Решение обыкновенных дифференциальных уравнений

Часть 3

Задача Коши. Жесткие задачи

К.ф.-м.н. Завьялова Наталья Александровна

natalia.zavyalova@gmail.com

Жесткие задачи

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

$$u(0) = u_0$$

- Климатические задачи
- Процессе в реакторе
- Химические реакции

1) $\tau \left\| \frac{\partial f}{\partial u} \right\| \leq 2$ – явные методы

2) Во многих задачах быстрый процесс определяет только начальный (пограничный) слой => нужны неявные схемы

Пример: $u' = au + \frac{1}{\varepsilon} v \quad u(0) = u_0 \quad a \sim O(1)$

$v' = -\frac{1}{\varepsilon} v \quad v(0) = v_0 \quad \varepsilon \ll 1$

Решение: $u(t) = u_0 e^{at} + \frac{v_0}{1 + a\varepsilon}(e^{at} - e^{-\frac{t}{\varepsilon}}) \quad v(t) = v_0 e^{-t/\varepsilon}$

Пример: $u' = 998u + 1998v \quad u(0) = 1$

$v' = -999u - 1999v \quad v(0) = 1$

Решение: $u(t) = 4e^{-t} - 3e^{-1000t}$

$v(t) = -2e^{-t} + 3e^{-1000t}$

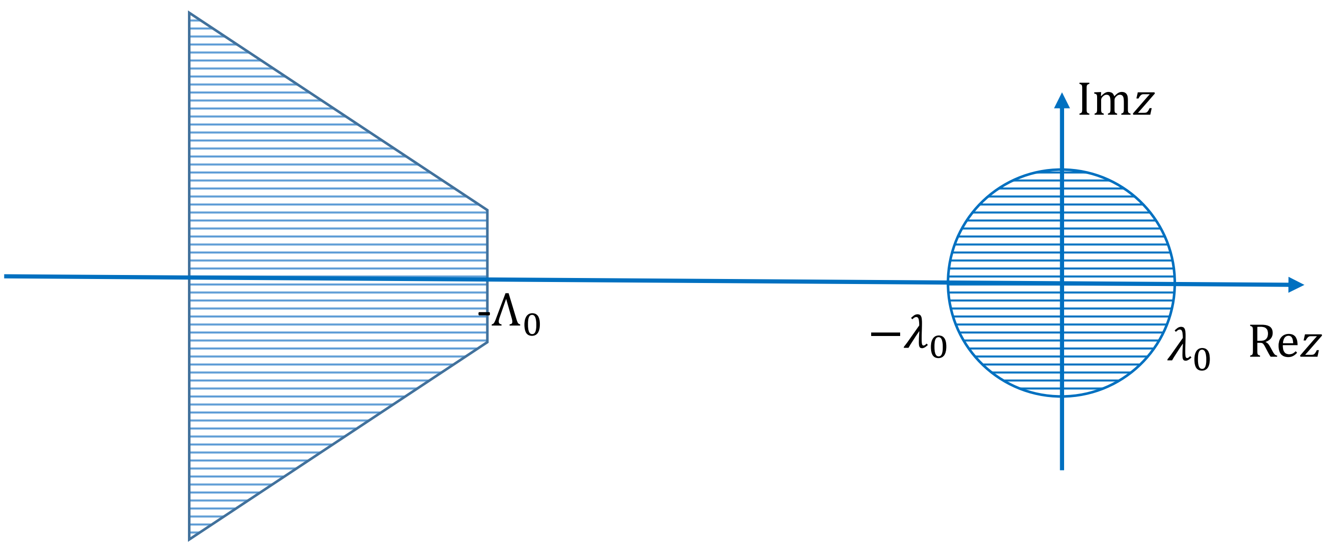
Жесткие задачи

Опр: Система дифференциальных уравнений $u' = f(t, u)$ называется жесткой, если спектр матрицы Якоби $J = \frac{\partial f}{\partial u}$ можно разделить на 2 части:

1) Жесткий спектр $|\mathrm{Re}\lambda_i| \leq \Lambda_0$, $|\mathrm{Im}\lambda_i| \leq |\mathrm{Re}\lambda_i|$,

