Задача Коши. Методы Рунге-Кутты. Жесткие задачи

Скалько Юрий Иванович
Цыбулин Иван

Задача Коши

Дано обыкновенное дифференциальное уравнение 1го порядка и начальное условие

$$\frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} = \mathbf{G}(t, \mathbf{y}(t))$$
$$\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$$

Требуется найти решение $\mathbf{y}(t)$ при $t \in [0, T]$

Методы Рунге-Кутты

Методы Рунге-Кутты относятся к *одношаговым методам*, то есть они позволяют по значению решения $\mathbf{u}_n$ вычислить значение в следующей точке $\mathbf{u}_{n+1}$.

Каждый шаг метода состоит из нескольких *стадий*, на которых вычисляются вспомогательные наклоны $\mathbf{k}$. Вычисление наклонов в специально подобранных промежуточных точках позволяет получить метод с высоким порядком аппроксимации.

Общая схема методов Рунге-Кутты

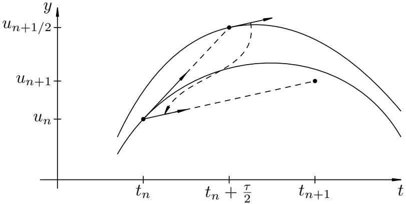
Каждый метод Рунге-Кутты характеризуется набором коэффициентов a_{ij}, b_j, c_i. Один шаг метода проводится по следующей схеме:

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{G}(t_n + c_1\tau, \mathbf{u}_n + \tau\sum_{j=1}^{s} a_{1j}\mathbf{k}_j)$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{k}_s = \mathbf{G}(t_n + c_s\tau, \mathbf{u}_n + \tau\sum_{j=1}^{s} a_{sj}\mathbf{k}_j)$$

$$\frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{\tau} = \sum_{j=1}^{s} b_j\mathbf{k}_j$$



$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{G}(t_n, \mathbf{u}_n)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{G}\left(t_n + \frac{\tau}{2}, \mathbf{u}_n + \frac{\tau}{2}\mathbf{k}_1\right)$$

$$\frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{\tau} = \mathbf{k}_2$$

Решения, полученные методами Рунге-Кутты

Ниже показаны решения задачи о движении тела в поле тяжести, рассчитанные различными методами Рунге-Кутты с автоматическим выбором длины шага по времени для обеспечения точности $\varepsilon = 10^{-3}$

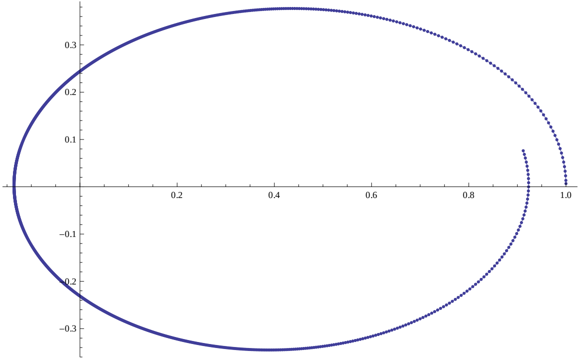


Рис. 1: Метод Эйлера, 1260 шагов

Решения, полученные методами Рунге-Кутты

Ниже показаны решения задачи о движении тела в поле тяжести, рассчитанные различными методами Рунге-Кутты с автоматическим выбором длины шага по времени для обеспечения точности $\varepsilon = 10^{-3}$

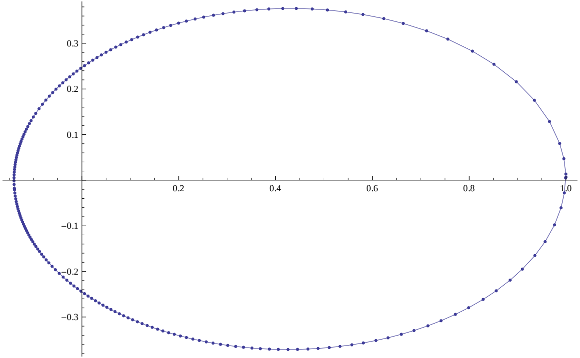


Рис. 1: Явный метод центральной точки, 190($\sim$ 380) шагов

Решения, полученные методами Рунге-Кутты

Ниже показаны решения задачи о движении тела в поле тяжести, рассчитанные различными методами Рунге-Кутты с автоматическим выбором длины шага по времени для обеспечения точности $\varepsilon = 10^{-3}$

