Методические материалы: Разностные схемы для ОДУ колебаний

С. Лемешевский (sergey.lemeshevsky@gmail.com)

Институт математики НАН Беларуси

Mar 13, 2017

Простейшая модель колебательного процесса

$$u'' + \omega^2 u = 0, \quad t \in (0, T], \tag{1}$$

$$u(0) = U, \quad u'(0) = 0. \tag{2}$$

Точное решение

$$u(t) = U \cos \omega t, \tag{3}$$

описывает колебания с постоянной амплитудой U и угловой частотой ω. Соответствующий период колебаний равен $P = 2\pi/\omega$.

Разностная схема

- Введем равномерную сетку по переменной t с шагом τ:

$$\omega_\tau = \{t_n = n\tau,\ n = 0, 1, \dots N\}.$$

- Простейшая разностная схема

$$\frac{y^{n+1} - 2y^n + y^{n-1}}{\tau^2} = -\omega^2 y^n. \tag{4}$$

- Для формулировки вычислительного алгоритма, предположим, что мы уже знаем значение y^{n-1} и y^n. Тогда из мы можем выразитьнеизвестное значение y^{n+1}:

$$y^{n+1} = 2y^n - y^{n-1} - \tau^2 \omega^2 y^n. \tag{5}$$

Вычисление решения на первом шаге

Очевидно, что для вычисления y^1 необходимо знать неопределенное значение y^{-1} при $t = -\tau$.

Аппроксимируем начальное условие $u'(0) = 0$ центральной разностной производной:

$$\frac{y^1 - y^{-1}}{2\tau} = 0 \Rightarrow y^1 = y^{-1}$$

Подставляя последнее в разностную схему при $n = 0$, получим

$$y^1 = y^0 - \frac{1}{2}\tau^2\omega^2 y^0. \tag{6}$$

Вычислительный алгоритм

1. $y^0 = U$
2. вычисляем y^1
3. для $n = 1, 2, \ldots,$
   (a) вычисляем y^n

Более строго вычислительный алгоритм напишем на Python:

```
t = linspace(0, T, N+1)  # сетка по времени
tau = t[1] - t[0]        # постоянный временной шаг
u = zeros(N+1)           # решение

u[0] = U
u[1] = u[0] - 0.5*tau**2*omega**2*u[0]
for n in range(1, N):
    u[n+1] = 2*u[n] - u[n-1] - tau**2*omega**2*u[n]
```

Безындексные обозначения

Разностную схему можно записать, используя безындексные обозначения.

Левая и правая разностные производные

$$y_{\bar{t}} \equiv \frac{y^n - y^{n-1}}{\tau}, \quad y_t \equiv \frac{y^{n+1} - y^n}{\tau}.$$

Вторая разностная производная

$$y_{\bar{t}t} = \frac{y_t - y_{\bar{t}}}{\tau} = \frac{y^{n+1} - 2y^n + y^{n-1}}{\tau^2}.$$

Центральная разностная производная:

$$y_{\dot{t}} = \frac{y^{n+1} - y^{n-1}}{2\tau}.$$

Программная реализация

Функция-решатель (Солвер)

```
def solver(U, omega, tau, T):
    """
    Решается задача
    u'' + omega**2*u = 0 для t из (0,T], u(0)=U и u'(0)=0,
    конечноразностным- методом с постоянным шагом tau
    """
    tau = float(tau)
    Nt = int(round(T/tau))
    u = np.zeros(Nt+1)
    t = np.linspace(0, Nt*tau, Nt+1)

    u[0] = U
    u[1] = u[0] - 0.5*tau**2*omega**2*u[0]
    for n in range(1, Nt):
        u[n+1] = 2*u[n] - u[n-1] - tau**2*omega**2*u[n]
    return u, t
```

Построение графиков

```
def visualize(u, t, U, omega):
    plt.plot(t, u, 'r--o')
    t_fine = np.linspace(0, t[-1], 1001)  # мелкая сетка для точного решения
    u_e = u_exact(t_fine, U, omega)
    plt.hold('on')
    plt.plot(t_fine, u_e, 'b-')
    plt.legend(['u'приближенное', u'точное'], loc='upper left')
    plt.xlabel('$t$')
    plt.ylabel('$u$')
    tau = t[1] - t[0]
    plt.title('$\\tau = $ %g' % tau)
    umin = 1.2*u.min();  umax = -umin
    plt.axis([t[0], t[-1], umin, umax])
    plt.savefig('tmp1.png');  plt.savefig('tmp1.pdf')
```

Основная программа

```
U = 1
omega = 2*pi
tau = 0.05
num_periods = 5
P = 2*np.pi/tau    #  один период
T = P*num_periods
u, t = solver(U, omega, tau, T)
visualize(u, t, U, omega, tau)
```