2) Мягкий спектр $|\lambda_i| \leq \lambda_0$,

$\Lambda_0 \gg \lambda_0$ $\qquad \frac{\Lambda_0}{\lambda_0}$ - показатель жесткости системы



Определения устойчивости

Опр: Разностная схема называется абсолютно устойчивой в заданной точке $z = \lambda\tau, z \in \mathbb{C}$ если функция устойчивости $|R(z)| \leq 1$

Опр: Совокупность всех точек $z \in \mathbb{C}$ для которых $|R(z)| \leq 1$ называется областью устойчивости

Рассмотрим уравнение Далквиста

$$u' = \lambda u$$

$$[u^{n+1}] = e^z[u^n] \Rightarrow |[u^{n+1}]| \leq |[u^n]|$$

$$|e^z| \leq 1$$

Опр: Если область устойчивости разностной схемы ($R(z) \leq 1$) включает в себя левую полуплоскость, то такая разностная схема называется А-устойчивой

Опр: Разностная схема называется называется L-устойчивой, если она A-устойчива и $|R(z)| \to 0$ при $z \to -\infty$

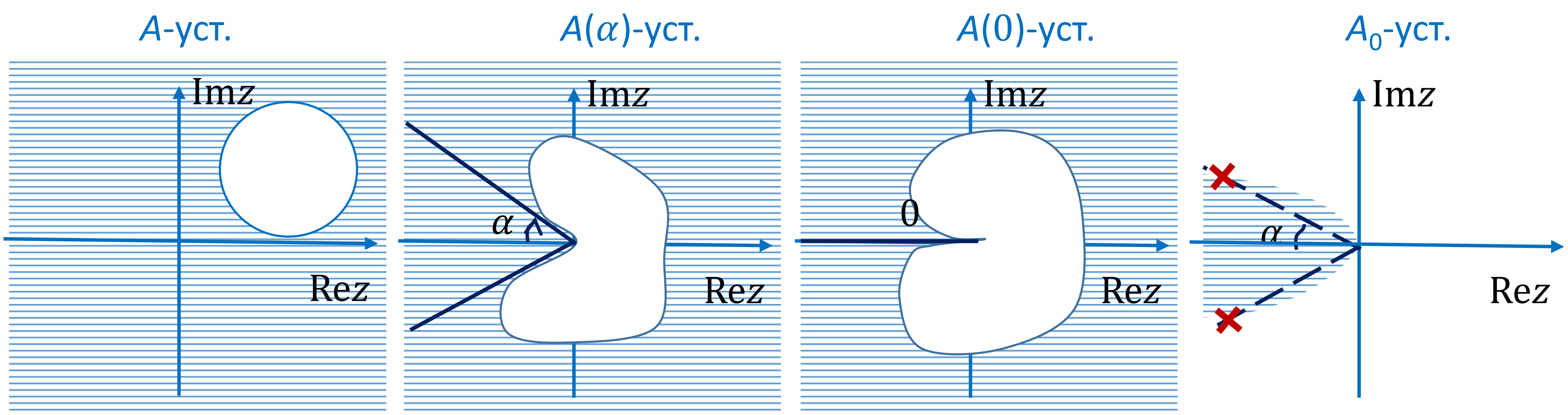
Если $|R(z)| \to 0$ при $z \to -\infty$ как z^p то такая разностная схема называеся L_p устойчивой

Определения устойчивости

Опр: Если область абсолютной устойчивости $|R(z)| \leq 1$ содержит в себя часть отрицательной полуплоскости, включающую угол α, отсчитываемый от отрицательного направления действительной оси, то такая разностная схема называется $A(\alpha)$-устойчивой.

Опр: Если область абсолютной устойчивости $|R(z)| \leq 1$ содержит в себя часть отрицательной полуплоскости, включающую бесконечно малый угол α, отсчитываемый от отрицательного направления действительной оси, то такая разностная схема называется $A(0)$-устойчивой.