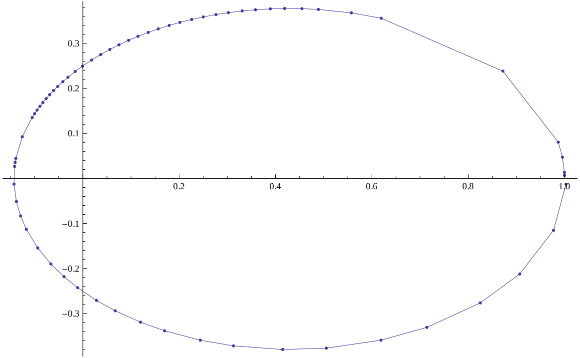


Рис. 1: Метод Рунге-Кутты 4-го порядка, 66($\sim$ 264) шагов

Таблица Бутчера

Коэффициенты a_{ij}, b_j, c_i удобно представлять в виде *таблицы Бутчера*

$$\begin{array}{c|cccc}
c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\
c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\
\vdots & & & \ddots & \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_s
\end{array}$$

Таблица Бутчера

Коэффициенты a_{ij}, b_j, c_i удобно представлять в виде *таблицы Бутчера*

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\ \vdots & & & \ddots & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_s \end{array}$$

Например, явному методу средней точки соответствует таблица

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

Явные, полуявные и неявные методы Рунге-Кутты

В зависимости от коэффициентов a_{ij} вычисления наклонов $\mathbf{k}_i$ могут происходить по-разному.

- Если матрица a_{ij} имеет ненулевые элементы ниже главной диагонали $(a_{ij} = 0, i \geq j)$, то метод называется *явным*. При этом все наклоны $\mathbf{k}_i$ вычисляются через предыдущие без необходимости решать уравнения.
- Если матрица a_{ij} имеет ненулевые элементы и на главной диагонали $(a_{ij} = 0, i > j)$, то метод называется *полуявным*. При этом все наклоны $\mathbf{k}_i$ вычисляются последовательно из уравнений.
- Иначе, метод называется *неявным*, и необходимо решать систему уравнений для всех $\mathbf{k}_i$ одновременно.

Разложение наклонов

Поскольку метод Рунге-Кутты определяется своими коэффициентами, можно сформулировать условия на коэффициенты метода, при котором он имеет определенный порядок аппроксимации. Найдем условия первого и второго порядков, для этого подставим $\mathbf{u}_n = [\mathbf{y}]_n$, где $\mathbf{y}(t)$ — решение задачи Коши:

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_i &= \mathbf{G}(t_n + c_i\tau, [\mathbf{y}]_n + \tau \textstyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\mathbf{k}_j) = \\
&= [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_t]_n + \tau \textstyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij}[\mathbf{G}_y]_n \mathbf{k}_j + O(\tau^2) = \\
&= [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_t]_n + \tau \textstyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij}[\mathbf{G}_y]_n \Big([\mathbf{G}]_n + O(\tau)\Big) + O(\tau^2) = \\
&= [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_t]_n + \tau \textstyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij}[\mathbf{G}_y]_n [\mathbf{G}]_n + O(\tau^2)
\end{aligned}$$

Условия первого и второго порядка

Выразим производные $\mathbf{y}'$ и $\mathbf{y}''$ из уравнения: $[\mathbf{y}']_n = [\mathbf{G}]_n, \qquad [\mathbf{y}''] = [\mathbf{G}_t + \mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_t]_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} [\mathbf{G}_y]_n [\mathbf{G}]_n + O(\tau^2)$$

$$\sum_{j=1}^{s} b_j k_j = \sum_{j=1}^{s} b_j [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_{j=1}^{s} b_j c_j [\mathbf{G}_t]_n + \tau \sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} [\mathbf{G}_y]_n [\mathbf{G}]_n$$

$$\frac{[\mathbf{y}]_{n+1} - [\mathbf{y}]_n}{\tau} = [\mathbf{G}]_n + \frac{\tau}{2}[\mathbf{G}_t]_n + \frac{\tau}{2}[\mathbf{G}_y]_n[\mathbf{G}]_n + O(\tau^2)$$

