

Задача Коши. Методы Рунге-Кутты. Жесткие задачи

Скалько Юрий Иванович
Цыбулин Иван

Задача Коши

Дано обыкновенное дифференциальное уравнение 1го порядка и начальное условие

$$\begin{aligned}\frac{dy(t)}{dt} &= \mathbf{G}(t, y(t)) \\ y(0) &= y_0\end{aligned}$$

Требуется найти решение $y(t)$ 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

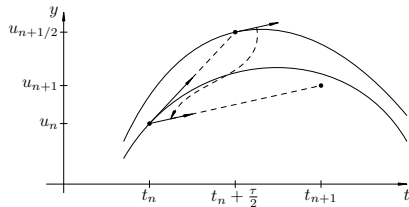
Каждый метод Рунге-Кутты характеризуется набором коэффициентов a_{ij} , b_j , c_i . Один шаг метода проводится по следующей схеме:

$$k_1 = G(t_n + c_1\tau, u_n + \tau \sum_{j=1}^s a_{1j}k_j)$$

$$\vdots$$

$$k_s = G(t_n + c_s\tau, u_n + \tau \sum_{j=1}^s a_{sj}k_j)$$

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = \sum_{j=1}^s b_j k_j$$



$$k_1 = G(t_n, u_n)$$

$$k_2 = G\left(t_n + \frac{\tau}{2}, u_n + \frac{\tau}{2}k_1\right)$$

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = k_2$$

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 $\varepsilon = 10^{-3}$

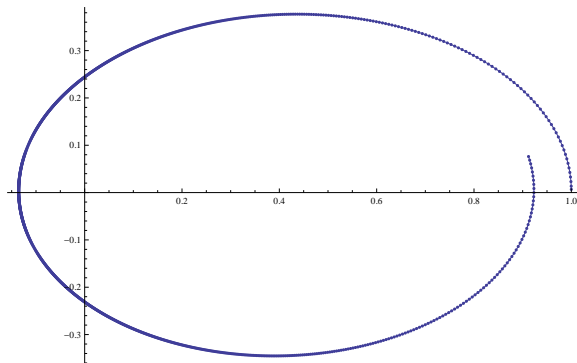


Рис. 1: Метод Эйлера, 1260 шагов

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 $\varepsilon = 10^{-3}$

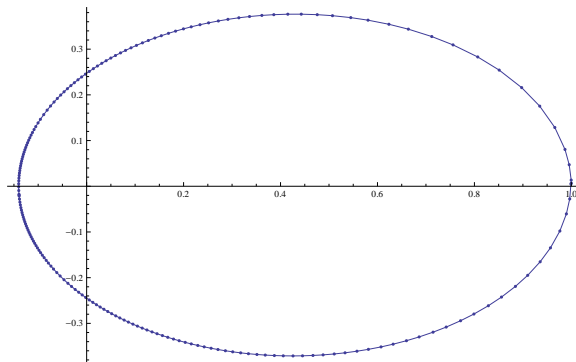


Рис. 1: Явный метод центральной точки, 190(~ 380) шагов

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 $\varepsilon = 10^{-3}$

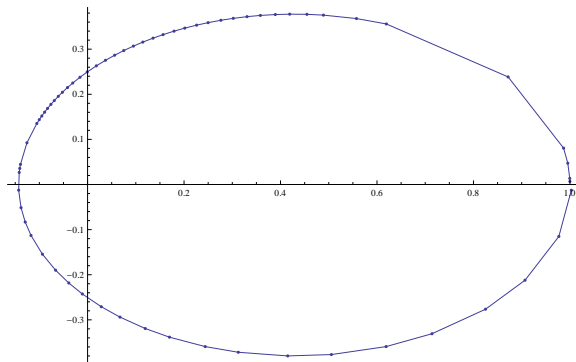


Рис. 1: Метод Рунге-Кутты 4-го порядка, 66(~ 264) шагов

Таблица Бутчера

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

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}
	b_1	b_2	\dots	b_s

Таблица Бутчера

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

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}
	b_1	b_2	\dots	b_s

Например, явному методу средней точки соответствует таблица

0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
	0	1

Явные, полуявные и неявные методы Рунге-Кутты

В зависимости от коэффициентов a_{ij} вычисления наклонов 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 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 k_i вычисляются последовательно из уравнений.
- Иначе, метод называется *неявным*, и необходимо решать систему уравнений для всех 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:

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

Условия первого и второго порядка

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

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

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

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

Условия первого и второго порядка

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

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

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

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

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

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

Автономизация

Каждой неавтономной задаче Коши

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= \mathbf{g}(t, \mathbf{y}) \\ \mathbf{y}|_{t=0} &= \mathbf{y}_0\end{aligned}$$

можно поставить в соответствие эквивалентную автономную задачу

$$\begin{aligned}\frac{dt}{ds} &= 1 \\ \frac{dy}{ds} &= \mathbf{g}(t, \mathbf{y}) \\ t|_{s=0} &= 0 \\ \mathbf{y}|_{s=0} &= \mathbf{y}_0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{Y}}{ds} &= \mathbf{G}(\mathbf{Y}) \\ \mathbf{Y}|_{s=0} &= \mathbf{Y}_0 \\ \mathbf{Y} &= (t, \mathbf{y})^T \\ \mathbf{G} &= (1, \mathbf{g})^T.\end{aligned}$$

Правило Кутты

Применим метод Рунге-Кутты к автономной системе (заметим, что коэффициенты c_i для автономной системы не используются)

$$\frac{d\mathbf{Y}}{ds} = \mathbf{G}(\mathbf{Y})$$
$$\mathbf{Y}|_{s=0} = \mathbf{Y}_0.$$

Наклоны вычисляются по упрощенным формулам (без явного времени)

$$\mathbf{K}_i = \mathbf{G}(\mathbf{U}_n + \tau \sum_j a_{ij} \mathbf{K}_j) = \left(\mathbf{g}(\mathbf{U}_n + \tau \sum_j a_{ij} \mathbf{K}_j) \right) \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{k}_j \end{pmatrix}$$

Заметим, что первая компонента всех \mathbf{K}_i всегда равна 1.

$$\mathbf{U}_n + \tau \sum_j a_{ij} \mathbf{K}_i = \begin{pmatrix} t_n + \tau \sum_j a_{ij} \\ \mathbf{u}_n + \tau \sum_j a_{ij} \mathbf{k}_j \end{pmatrix}$$

Правило Кутты

В результате применения метода Рунге-Кутты к автономной системе

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{Y}}{ds} &= \mathbf{G}(\mathbf{Y}) \\ \mathbf{Y}|_{s=0} &= \mathbf{Y}_0.\end{aligned}$$

получаются формулы, аналогичные методу Рунге-Кутты для системы

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= \mathbf{g}(t, \mathbf{y}) \\ \mathbf{y}|_{t=0} &= \mathbf{y}_0.\end{aligned}$$

с тем отличием, что вместо коэффициентов c_i в нем стоят величины $\sum_j a_{ij}$. Получается, что если имеется метод Рунге-Кутты, имеющий p -й порядок аппроксимации на автономных системах уравнений, универсальный метод Рунге-Кутты того же порядка получается из него, если положить $c_i = \sum_j a_{ij}$. Последнее условие называется правилом Кутты.

Аппроксимация высших порядков

Намного проще выводить условия порядка для автономных систем, так как в этом случае отсутствуют частные производные по времени.

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_i = \mathbf{G}([\mathbf{y}]_n + \tau \sum_j a_{ij} \mathbf{k}_j) &= [\mathbf{G}]_n + \tau [\mathbf{G}_y]_n \sum_j a_{ij} \mathbf{k}_j + \frac{\tau^2}{2} [\mathbf{G}_{yy}]_n \sum_j a_{ij} \mathbf{k}_j \sum_\ell a_{i\ell} \mathbf{k}_\ell + \\ &+ \frac{\tau^3}{6} [\mathbf{G}_{yyy}]_n \sum_j a_{ij} \mathbf{k}_j \sum_\ell a_{i\ell} \mathbf{k}_\ell \sum_m a_{im} \mathbf{k}_m + O(\tau^4). \end{aligned}$$

Запись $[\mathbf{G}_{yyy}]\xi\eta\zeta$ следует понимать как свертку

$$[\mathbf{G}_{yyy}]\xi\eta\zeta = \sum_{j,\ell,m} \frac{\partial^3 G_i}{\partial y_j \partial y_\ell \partial y_m} \xi_j \eta_\ell \zeta_m.$$

В общем случае, за производной порядка q следует q векторов, с которой она сворачивается. Из-за равенства смешанных производных, порядок векторов не важен.

