente constante que sólo cambia cuando su diferencia con el estado correspondiente  $x_i(t)$  alcanza un valor  $\Delta Q_i$  llamado *quantum*. Formalmente, las trayectorias están relacionadas según:

$$q_i(t) = \begin{cases} q_i(t_k) & \text{si } |x_i(t) - q_i(t_k)| < \Delta Q_i \\ x_i(t) & \text{en otro caso} \end{cases}$$

para  $t_k < t \leq t_{k+1}$ , donde  $t_{k+1}$  es el primer tiempo después de  $t_k$  en el cual  $|x_i(t) - q_i(t_k)| = \Delta Q_i$ .

Dado que las trayectorias de  $q_i(t)$  y de  $v_j(t)$  son seccionalmente constantes, en virtud de la Ec. (2), las derivadas  $\dot{x}_i(t)$  también lo son y, por lo tanto, los estados  $x_i(t)$  siguen trayectorias seccionalmente lineales. Debido a esta forma particular de las trayectorias, la obtención de la solución exacta de la Ec. (2) resulta sencilla y puede traducirse fácilmente en un algoritmo de simulación a eventos discretos [6].

La idea de QSS1 fue también extendida a métodos de orden mayor (QSS2 [2] y QSS3 [5]) que comparten la definición de la Ec.(2), pero donde los estados cuantificados siguen trayectorias seccionalmente lineales y parabólicas respectivamente. Hay también métodos linealmente implícitos (LIQSS1, LIQSS2 y LIQSS3) que funcionan eficientemente en ciertas clases de sistemas stiff [7].

## 2.2. ACTIVIDAD DE ORDEN N

El número de pasos mínimos que necesita un método de QSS para obtener una trayectoria puede estimarse con el concepto de *actividad* [1]. Dada una señal  $x_i(t)$ , la actividad de orden  $n$  en el intervalo  $[t_0, t_f]$  se define según:

$$A_{x_i(t_0, t_f)}^{(n)} \triangleq \int_{t_0}^{t_f} a_i^{(n)}(\tau) d\tau = \int_{t_0}^{t_f} \left| \frac{\frac{d^n x_i(\tau)}{d\tau^n}}{n!} \right|^{1/n} d\tau \quad (3)$$

Asumiendo que  $x_i(t)$  es de orden  $n$  y  $q_i(t)$  de orden  $n-1$ , suponiendo que ambas trayectorias no se separan entre sí más que  $\Delta Q_i$  y que cada segmento de  $q_i(t)$  comienza igual que  $x_i(t)$  hasta la derivada  $n-1$  (como lo hacen los métodos QSS1-3), se puede estimar el número mínimo de segmentos de  $q_i(t)$  según:

$$k_{x_i(t_0, t_f)}^{(n)}(\Delta Q_i) \approx \frac{A_{x_i(t_0, t_f)}^{(n)}}{(\Delta Q_i)^{1/n}} \quad (4)$$

## 3. RESULTADO PRINCIPAL

El concepto de actividad permite estimar el mínimo número de pasos que necesita un método de QSS. En esta sección se desarrollan los conceptos de *actividad global* y de *homogeneidad*, que permiten extender la estimación a los métodos clásicos (de tiempo discreto) y comparar con los de QSS.

### 3.1. ACTIVIDAD INSTANTÁNEA, LOCAL Y GLOBAL

Dado el sistema de la Ec.(1), denominaremos *actividad instantánea local de orden n* de la variable  $x_i(t)$  al integrando  $a_i^{(n)}(t)$  de la Ec. (3) y llamaremos *actividad local* de orden  $n$  en el intervalo de tiempo  $[t_0, t_f]$  a su integral  $A_{i(t_0, t_f)}^{(n)}$ .