Условия первого и второго порядка

Выразим производные $\mathbf{y}'$ и $\mathbf{y}''$ из уравнения: $[\mathbf{y}']_n = [\mathbf{G}]_n, \qquad [\mathbf{y}''] = [\mathbf{G}_t + \mathbf{G}_y\mathbf{G}]_n$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_t]_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} [\mathbf{G}_y]_n [\mathbf{G}]_n + O(\tau^2)$$

$$\sum_{j=1}^{s} b_j k_j = \sum_{j=1}^{s} b_j [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_{j=1}^{s} b_j c_j [\mathbf{G}_t]_n + \tau \sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} [\mathbf{G}_y]_n [\mathbf{G}]_n$$

$$\frac{[\mathbf{y}]_{n+1} - [\mathbf{y}]_n}{\tau} = [\mathbf{G}]_n + \frac{\tau}{2}[\mathbf{G}_t]_n + \frac{\tau}{2}[\mathbf{G}_y]_n[\mathbf{G}]_n + O(\tau^2)$$

Условие 1-го порядка аппроксимации: $\sum\limits_{j=1}^{s} b_j = 1.$

Условия 2-го порядка аппроксимации: $\sum\limits_{j=1}^{s} b_j c_j = \sum\limits_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} = \dfrac{1}{2}.$

Барьеры Бутчера

Бутчер доказал несколько теорем о связи порядка аппроксимации и количества стадий у методов Рунге-Кутты. Явные методы с $s < 5$ стадиями могут иметь порядок не выше s, но после $s = 5$ стадий наступает, так называемый, *первый барьер Бутчера*, и порядок аппроксимации не превышает $s - 1$. При увеличении s возникают все новые барьеры, понижающие порядок аппроксимации.

Однако, для неявных методов ограничение не такое строгое. Например есть семейство методов (Гаусса), у которых порядок аппроксимации $2s$ при любом числе стадий.

Устойчивость

Если правая часть ОДУ $G(t, y)$ липшицева по y с константой L

$$\|\mathbf{G}(t, \mathbf{y}) - \mathbf{G}(t, \mathbf{v})\| \le L\|\mathbf{y} - \mathbf{v}\|,$$

то несложно показать, что константа устойчивости для методов Рунге-Кутты порядка $C \sim \exp\{O(L)T\}$. Следовательно, имеет место сходимость решения разностной задачи к решению дифференциальной задачи.

Но в случаях, когда $LT \gg 1$ константа устойчивости становится огромной. Вспомним, что ошибка сходимости связана с ошибкой аппроксимации соотношением

$$\varepsilon_{\text{сх}} = C\varepsilon_{\text{аппр}}(\tau).$$

Для того, чтобы обеспечить малую ошибку сходимости необходимо выбирать очень маленький шаг по времени τ.

Жесткие задачи

Жесткие системы ОДУ описывают, как правило, одновременно проходящие очень быстрые и очень медленные процессы. Например, в задачах химической кинетики бывают различия в скоростях реакций до 10^{15} раз.

Жесткие задачи

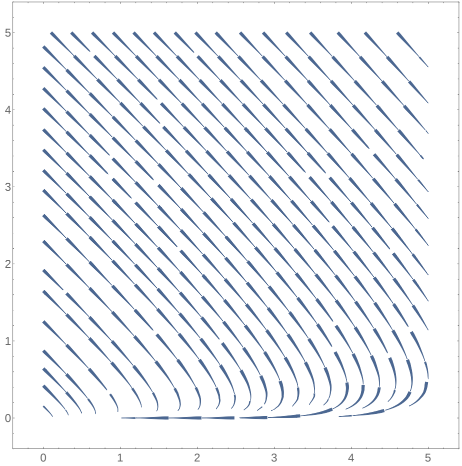
Жесткие системы ОДУ описывают, как правило, одновременно проходящие очень быстрые и очень медленные процессы. Например, в задачах химической кинетики бывают различия в скоростях реакций до 10^{15} раз. Оказывается, что быстро протекающие процессы, даже быстро закончившись, продолжают влиять на численное решение задачи, вынуждая рассчитывать решение с очень малым шагом по времени, где это, казалось бы, совершенно не требуется (решение довольно гладкое).

Поле решений жесткой задачи

Поле решений уравнения

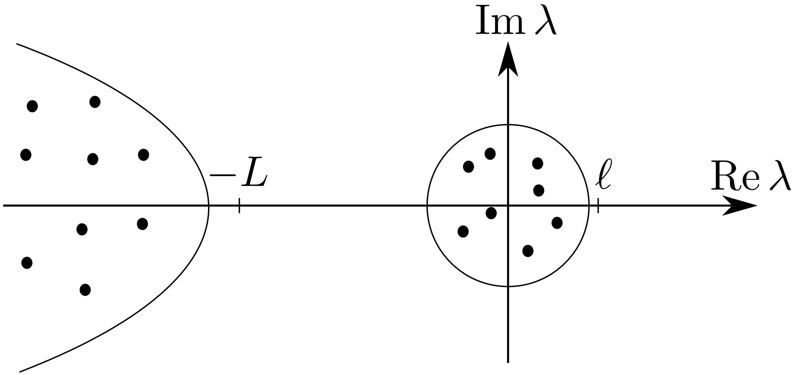
$$\dot{x} = -0.5x + 20y$$
$$\dot{y} = -20y$$

содержит резкие повороты — индикатор жесткости задачи.