Опр: Если область абсолютной устойчивости $|R(z)| \leq 1$ содержит в себя отрицательную действительную полуось, но граница области устойчивости пересекается с ∀ малым углом, то метод называется A_0 - устойчивым



Разностные схемы для жестких систем ОДУ

Одношаговые методы

- 1 шаг по времени
- Нужно решать нелинейную систему

Многошаговые методы

- Много шагов по времени
- Решается только 1 нелинейное уравнение
- Проблемы с устойчивостью

Неявные методы Рунге-Кутты

Опр: s-стадийным **неявным** методом Рунге-Кутты с определяющими коэффициентами

$$a_{ij}, c_i, b_i,$$

Называется метод вида

$$u^{n+1} = u^n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i k_i$$

$$k_i = f(x_n + c_i \tau, u^n + \tau \sum_j a_{ij} k_j)$$

Таблица Бутчера

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$$

c_1	a_{11}	…	a_{1s}
c_2	a_{21}	…	a_{2s}
…	…	…	…
c_s	a_{s1}	…	a_{ss}
	b_1	…	b_s

Необходимо решать систему нелинейных уравнений

Диагонально-неявные методы

Диагонально-неявные методы Рунге-Кутты

$$a_{ij} = 0, j > i$$

Система распадается на s отдельных систем по n уравнений

Однократно диагонально-неявные методы Рунге-Кутты (ОДНРК)

$$a_{ij} = 0, j > i$$

$$\forall i \; a_{ii} = a$$

$$\underbrace{(\mathbf{E} - \mathbf{A}h)}\mathbf{k} = \mathbf{F}$$

На каждом шаге одна и та же матрица

Вычисляется один раз

Определение функции устойчивости методов Р-К

Уравнение Далквиста

$$u' = \lambda u \qquad u(0) = u_0$$

Методы Рунге-Кутты

$$u^{n+1} = u^n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i k_i$$

$$k_i = \lambda(u^n + \tau \sum_{j} a_{ij} k_j)$$

$$\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_s)^T$$

$$\Rightarrow \quad (\mathbf{E} - \tau\lambda\mathbf{A})\mathbf{k} = \lambda u^n \mathbf{e} \qquad \mathbf{e} = (1, \dots, 1)^T$$

$$\mathbf{k} = (\mathbf{E} - \tau\lambda\mathbf{A})^{-1} \lambda u^n \mathbf{e}$$

$$u^{n+1} = u^n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i k_i = u^n + \tau(\mathbf{b}, \mathbf{k}) = u^n + \tau(\mathbf{b}, (\mathbf{E} - \tau\lambda\mathbf{A})^{-1} \lambda u^n \mathbf{e})$$

$$\mathrm{R}(z) = 1 + \tau(\mathbf{b}, (\mathbf{E} - \tau\lambda\mathbf{A})^{-1} \lambda \mathbf{e}) \quad \Rightarrow \quad \mathrm{R}(z) = \frac{\det(\mathbf{E} - \tau\lambda\mathbf{A} + z\mathbf{e}\mathbf{b}^T)}{\det(\mathbf{E} - \tau\lambda\mathbf{A})}$$

Функция устойчивости явных методов

1) Явные методы Рунге-Кутты

$$\det(\mathbf{E} - \tau\lambda\mathbf{A}) = 1 \quad \Rightarrow \quad R(z) \text{ – многочлен степени } p$$

$$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{3!} + \cdots + \frac{z^p}{p!} + O(z^{p+1})$$

Если $s = p \leq 4$, то $R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \cdots + \frac{z^s}{s!}$ - не зависит от коэффициентов метода