Аппроксимация высших порядков

Из разложения до порядка $O(\tau^4)$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y] \mathbf{k}_j + \frac{\tau^2}{2} \sum_{j\ell} a_{ij} a_{i\ell} [\mathbf{G}_{yy}] \mathbf{k}_j \mathbf{k}_\ell + \frac{\tau^3}{6} \sum_{j\ell m} a_{ij} a_{i\ell} a_{im} [\mathbf{G}_{yyy}] \mathbf{k}_j \mathbf{k}_\ell \mathbf{k}_m + O(\tau^4).$$

отбрасыванием степеней можно получить более грубые разложения

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y] \mathbf{k}_j + \frac{\tau^2}{2} \sum_{j\ell} a_{ij} a_{i\ell} [\mathbf{G}_{yy}] \mathbf{k}_j \mathbf{k}_\ell + O(\tau^3) \quad (1)$$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y] \mathbf{k}_j + O(\tau^2) \quad (2)$$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + O(\tau) \quad (3)$$

Подставим (3) в (2):

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y]_n ([\mathbf{G}]_n + O(\tau)) + O(\tau^2) = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + O(\tau^2)$$

Аппроксимация высших порядков

Постепенно избавляемся от \mathbf{k}_i в правой части разложений

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + O(\tau) \quad (4)$$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + O(\tau^2) \quad (5)$$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y]_n \mathbf{k}_j + \frac{\tau^2}{2} \sum_{j\ell} a_{ij} a_{i\ell} [\mathbf{G}_{yy}]_n \mathbf{k}_j \mathbf{k}_\ell + O(\tau^3) \quad (6)$$

В произведении $[\mathbf{G}_{yy}]_n \mathbf{k}_j \mathbf{k}_\ell$ из (6) величины \mathbf{k}_j и \mathbf{k}_ℓ могут быть взяты с погрешностью $O(\tau)$, так как умножаются на τ^2 , а величина $[\mathbf{G}_y]_n \mathbf{k}_j$ требует значения \mathbf{k}_j с точностью до $O(\tau^2)$ так как умножается всего лишь на первую степень τ .

Аппроксимация высших порядков

Постепенно избавляемся от \mathbf{k}_i в правой части разложений. Величины вида $\sum_j a_{ij}$ сразу для краткости заменим на c_i :

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + O(\tau)$$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + O(\tau^2) = [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + O(\tau^2)$$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y]_n \mathbf{k}_j + \frac{\tau^2}{2} \sum_{j\ell} a_{ij} a_{i\ell} [\mathbf{G}_{yy}]_n \mathbf{k}_j \mathbf{k}_\ell + O(\tau^3) = [\mathbf{G}]_n +$$

$$\tau \sum_j a_{ij} [\mathbf{G}_y]_n ([\mathbf{G}]_n + \tau c_j [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + O(\tau^2)) + \frac{\tau^2}{2} \sum_{j\ell} a_{ij} a_{i\ell} [\mathbf{G}_{yy}]_n ([\mathbf{G}]_n + O(\tau)) ([\mathbf{G}]_n + O(\tau)) + O(\tau^3) =$$

$$= [\mathbf{G}]_n + c_i \tau [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \tau^2 \sum_j a_{ij} c_j [\mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \frac{\tau^2 c_i^2}{2} [\mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + O(\tau^3)$$

Аппроксимация высших порядков

На данный момент получены разложения \mathbf{k}_i до третьего порядка:

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + O(\tau)$$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + O(\tau^2)$$

$$\mathbf{k}_i = [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \tau^2 \sum_j a_{ij} c_j [\mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \frac{\tau^2 c_i^2}{2} [\mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + O(\tau^3)$$

Проделявая аналогичные подстановки в разложения четвертого порядка, получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_i = & [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \tau^2 \sum_j a_{ij} c_j [\mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \frac{\tau^2 c_i^2}{2} [\mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + \tau^3 \sum_{j\ell} a_{ij} a_{j\ell} c_\ell [\mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \\ & + \frac{\tau^3}{2} \sum_j a_{ij} c_j^2 [\mathbf{G}_y \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + \tau^3 c_i \sum_j a_{ij} c_j [\mathbf{G}_{yy} \mathbf{G}_y \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + \frac{\tau^3}{6} c_i^3 [\mathbf{G}_{yyy} \mathbf{G} \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + O(\tau^4). \end{aligned}$$

В последнем выражении учтено, что $[\mathbf{G}_{yy}(\mathbf{G}_y \mathbf{G}) \mathbf{G}]_n = [\mathbf{G}_{yy} \mathbf{G}(\mathbf{G}_y \mathbf{G})]_n$ из-за симметрии \mathbf{G}_{yy} .