Определение жесткой задачи

Можно дать следующее определение:
Жесткая задача — это такая задача, у которой собственные числа матрицы Якоби G_y разбиваются на две части — мягкую часть спектра $|\lambda_i| < \ell$ и жесткую часть спектра $\operatorname{Re}\Lambda_i < -L$, причем $\ell \ll L$. Величина L/ℓ называется показателем жесткости.



Модельное уравнение

Выяснить, как на жестких задачах себя ведет тот или иной метод, можно на модельном уравнении

$$y' = \lambda y, \quad \operatorname{Re} \lambda < 0$$

Все линейные численные методы для решения этого уравнения будут иметь вид

$$u_{n+1} = r(\lambda\tau)u_n,$$

где $r(z)$ — функция, зависящая только от метода. Эта функция называется *функцией устойчивости метода*. Если при данном сочетании λ и τ значение функции $r(\lambda\tau)$ по модулю больше единицы, решение будет экспоненциально возрастать, что противоречит реальному поведению решения при $\operatorname{Re} \lambda < 0$. Область комплексной плоскости $\mathbb{C}$, в которой $|r(z)| < 1$ называется *областью устойчивости метода*.

Функция и область устойчивости

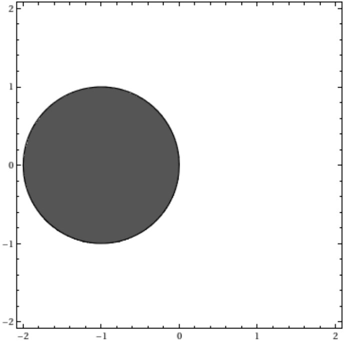
Если при данном τ вся жесткая часть спектра попадает в область устойчивости, она гарантированно не будет экспоненциально возрастать, и решать систему ОДУ можно только обращая внимание на мягкую часть спектра.

Для явного метода Эйлера

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = \lambda u_n$$

функция устойчивости

$$u_{n+1} = (1 + \tau\lambda)u_n = (1 + z)u_n$$
$$r(z) = 1 + z$$



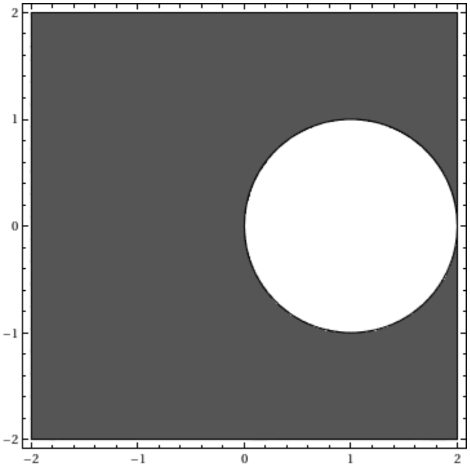
Область устойчивости

Для неявного метода Эйлера

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = \lambda u_{n+1}$$

функция устойчивости

$$u_{n+1} = \frac{u_n}{1 - \tau\lambda} = \frac{u_n}{1 - z}$$
$$r(z) = \frac{1}{1 - z}$$

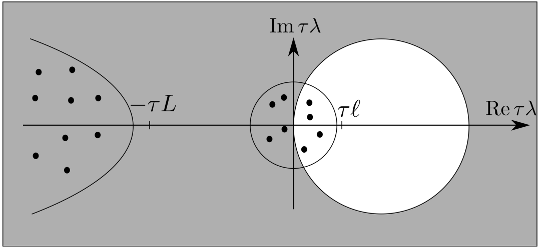


Допустимый шаг τ для жесткой задачи

Если шаг по времени τ таков, что все собственные числа Λ_i задачи из жесткой части спектра попадают в область устойчивости данного метода

$$|r(\tau\Lambda_i)| \leq 1,$$

то с таким шагом решать жесткую задачу можно.
Если это требование нарушить, жесткие компоненты решения начнут экспоненциально возрастать (хотя обязаны стремится к нулю!).