Definiremos además la *actividad instantánea global* de orden  $n$  del sistema de la Ec.(1)  $a_G(t)^{(n)}$  y la *actividad global*  $A_{G(t_0, t_f)}^{(n)}$  en el intervalo  $[t_0, t_f]$  según:

$$A_{G(t_0, t_f)}^{(n)} \triangleq \int_{t_0}^{t_f} a_G(\tau)^{(n)} d\tau \triangleq \int_{t_0}^{t_f} \max_i a_i(\tau)^{(n)} d\tau \quad (5)$$

### 3.2. RELACIÓN ENTRE LA ACTIVIDAD Y EL NÚMERO DE PASOS

La relación entre actividad y número de pasos en QSS puede deducirse a partir del siguiente resultado, cuya demostración se encuentra en [https://fceia.unr.edu.ar/~kofman/files/Dem\\_Teo\\_Cheb.pdf](https://fceia.unr.edu.ar/~kofman/files/Dem_Teo_Cheb.pdf):

**Teorema 1** *Dada una señal  $x_i(t)$  expresada por un polinomio de orden n, existe un polinomio  $q_i(t)$  de grado  $n-1$  que verifica la condición  $|q_i(t) - x_i(t)| \leq \Delta Q_i$  en el intervalo  $[t_0, t_0 + \Delta t]$  si y sólo si*

$$\Delta t \leq \frac{2^{\frac{2n-1}{n}} \Delta Q_i^{\frac{1}{n}}}{a_i^{(n)}(t_0)} \quad (6)$$

Donde  $a_i^{(n)}(t_0)$  es la actividad instantánea local de orden  $n$  de la señal  $x_i(t)$  en  $t = t_0$ .

De esta manera, en un método tipo QSS de orden  $n$ , el número de segmentos de  $q_i(t)$  necesarios para aproximar a  $x_i(t)$  sin desviarse más que  $\Delta Q_i$  se puede estimar a partir de la Ec.(6) como

$$k_{x_i[t_0, t_f]}^{(n)} \approx \frac{A_{x_i[t_0, t_f]}^{(n)}}{2^{\frac{2n-1}{n}} \cdot (\Delta Q_i)^{\frac{1}{n}}} \quad (7)$$

y el número de pasos totales en una simulación será mayor a:

$$k_{\text{QSS}[t_0, t_f]}^{(n)} \approx \sum_{i=1}^N k_{x_i[t_0, t_f]}^{(n)} \approx \sum_{i=1}^N \frac{A_{x_i[t_0, t_f]}^{(n)}}{2^{\frac{2n-1}{n}} \cdot (\Delta Q_i)^{\frac{1}{n}}} \quad (8)$$

Aplicando este razonamiento para un método clásico de paso variable que compara una fórmula de orden  $n-1$  con una de orden  $n$  (tal que la diferencia en cada variable sea menor que la tolerancia  $\Delta Q$ ), resulta

$$k_{\text{DT}[t_0, t_f]}^{(n)} \approx \frac{A_{G[t_0, t_f]}^{(n)}}{2^{\frac{2n-1}{n}} \cdot (\Delta Q)^{\frac{1}{n}}} \quad (9)$$

### 3.3. FACTOR DE HOMOGENEIDAD

Definimos el factor de homogeneidad de la actividad según:

$$H_{\mathbf{x}[t_0, t_f]}^{(n)} \triangleq \frac{\sum_{i=1}^N A_{x_i[t_0, t_f]}^{(n)}}{N \cdot A_{G[t_0, t_f]}^{(n)}} \quad (10)$$

Este factor resulta siempre  $1/n \leq H \leq 1$ . La condición  $H \approx 1$  implica que la actividad instantánea es similar en todas las variables (actividad homogénea). Por otro lado,  $H \approx 1/n$  implica que la actividad instantánea de todas las variables excepto de una es cercana a cero (actividad heterogénea).

Suponiendo que  $\Delta Q_i = \Delta Q$  y dividiendo las Ecs.(8) y (9), resulta  $H_{\mathbf{x}[t_0, t_f]}^{(n)} = k_{\text{QSS}[t_0, t_f]}^{(n)} / N k_{\text{DT}[t_0, t_f]}^{(n)}$ . Cada paso de un método clásico actualiza las  $N$  variables de estado mientras que cada paso de un método tipo QSS actualiza  $r_i \leq N$  variables (la variable que cambia más las derivadas que se ven afectadas por dicho cambio, lo cual depende de qué tan ralo sea el sistema). Por lo tanto, llamando  $r$  al numero medio de variables que afecta cada una de ellas, la condición  $H \cdot r < 1$  indicará que sería conveniente actualizar individualmente las variables de estado (QSS) mientras que  $H \cdot r > 1$  indicará lo contrario.