Интерфейс пользователя: командная строка

```
import argparse
parser = argparse.ArgumentParser()
parser.add_argument('--U', type=float, default=1.0)
parser.add_argument('--omega', type=float, default=2*np.pi)
parser.add_argument('--tau', type=float, default=0.05)
parser.add_argument('--num_periods', type=int, default=5)
a = parser.parse_args()
U, omega, tau, num_periods = a.U, a.omega, a.tau, a.num_periods
```

Стандартный вызов основной программы выглядит следующим образом:

```
Terminal> python vib_undamped.py --num_periods 20 --tau 0.1
```

Верификация реализации алгоритма

Простейшие способы тестирования

- Тестирование на простейших решениях: $u = \text{const}$ или $u = ct + d$ не применимы здесь (без правой части в уравнении).
- Ручные вычисления:

вычислить значений y^1, y^2 и y^3 и сравнить с результатом программы.

```
def test_three_steps():
    from math import pi
    U = 1;  omega = 2*pi;  tau = 0.1;  T = 1
    u_by_hand = np.array([
        1.000000000000000,
        0.802607911978213,
        0.288358920740053])
    u, t = solver(U, omega, tau, T)
    diff = np.abs(u_by_hand - u[:3]).max()
    tol = 1E-14
    assert diff < tol
```

Оценка скорости сходимости

Чтобы оценить скорость сходимости для рассматриваемой задачи, нужно выполнить

- провести m расчетов, уменьшая на каждом из них шаг в два раза: $\tau_k = 2^{-k}\tau_0$, $k = 0, 1, \ldots, m-1$,
- вычислить L_2 -норму погрешности для каждого расчета $\varepsilon_k = \sqrt{\sum_{n=0}^{N-1}(y^n - u_e(t_n))\tau_k}$,
- оценить скорость сходимости на основе двух последовательных экспериментов $(\tau_{k-1}, \varepsilon_{k-1})$ и (τ_k, ε_k)

Программная реализация

```
def convergence_rates(m, solver_function, num_periods=8):
    """
    Возвращает m-1 эмпирическую оценку скорости сходимости,
    полученную на основе m расчетов, для каждого из которых
    шаг по времени уменьшается в два раза.
    solver_function(U, omega, tau, T) решает каждую задачу,
    для которой T, получается на основе вычислений для
    num_periods периодов.
    """
    from math import pi
    omega = 0.35; U = 0.3       # просто заданные значения
    P = 2*pi/omega              # период
    tau = P/30                  # 30 шагов на период 2*pi/omega
    T = P*num_periods
```

```
    tau_values = []
    E_values = []
    for i in range(m):
        u, t = solver_function(U, omega, tau, T)
        u_e = u_exact(t, U, omega)
        E = np.sqrt(tau*np.sum((u_e-u)**2))
        tau_values.append(tau)
        E_values.append(E)
        tau = tau/2

    r = [np.log(E_values[i-1]/E_values[i])/
         np.log(tau_values[i-1]/tau_values[i])
         for i in range(1, m, 1)]
    return r
```

Ожидаемая скорость сходимости — 2.

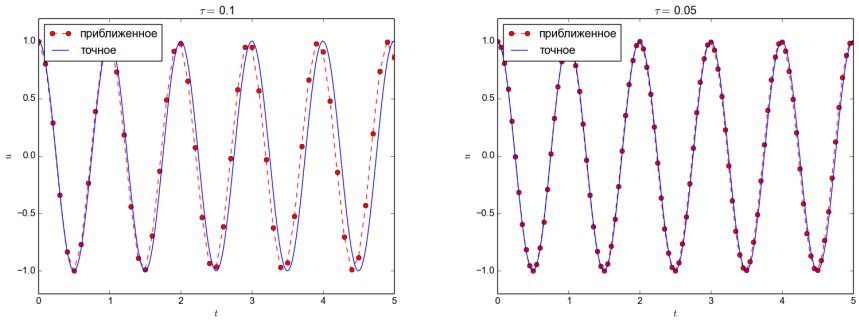
Юнит-тест для скорости сходимости

Используем последнего элемента r[-1] в юнит-тесте:

```
def test_convergence_rates():
    r = convergence_rates(m=5, solver_function=solver, num_periods=8)
    tol = 0.1
    assert abs(r[-1] - 2.0) < tol
```

Проведение вычислительного эксперимента

Влияние шага аппроксимации при моделировании



- Похоже, что численное решение корректно передает амплитуду колебаний
- Наблюдается погрешность при расчете угловой частоты, которая уменьшается при уменьшении шага.
- Суммарная погрешность угловой частоты увеличивается со временем.