Если $s > p$, то

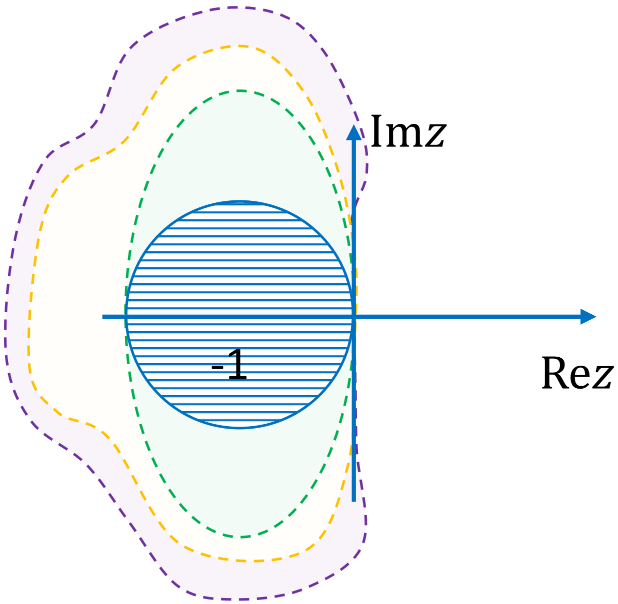
$$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{3!} + \cdots + \frac{z^p}{p!} + M_{p+1}z^{p+1} + M_s z^s$$

$$R(z) = 1 + z$$

$$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2}$$

$$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{3!}$$

$$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{3!} + \frac{z^4}{4!}$$



Функция устойчивости неявных методов

1/3	1/3		
1	0	1	
1	3/4	-1/12	1/3
	3/4	-1/12	1/3

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 3/4 & -1/12 & 1/3 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{E} - z\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{z}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1 - z & 0 \\ -\frac{3z}{4} & \frac{z}{12} & 1 - \frac{z}{3} \end{pmatrix}$$

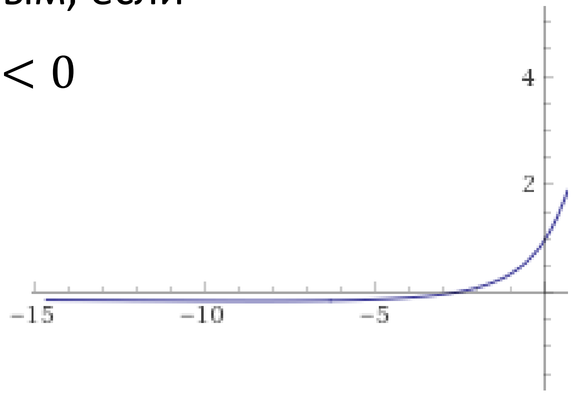
$$\det(\mathbf{E} - z\mathbf{A}) = \left(1 - \frac{z}{3}\right)^2 (1 - z)$$

$$\det(\mathbf{E} - \tau\lambda\mathbf{A} + z\mathbf{e}\mathbf{b}^T) = \det\begin{pmatrix} 1 - \frac{z}{3} + \frac{3z}{4} & -\frac{z}{12} & \frac{z}{3} \\ \frac{3z}{4} & 1 - z - \frac{z}{12} & \frac{z}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \left(1 + \frac{5z}{12}\right)\left(1 - \frac{13z}{12}\right) + \frac{3z}{4}\frac{z}{12}$$

$$R(z) = \frac{1 - \frac{2}{3}z - \frac{7}{18}z^2}{\left(1 - \frac{z}{3}\right)^2 (1 - z)}$$

Метод является монотонным, если

$$R(z) > 0 \quad \forall z \in R, \qquad z < 0$$



Этот метод не является
A и L - устойчивым

Исследование А-устойчивости

Метод Рунге-Кутты с функцией устойчивости вида

$$R(z) = \frac{P(z)}{Q(z)}$$

А-устойчив тогда и только тогда, когда $|R(iy)| \leq 1 \quad \forall y$ (*)

и $R(z)$ - аналитическая функция при Rez < 0

Условие (*) эквивалентно требованию

$$E(y) = |Q(iy)|^2 - |P(iy)|^2 = Q(iy)\,Q(-iy) - P(iy)P(-iy)$$

$$E(y) \geq 0 \quad \forall y$$

Пример: метод трапеций $R(z) = \dfrac{1 + \frac{z}{2}}{1 - \frac{z}{2}}$

Многошаговые методы

Многошаговые методы решения ОДУ

$$u' = f(t,u)$$
$$u(0) = u_0$$

Методы Адамса

$$u^{n+1} = u^n + \int_{t_{n+1-k}}^{t_{n+1}} f(t,u)\,du$$

Интерполируется подынтегральная функция

Формулы дифференцирования назад (ФДН)