El análisis anterior muestra que cuando la solución es homogénea  $H \approx 1$  siempre convendrá usar métodos clásicos. Por otro lado, cuando la solución sea heterogénea, convendrá usar QSS siempre y cuando el factor  $r$  sea chico (es decir, que el sistema sea ralo).

## 4. EJEMPLO ILUSTRATIVO

Consideramos la discretización con el método de líneas de una ecuación de Advección-Difusión-Reacción:

$$\dot{u}_i(t) = -A \cdot \frac{u_i(t) - u_{i-1}(t)}{\Delta x} + D \cdot \frac{u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)}{\Delta x^2} + R \cdot (u_i(t)^2 - u_i(t)^3), \quad i = 1, \dots, N$$

con  $N = 10$ ,  $\Delta x = 1$ ,  $A = 1$  y con dos escenarios, uno dominado por la reacción (Esc.1:  $D = 0.1$  y  $R = 1000$ ) y otro por la difusión (Esc.2:  $D = 2$  y  $R = 0.1$ ). Las Figs. 1a y 1b ilustran las trayectorias en ambos escenarios.

Las actividades instantáneas locales y globales correspondientes de orden 2, calculadas según las Ecs. (3) y (5), se muestran en las Figs. 1c y 1d. Puede verse que en el primer caso la actividad global es siempre similar a una actividad local mientras las restantes son cercanas a cero, mientras que en el segundo caso las actividades locales son parejas. En consecuencia, el factor de homogeneidad calculado según la Ec.(10) es  $H_1 = 0.1091$  (cercano a  $1/n$ ) y  $H_2 = 0.561$  (más próximo a 1). Teniendo en cuenta que un cambio en el estado provoca cambios en  $r = 3$  derivadas, los productos  $H_1 \cdot r = 0.3279$  y  $H_2 \cdot r = 1.6827$  indican que conviene usar métodos tipo QSS en el primer escenario (Esc.1) y métodos clásicos en el segundo (Esc.2).

Esto fue corroborado simulando ambos escenarios con los métodos de LIQSS2 y una versión de paso variable de la regla trapezoidal para distintos valores de tolerancia. El número mínimo de pasos y actualizaciones según las Ecs. (8) y (9) y los valores observados en cada caso se reportan en la Tabla 1.