A- и L-устойчивость

По виду области устойчивости методы можно дополнительно классифицировать. Это позволяет выбирать метод, наиболее подходящий для конкретного вида жесткой части спектра задачи.

- A-устойчивость означает, что во всей полуплоскости $\operatorname{Re} z < 0$ метод устойчив, т.е. $|r(z)| < 1$. Такой меотд годится для любых жестких задач.
- $A(\alpha)$-устойчивость означает, что в конусе $|\operatorname{Im} z| < -\operatorname{tg}\alpha \operatorname{Re} z$ метод устойчив. A-устойчивость эквивалентна $A(90^\circ)$. Такой метод годится для задач, у который жесткий спектр прижат к действительной оси. Чем больше α, тем универсальнее метод.
- L-устойчивость означает, что $\lim_{z\to-\infty} r(z) = 0$. Это свойство говорит, что при большом шаге τ жесткая часть спектра стремится к нулю достаточно быстро. Эти методы хороши тем, что допускают интегрирование погранслоя с большим шагом. Не L-устойчивые методы осциллируют при выходе из погранслоя.

A- и L-устойчивые методы

Рис. 3: Решение жесткой задачи разными методами с ограничением шага в погранслое и без

A- и L-устойчивые методы

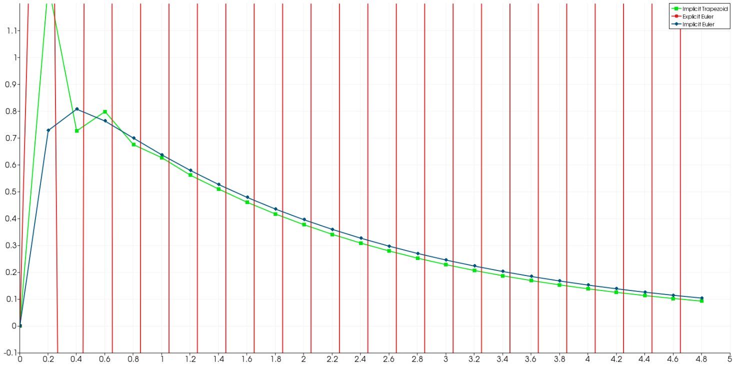


Рис. 3: Решение жесткой задачи разными методами с ограничением шага в погранслое и без

Функция устойчивости методов Рунге-Кутты

Для методов Рунге-Кутты функцию устойчивости можно вычислить по формуле

$$r(z) = \frac{\det(\mathbf{E} - z\mathbf{A} + z\mathbf{1}\mathbf{b}^T)}{\det(\mathbf{E} - z\mathbf{A})},$$

где $\mathbf{1}$ — вектор из единиц.

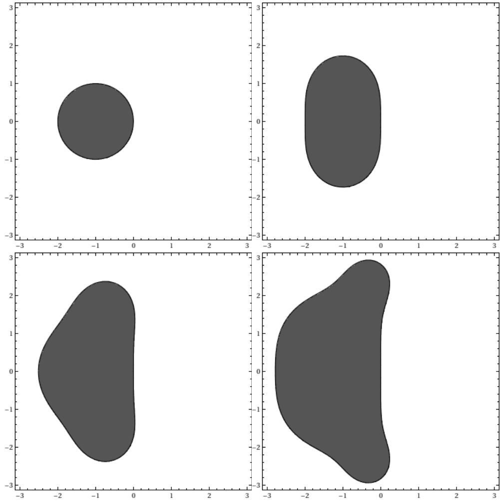
Функция устойчивости методов Рунге-Кутты

Для методов Рунге-Кутты функцию устойчивости можно вычислить по формуле

$$r(z) = \frac{\det(\mathbf{E} - z\mathbf{A} + z\mathbf{1}\mathbf{b}^T)}{\det(\mathbf{E} - z\mathbf{A})},$$

где $\mathbf{1}$ — вектор из единиц. Для случая явного метода, $r(z)$ является многочленом от z степени s (число стадий). Но также, $r(z)$ должен с точностью до $O(z^{p+1})$ совпадать с разложением e^z в ряд по z (аппроксимация порядка p). Если $s = p$, то $r(z)$ есть просто первые $s + 1$ членов ряда Тейлора функции e^z.

Области устойчивости методов Рунге-Кутты 1-4 порядка



Спасибо за внимание!

Цыбулин Иван
e-mail: tsybulin@crec.mipt.ru