$$u = P_k(t)$$

$$P_k'(t) = f(t,u)$$

Интерполируется *u*

Методы Адамса

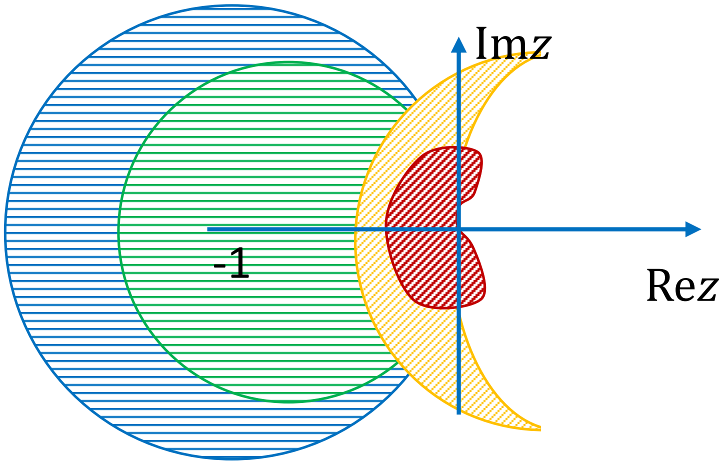
Явные методы Адамса

$$u^{n+1} = u^n + \tau f^n$$

$$u^{n+1} = u^n + \tau\left(\frac{3}{2}f^n - \frac{1}{2}f^{n-1}\right)$$

$$u^{n+1} = u^n + \tau\left(\frac{23}{12}f^n - \frac{16}{12}f^{n-1} + \frac{5}{12}f^{n-2}\right)$$

$$u^{n+1} = u^n + \tau\left(\frac{55}{24}f^n - \frac{59}{24}f^{n-1} + \frac{37}{24}f^{n-2} - \frac{9}{24}f^{n-3}\right)$$



Проблема экстраполяции

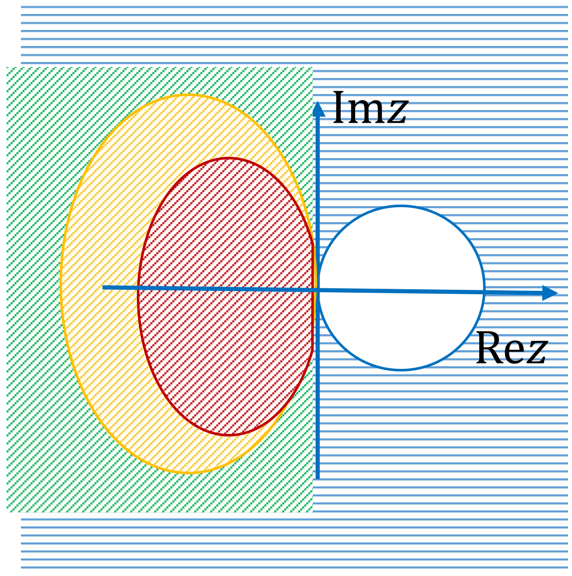
Неявные методы Адамса

$$u^{n+1} = u^n + \tau f^{n+1}$$

$$u^{n+1} = u^n + \tau\left(\frac{1}{2}f^n + \frac{1}{2}f^{n+1}\right)$$

$$u^{n+1} = u^n + \tau\left(\frac{5}{12}f^{n+1} + \frac{8}{12}f^n - \frac{1}{12}f^{n-1}\right)$$

$$u^{n+1} = u^n + \tau\left(\frac{9}{24}f^{n+1} + \frac{19}{24}f^n - \frac{5}{24}f^{n-1} + \frac{1}{24}f^{n-2}\right)$$



Формулы дифференцирования назад

Явные ФДН

$$u^{n+1} = u^n + \tau f^n$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n-1}}{2\tau} = f^n$$ - Слабо устойчива

$$\frac{\frac{1}{3}u^{n+1} + \frac{1}{2}u^n - u^{n-1} + \frac{1}{6}u^{n-2}}{\tau} = f^n$$ - не устойчива

