Задача Коши. Методы Рунге-Кутты. Жесткие задачи

Скалько Юрий Иванович
Цыбулин Иван

Задача Коши

Дано обыкновенное дифференциальное уравнение 1го порядка и начальное условие

$$\frac{dy(t)}{dt} = G(t, y(t))$$
$$y(0) = y_0$$

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 u_n вычислить значение в следующей точке u_{n+1}.
Каждый шаг метода состоит из нескольких *стадий*, на которых вычисляются вспомогательные наклоны k. Вычисление наклонов в специально подобранных промежуточных точках позволяет получить метод с высоким порядком аппроксимации.

Методы Рунге-Кутты

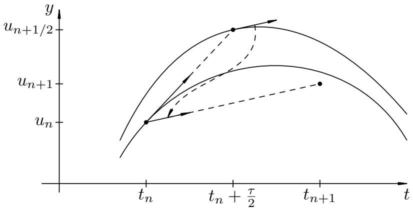
Каждый метод Рунге-Кутты характеризуется набором коэффициентов a_{ij}, b_j, c_i. Один шаг метода проводится по следующей схеме:

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

$$\vdots$$

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

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



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

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

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

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 $\varepsilon = 10^{-3}$

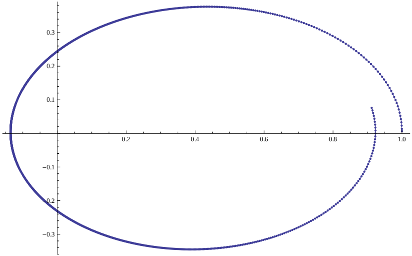


Рис. 1: Метод Эйлера, 1260 шагов

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 $\varepsilon = 10^{-3}$

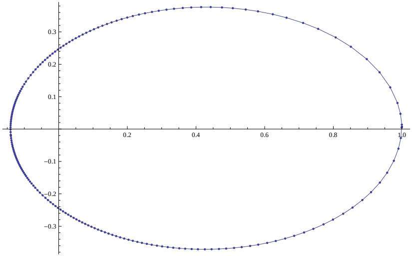


Рис. 1: Явный метод центральной точки, 190($\sim$ 380) шагов

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 $\varepsilon = 10^{-3}$

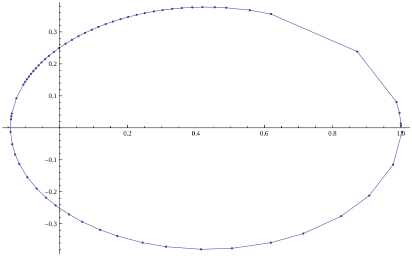


Рис. 1: Метод Рунге-Кутты 4-го порядка, 66($\sim$ 264) шагов

Таблица Бутчера

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

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

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 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.

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 $u_n = [y]_n$, где $y(t)$ — решение задачи Коши:

$$\begin{aligned}
k_i &= G(t_n + c_i\tau, [y]_n + \tau \textstyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j) = \\
&= [G]_n + \tau c_i [G_t]_n + \tau \textstyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij} [G_y]_n k_j + O(\tau^2) = \\
&= [G]_n + \tau c_i [G_t]_n + \tau \textstyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij} [G_y]_n \Big([G]_n + O(\tau)\Big) + O(\tau^2) = \\
&= [G]_n + \tau c_i [G_t]_n + \tau \textstyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij} [G_y]_n [G]_n + O(\tau^2)
\end{aligned}$$

Аппроксимация

$$k_i = [G]_n + \tau c_i [G_t]_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} [G_y]_n [G]_n + O(\tau^2)$$

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

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

Аппроксимация

$$k_i = [G]_n + \tau c_i [G_t]_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} [G_y]_n [G]_n + O(\tau^2)$$

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

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

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

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

Аппроксимация

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. Вспоминая, что ошибка сходимости связана с ошибкой аппроксимации

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

единственный способом получить приемлимую точность — сделать ошибку аппроксимации очень маленькой, то есть сильно уменьшить τ.

Жесткие задачи

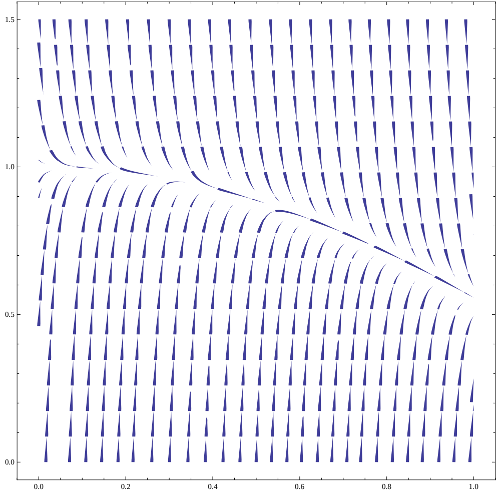
Жесткие системы ОДУ описывают, как правило, одновременно проходящие очень быстрые и очень медленные процессы. Например, в задачах химической кинетики бывают различия в скоростях реакций до 10^{15} раз.