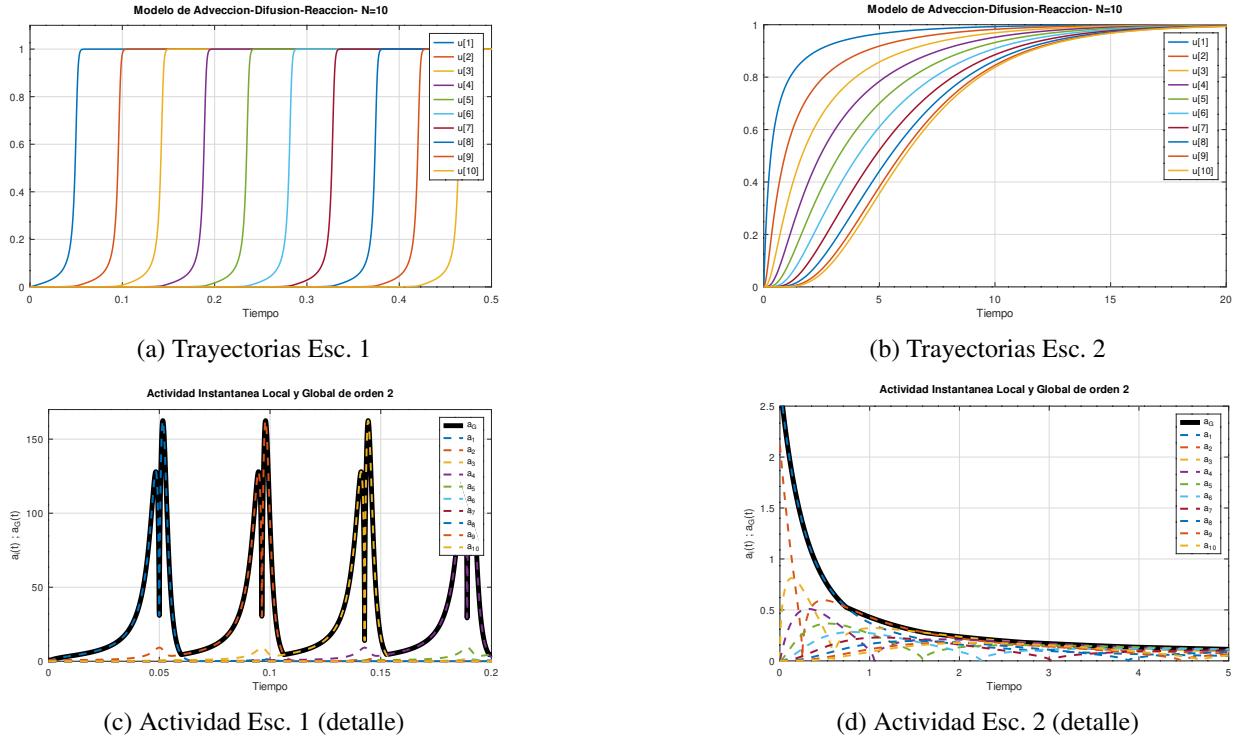


Figura 1: Trayectorias y actividades de cada escenario

Abs. Tol.	LIQSS2				Regla Trapezoidal			
	Pasos		Actualizaciones		Pasos		Actualizaciones	
	Mínimo Teórico	Real	Mínimo Teórico	Real	Mínimo Teórico	Real	Mínimo Teórico	Real
Esc. 1	1E-2	68	157	204	471	62	225	620
	1E-3	215	354	645	1062	196	628	1960
	1E-4	678	945	2034	2835	620	1870	6200
Esc. 2	1E-2	56	408	168	1224	10	37	100
	1E-3	177	619	531	1857	32	102	320
	1E-4	560	1084	1680	3252	100	305	1000

Tabla 1: Nro. mínimo teórico y real de pasos y actualizaciones requerido por diferentes métodos numéricos

## 5. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Definimos formalmente el concepto de homogeneidad de la actividad de las soluciones de una EDO, factor que permite establecer la conveniencia de usar métodos de integración clásicos o de tipo QSS. Mostramos además su uso en un ejemplo ilustrativo corroborando los resultados teóricos obtenidos.

A futuro resta extender el concepto para considerar la *actividad relativa* que permita acotar por debajo el número de pasos cuando se realiza control sobre el error relativo.

## REFERENCIAS

- [1] R. CASTRO AND E. KOFMAN, *Activity of order n in continuous systems*, Simulation, 91 (2015), pp. 337–348.
- [2] F. CELLIER AND E. KOFMAN, *Continuous System Simulation*, Springer, New York, 2006.
- [3] E. HAIRER, S. P. NØRSETT, AND G. WANNER, *Solving ordinary differential equations. I: Nonstiff problems*, Springer, 1993.
- [4] E. HAIRER AND G. WANNER, *Solving ordinary differential equations. II: Stiff and differential-algebraic problems*, Springer-Verlag, 1996.
- [5] E. KOFMAN, *A third order discrete event method for continuous system simulation*, Latin American applied research, 36 (2006), pp. 101–108.
- [6] E. KOFMAN AND S. JUNCO, *Quantized State Systems. A DEVS Approach for Continuous System Simulation*, Transactions of SCS, 18 (2001), pp. 123–132.
- [7] G. MIGONI, M. BORTOLOTTO, E. KOFMAN, AND F. E. CELLIER, *Linearly implicit quantization-based integration methods for stiff ordinary differential equations*, Simulation Modelling Practice and Theory, 35 (2013), pp. 118–136.