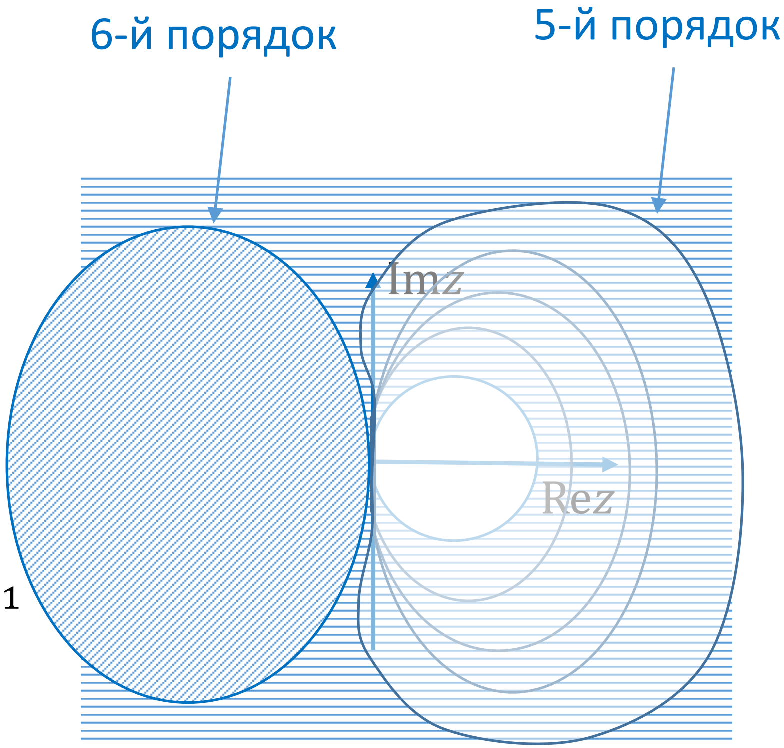
Неявные ФДН

$$u^{n+1} = u^n + \tau f^{n+1}$$

$$\frac{3}{2}u^{n+1} - 2u^n + \frac{1}{2}u^{n-1} = \tau f^{n+1}$$

$$\frac{11}{6}u^{n+1} - 3u^n + \frac{3}{2}u^{n-1} - \frac{1}{3}u^{n-2} = \tau f^{n+1}$$

$$\frac{25}{12}u^{n+1} - 4u^n + 3u^{n-1} - \frac{4}{3}u^{n-2} + \frac{1}{4}u^{n-3} = \tau f^{n+1}$$



Исследование устойчивости многошаговых методов

Можно сделать гибрид из Методов Адамса и ФДН

$$\alpha_k u^{n+k} + \alpha_{k-1} u^{n+k-1} + \cdots + \alpha_0 u^n = \tau\left(\beta_k f^{n+k} + \beta_{k-1} f^{n+k-1} + \cdots + \beta_0 f^n\right)$$

Уравнение Далквиста

$$\alpha_k u^{n+k} + \alpha_{k-1} u^{n+k-1} + \cdots + \alpha_0 u^n = \tau\lambda\left(\beta_k u^{n+k} + \beta_{k-1} u^{n+k-1} + \cdots + \beta_0 u^n\right)$$

Найдем собственные значения оператора перехода ζ

$\|R(z)\| \geq \max|\zeta|$

Для сильной устойчивости необходимо, чтобы при данном z $|\zeta| \leq 1$

$$u^{n+k} = \zeta^{n+k} u^0$$

$$\alpha_k \zeta^{n+k} + \alpha_{k-1} \zeta^{n+k-1} + \cdots + \alpha_0 \zeta^n = z\left(\beta_k \zeta^{n+k} + \beta_{k-1} \zeta^{n+k-1} + \cdots + \beta_0 \zeta^n\right)$$

Уравнение в общем случае имеет k корней.

Для исследования устойчивости нужно потребовать, чтобы все корни не превосходили 1.

Устойчивость многошаговых методов

$$z = \frac{\alpha_k \zeta^k + \alpha_{k-1} \zeta^{k-1} + \cdots + \alpha_0}{\beta_k \zeta^k + \beta_{k-1} \zeta^{k-1} + \cdots + \beta_0}$$

В плоскости ζ внешность единичного круга с центром в (0,0) будучи отображенной в плоскость z порождает те значения z, для которых хотя бы один из корней характеристического уравнения $|\zeta| > 1$, следовательно порождает неустойчивость.