Аппроксимация высших порядков

В выражении

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_i = & [\mathbf{G}]_n + \tau c_i [\mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \tau^2 \sum_j a_{ij} c_j [\mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \frac{\tau^2 c_i^2}{2} [\mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + \tau^3 \sum_{j\ell} a_{ij} a_{j\ell} c_\ell [\mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}]_n + \\ & + \frac{\tau^3}{2} \sum_j a_{ij} c_j^2 [\mathbf{G}_y \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + \tau^3 c_i \sum_j a_{ij} c_j [\mathbf{G}_{yy} \mathbf{G}_y \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + \frac{\tau^3}{6} c_i^3 [\mathbf{G}_{yyy} \mathbf{G} \mathbf{G} \mathbf{G}]_n + O(\tau^4). \end{aligned}$$

имеются 8 разных произведений, соержащих \mathbf{G} и ее производные. Соберем коэффициенты перед ними в таблицу:

	\mathbf{G}	$\tau \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^2 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^2 \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G}_y \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_{yyy} \mathbf{G} \mathbf{G} \mathbf{G}$
$\sum_i b_i \mathbf{k}_i$	$\sum_i b_i$	$\sum_i b_i c_i$	$\sum_{ij} b_i a_{ij} c_j$	$\sum_i b_i \frac{c_i^2}{2}$	$\sum_{ij\ell} b_i a_{ij} a_{j\ell} c_\ell$	$\sum_j b_i a_{ij} \frac{c_j^2}{2}$	$\sum_{ij} b_i c_i a_{ij} c_j$	$\sum_i b_i \frac{c_i^3}{6}$

Аппроксимация высших порядков

	\mathbf{G}	$\tau \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^2 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^2 \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G}_y \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_{yyy} \mathbf{G} \mathbf{G} \mathbf{G}$
$\sum_i b_i \mathbf{k}_i$	$\sum_i b_i$	$\sum_i b_i c_i$	$\sum_{ij} b_i a_{ij} c_j$	$\sum_i b_i \frac{c_i^2}{2}$	$\sum_{ij\ell} b_i a_{ij} a_{j\ell} c_\ell$	$\sum_j b_i a_{ij} \frac{c_j^2}{2}$	$\sum_{ij} b_i c_i a_{ij} c_j$	$\sum_i b_i \frac{c_i^3}{6}$

Разложим аналогично $\frac{[\mathbf{y}]_{n+1} - [\mathbf{y}]_n}{\tau}$:

$$\frac{[\mathbf{y}]_{n+1} - [\mathbf{y}]_n}{\tau} = [\mathbf{y}']_n + \frac{\tau}{2} [\mathbf{y}'']_n + \frac{\tau^2}{6} [\mathbf{y}''']_n + \frac{\tau^3}{24} [\mathbf{y}^{IV}]_n + O(\tau^4)$$

и учтем, что

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{G}(\mathbf{y}(t)) = \mathbf{G}$$

$$\mathbf{y}''(t) = \frac{d}{dt} \mathbf{G}(\mathbf{y}(t)) = \mathbf{G}_y \mathbf{y}'(t) = \mathbf{G}_y \mathbf{G}$$

$$\mathbf{y}'''(t) = (\mathbf{G}_y \mathbf{G})' = \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G} + \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}$$

$$\mathbf{y}^{IV}(t) = (\mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G} + \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G})' = \mathbf{G}_{yyy} \mathbf{G} \mathbf{G} \mathbf{G} + 3 \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G}_y \mathbf{G} \mathbf{G} + \mathbf{G}_y \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G} + \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}$$