Жесткие 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

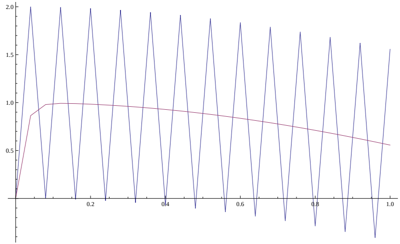
$$y' = -50(y + \cos x)$$



Численное решение жесткой задачи

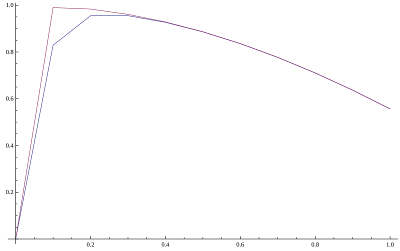
Явный метод Эйлера при $\tau = 0.04$

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = -50(u_n + \cos t_n)$$



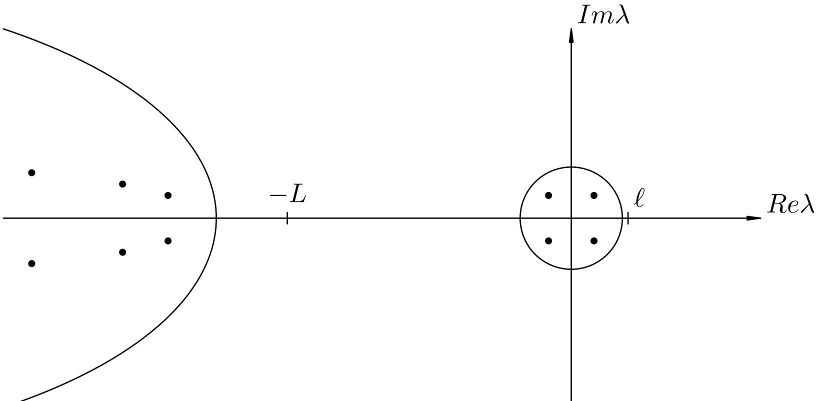
Неявный метод Эйлера при $\tau = 0.1$

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = -50(u_{n+1} + \cos t_{n+1})$$



Жесткая задача

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 $\mathrm{Re}\,\Lambda_i < -L$, причем $\ell \ll L$



Функция устойчивости

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

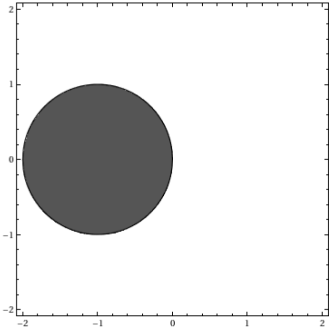
$$u_{n+1} = r(\lambda\tau)u_n,$$

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 функция устойчивости

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

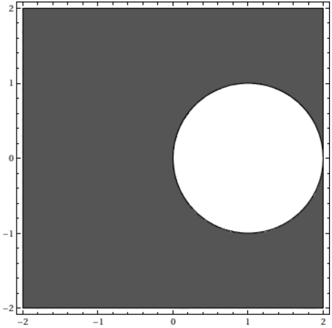


Функция и область устойчивости

Для неявного метода Эйлера функция устойчивости

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

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



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. $|r(z)| < 1$.
- $A(\alpha)$-устойчивость означает, что в конусе $|\operatorname{Im} z| < -\operatorname{tg}\alpha \operatorname{Re} z$ метод устойчив. A-устойчивость эквивалентна $A(90^\circ)$
- 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.

Функция устойчивости методов Рунге-Кутты

Для методов Рунге-Кутты функцию устойчивости можно вычислить по формуле

$$r(z) = \frac{\det(E - zA + zeb^T)}{\det(E - zA)},$$

где e — единичный вектор.

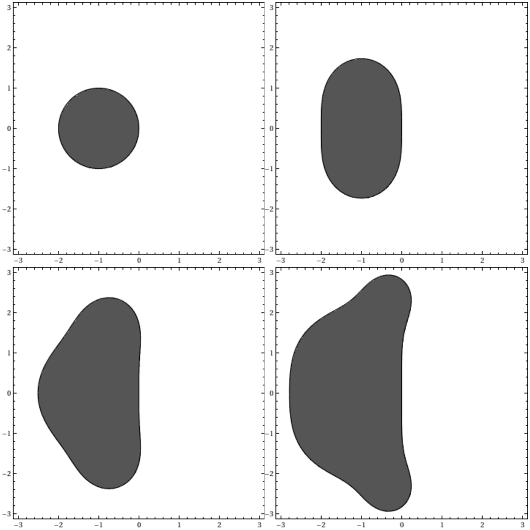
Функция устойчивости методов Рунге-Кутты

Для методов Рунге-Кутты функцию устойчивости можно вычислить по формуле

$$r(z) = \frac{\det(E - zA + zeb^T)}{\det(E - zA)},$$

где e — единичный вектор. 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!

tsybulin@crec.mipt.com