Образ границы единичного круга $\zeta = e^{i\theta}$ в плоскости z дает кривую, которая называется кривая локуса корней – это ориентированная кривая.

При этом область устойчивости, если она есть, должна лежать по левую руку от кривой.

Исследование на А-устойчивость

$$u^{n+2} - u^{n+1} = \frac{h}{4}\left(f^{n+2} + 2f^{n+1} + f^{n}\right) \qquad f = \lambda u$$

$$u^{n+2} - u^{n+1} = \frac{z}{4}\left(u^{n+2} + 2u^{n+1} + u^{n}\right)$$

$$u^{n+k} = \zeta^{n+k} u^{0}$$

$$\zeta^2 - \zeta = \frac{z}{4}\left(\zeta^2 + 2\zeta + 1\right) \quad \Longrightarrow \quad z = \frac{4\zeta(\zeta - 1)}{(\zeta + 1)^2} \qquad \zeta = e^{i\theta}$$

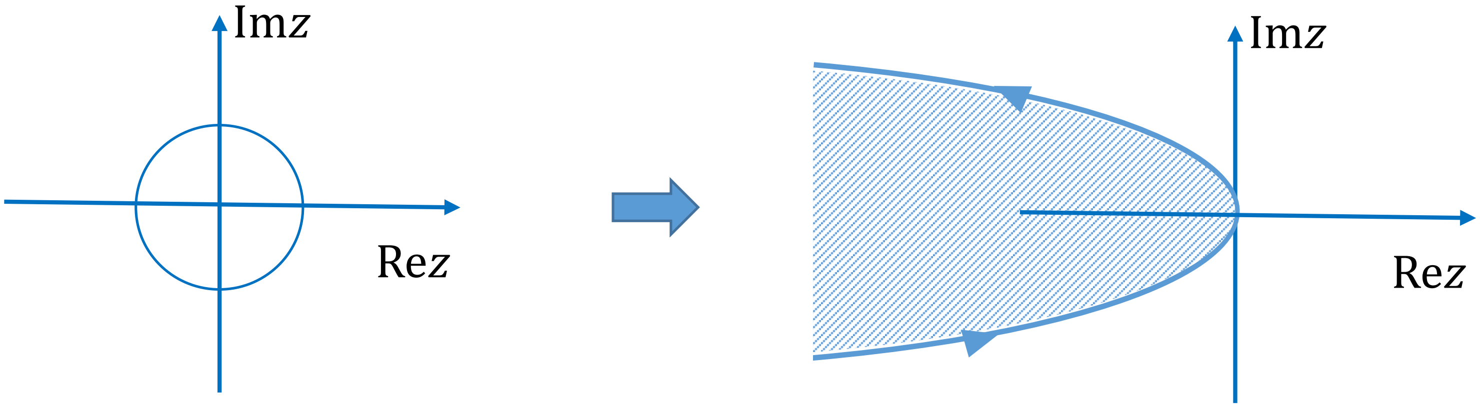
$$z = \frac{4e^{i\theta}\left(e^{i\theta} - 1\right)}{\left(e^{i\theta} + 1\right)^2} = \frac{4e^{i\theta}\left(e^{i\theta} - 1\right)}{e^{i\theta}\left(e^{i\theta/2} + e^{-i\theta/2}\right)^2} = \frac{4e^{i\theta}\left(e^{i\theta} - 1\right)}{e^{i\theta}\left(e^{i\theta/2} + e^{-i\theta/2}\right)^2} = \frac{4\left(e^{i\theta} - 1\right)}{\left(e^{i\theta/2} + e^{-i\theta/2}\right)^2}$$

$$z = \frac{\cos\theta - i\sin\theta - 1}{\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^2} = \frac{-2\sin^2\frac{\theta}{2} + i\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}}{\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^2} = -2\operatorname{tg}^2\frac{\theta}{2} + i\operatorname{tg}\frac{\theta}{2}$$