Аппроксимация высших порядков

Допишем в таблицу коэффициенты разложения $\frac{[y]_{n+1} - [y]_n}{\tau}$

	G	$\tau \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^2 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^2 \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}_y \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_y \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_{yy} \mathbf{G}_y \mathbf{G} \mathbf{G}$	$\tau^3 \mathbf{G}_{yyy} \mathbf{G} \mathbf{G} \mathbf{G}$
$\frac{\sum_i b_i \mathbf{k}_i}{\frac{[y]_{n+1} - [y]_n}{\tau}}$	$\sum_i b_i$ 1	$\sum_i b_i c_i$ $\frac{1}{2}$	$\sum_{ij} b_i a_{ij} c_j$ $\frac{1}{6}$	$\sum_i b_i \frac{c_i^2}{2}$ $\frac{1}{6}$	$\sum_{ij\ell} b_i a_{ij} a_{j\ell} c_\ell$ $\frac{1}{24}$	$\sum_j b_i a_{ij} \frac{c_j^2}{2}$ $\frac{1}{24}$	$\sum_{ij} b_i c_i a_{ij} c_j$ $\frac{3}{24}$	$\sum_i b_i \frac{c_i^3}{6}$ $\frac{1}{24}$

Из этой таблицы можно получить условия аппроксимации вплоть до четвертого порядка. Для этого необходимо приравнять выражения во второй строке со значениями третьей. Для аппроксимации порядка p нужно оставить только столбцы с τ^q где $q < p$.

$O(\tau)$	$\sum_i b_i = 1$	$O(\tau^4)$	$\sum_{ij\ell} b_i a_{ij} a_{j\ell} c_\ell = 1/24$
$O(\tau^2)$	$\sum_i b_i c_i = 1/2$	$O(\tau^4)$	$\sum_{ij} b_i a_{ij} c_j^2 = 1/12$
$O(\tau^3)$	$\sum_{ij} b_i a_{ij} c_j = 1/6$	$O(\tau^4)$	$\sum_{ij} b_i c_i a_{ij} c_j = 1/8$
$O(\tau^3)$	$\sum_i b_i c_i^2 = 1/3$	$O(\tau^4)$	$\sum_i b_i c_i^3 = 1/4$

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

$$\|G(t, y) - G(t, v)\| \leq L\|y - v\|,$$

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).

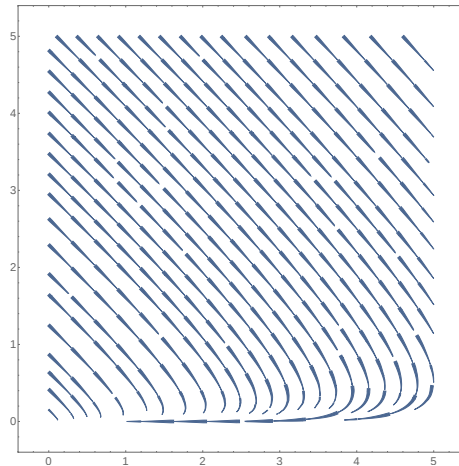
Поле решений жесткой задачи

Поле решений уравнения

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

$$\dot{y} = -20y$$

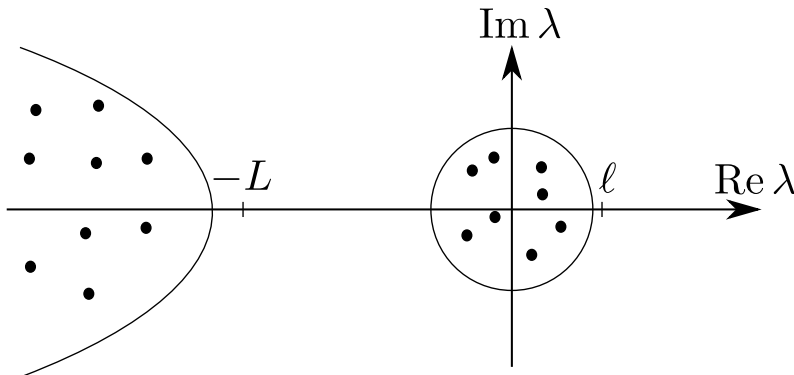
содержит резкие повороты — индикатор жесткости задачи.



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.