Исследование на А-устойчивость

$$z = \underbrace{-2\mathrm{tg}^2\frac{\theta}{2}}_{x} + i\,\underbrace{\mathrm{tg}\frac{\theta}{2}}_{y}$$

$$x = y^2$$



Исследование на аппроксимацию многошаговых методов

Разложение в ряд Тейлора

f^{n+k}, u^{n+k}

Разлагаются в ряд Тейлора

Исследование алгебраической точности

Поиск максимального m и полинома $P_m(t)$, для которых точна формула

Исследование на аппроксимацию многошаговых методов

Задача: Среди всех явных двухшаговых методов найти метод наибольшего порядка аппроксимации

$$u' = f(t,u)$$
$$u(0) = u_0$$

$$u^{n+2} + \alpha_1 u^{n+1} + \alpha_0 u^n = \tau(\beta_1 f^{n+1} + \beta_0 f^n)$$

1) Разложение в ряд Тейлора

$$u^{n+1} = u^n + \tau u' + \frac{\tau^2}{2}u'' + \frac{\tau^3}{3!}u''' + \cdots \qquad f^{n+1} = u^{n+1}$$

$$u^{n+2} = u^n + 2\tau u' + 2\tau^2 u'' + \frac{4\tau^3}{3}u''' + \cdots$$

$$u^n + 2\tau u' + 2\tau^2 u'' + \frac{4\tau^3}{3}u''' + \cdots + \alpha_1\left(u^n + \tau u' + \frac{\tau^2}{2}u'' + \frac{\tau^3}{3!}u''' + \cdots\right) + \alpha_0 u^n =$$
$$= \tau\left(\beta_1\left(u^n + \tau u' + \frac{\tau^2}{2}u'' + \frac{\tau^3}{3!}u''' + \cdots\right) + \beta_0 f^n\right)$$

τ^0 $\quad 1 + \alpha_0 + \alpha_1 = 0$

$u'\tau$ $\quad 2 + \alpha_1 = \beta_1 + \beta_0$

$u''\tau$ $\quad 2 + \frac{1}{2}\alpha_1 = \beta_1$

$u''\tau$ $\quad \frac{4}{3} + \frac{1}{6}\alpha_1 = \frac{\beta_1}{2}$

$$u^{n+2} + 4u^{n+1} - 5u^n = \tau(4f^{n+1} + 2f^n)$$

Исследование на аппроксимацию многошаговых методов

Задача: Среди всех явных двухшаговых методов найти метод наибольшего порядка аппроксимации

$$u' = f(t,u)$$
$$u(0) = u_0$$

$$u^{n+2} + \alpha_1 u^{n+1} + \alpha_0 u^n = \tau(\beta_1 f^{n+1} + \beta_0 f^n)$$

2) Поиск порядка полинома

$$P_0(t) = u = \text{const}$$
$$u_n = \text{const}$$

$$u' = f(t,u) = 0$$
$$c(1 + \alpha_1 + \alpha_0) = 0$$

$$u = P_1(t) = t - tn$$
$$u_{n+k} = k\tau$$

$$u' = f(t,u) = 1$$
$$2\tau + \alpha_1\tau = \tau(\beta_1 + \beta_0)$$

$$P_2(t) = u = (t - tn)^2$$
$$u_{n+k} = (k\tau)^2$$

$$u' = f(t,u) = 2(t - tn)$$
$$4\tau^2 + \alpha_1\tau = \tau(2\beta_1 + 0)$$

…

Получаем ту же самую систему

Связь аппроксимации и устойчивости

1-й барьер Далквиста: Порядок аппроксимации p устойчивого линейного k-шагового метода подчиняется ограничениям

$$p \leq k + 2, \qquad k \text{ - четно}$$

$$p \leq k + 1, \qquad k \text{ - нечетно}$$

$$p \leq k \qquad \text{при} \quad \beta_k/\alpha_k \leq 0$$

2-й барьер Далквиста: Любой А-устойчивый многошаговый метод должен иметь порядок аппроксимации $p \leq 2$. Если $p \leq 2$, то константа погрешности $c \leq 1/12$ (а это метод трапеций – единственный А-устойчивый многошаговый метод второго порядка).

Спасибо за внимание!