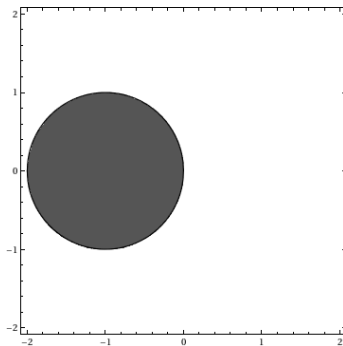
Для явного метода Эйлера

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

функция устойчивости

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

$$r(z) = 1 + z$$



Область устойчивости

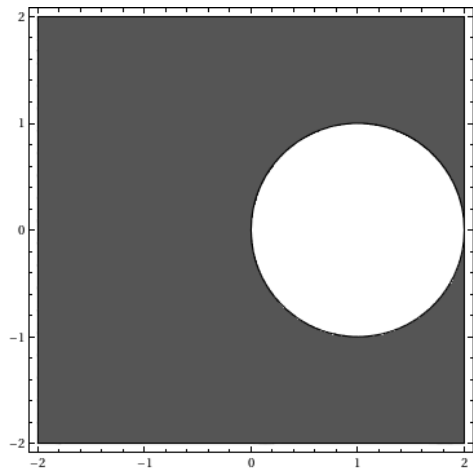
Для неявного метода Эйлера

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

функция устойчивости

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

$$r(z) = \frac{1}{1 - z}$$



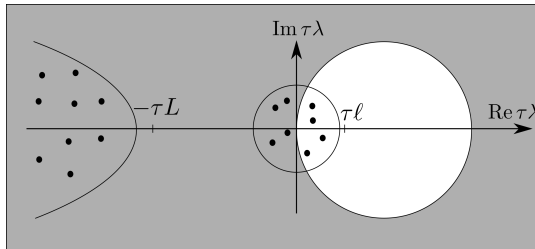
Допустимый шаг τ для жесткой задачи

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 стремиться 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 метод 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 которых жесткий спектр прижат к действительной оси. Чем больше α , тем универсальнее метод.
- L-устойчивость означает, что $\lim_{z \rightarrow -\infty} r(z) = 0$. 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 (красный — не A-устойчивый явный метод Эйлера, зеленый — A-, но не L-устойчивый неявный метод средней точки, синий — A- и L-устойчивый неявный метод Эйлера)

A- и L-устойчивые методы

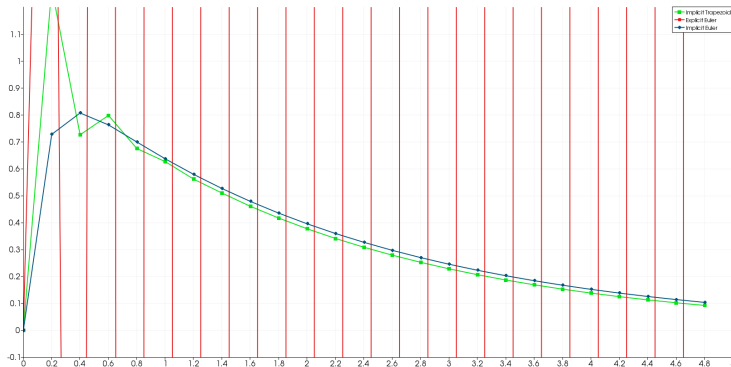


Рис. 3: Решение жесткой задачи разными методами с большим шагом (красный — не A-устойчивый явный метод Эйлера, зеленый — A-, но не L-устойчивый неявный метод средней точки, синий — A- и L-устойчивый неявный метод Эйлера)

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.

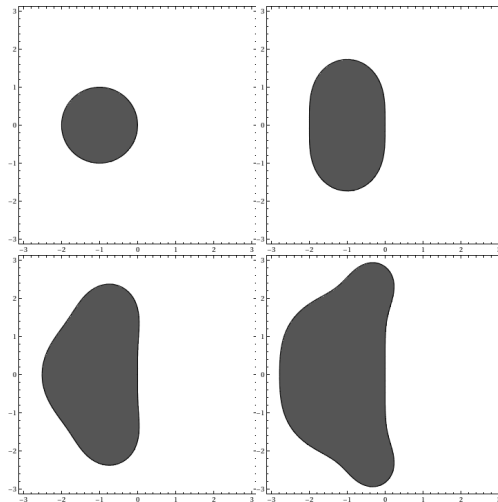
Функция устойчивости методов Рунге-Кутты

Для методов Рунге-Кутты функцию устойчивости можно вычислить по формуле

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

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@cres.mipt.ru