Использование изменяющихся графиков

- При моделировании на длительном временном отрезке нам нужно строить график "следующий"за решением.
- Пакет SciTools содержит удобный инструмент для этого: MovingPlotWindow.

Пример вызова:

```
Terminal> python vib_undamped.py --dt 0.05 --num_periods 40
```

Видео

Использование Bokeh для сравнения графиков

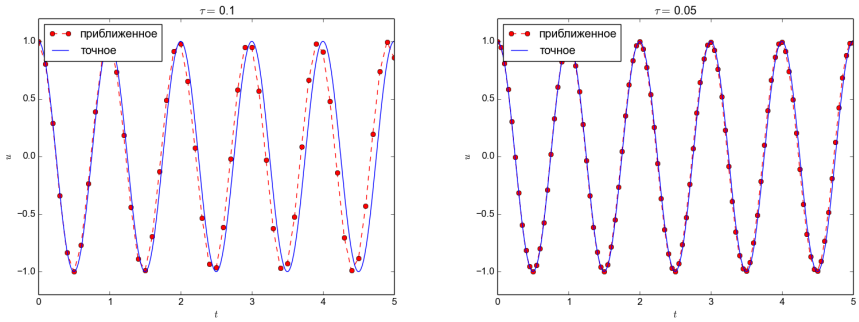
Как выглядит код для построения графиков с помощью Bokeh?

```
def bokeh_plot(u, t, legends, U, omega, t_range, filename):
    """
    Строится график зависимости приближенного решения от t с
    использованием библиотеки Bokeh.
    u и t - списки несколько( экспериментов могут сравниваться).
    легенды содержат строки для различных пар u,t.
    """
    if not isinstance(u, (list,tuple)):
        u = [u]
    if not isinstance(t, (list,tuple)):
        t = [t]
    if not isinstance(legends, (list,tuple)):
        legends = [legends]

    import bokeh.plotting as plt
    plt.output_file(filename, mode='cdn', title=u'Сравнение с помощью Bokeh')
    # Предполагаем, что все массивы t имеют одинаковые размеры
    t_fine = np.linspace(0, t[0][-1], 1001)  # мелкая сетка для точного решения
    tools = 'pan,wheel_zoom,box_zoom,reset,'\
            'save,box_select,lasso_select'
```

```
u_range = [-1.2*U, 1.2*U]
font_size = '8pt'
p = []  # список графических объектов
# Создаем первую фигуру
p_ = plt.figure(
    width=300, plot_height=250, title=legends[0],
    x_axis_label='t', y_axis_label='u',
    x_range=t_range, y_range=u_range, tools=tools,
    title_text_font_size=font_size)
p_.xaxis.axis_label_text_font_size=font_size
p_.yaxis.axis_label_text_font_size=font_size
p_.line(t[0], u[0], line_color='blue')
# Добавляем точное решение
u_e = u_exact(t_fine, U, omega)
p_.line(t_fine, u_e, line_color='red', line_dash='4 4')
p.append(p_)
# Создаем оставшиеся фигуры и добавляем их оси к осям первой фигуры
for i in range(1, len(t)):
    p_ = plt.figure(
        width=300, plot_height=250, title=legends[i],
        x_axis_label='t', y_axis_label='u',
        x_range=p[0].x_range, y_range=p[0].y_range, tools=tools,
        title_text_font_size=font_size)
    p_.xaxis.axis_label_text_font_size = font_size
    p_.yaxis.axis_label_text_font_size = font_size
    p_.line(t[i], u[i], line_color='blue')
    p_.line(t_fine, u_e, line_color='red', line_dash='4 4')
    p.append(p_)

# Располагаем все графики на сетке с 3 графиками в строке
grid = [[]]
for i, p_ in enumerate(p):
    grid[-1].append(p_)
    if (i+1) % 3 == 0:
        # Новая строка
        grid.append([])
plot = plt.gridplot(grid, toolbar_location='left')
plt.save(plot)
plt.show(plot)
```

Анализ конечно-разностной схемы

Можем ли понять появление ошибки в частоте?



Видео с развитием ошибки частоты

Movie 1: mov-fdm-for-ode/movie.mp4

Можно получить точное решение дискретной задачи

- Мы имеем линейное однородное разностное уравнение относительно y^n
- Решение этого уравнения имеет вид $y^n = Uq^n$, где q — неизвестное число
- Здесь: $u_e(t) = U\cos\omega t \sim Uexp(i\omega t) = U * e^{i\omega\tau n}$
- Прием для упрощения алгебраических выкладок: $y^n = Uq^n$ с $q = exp(i\tilde{\omega}\tau)$, затем находим $\tilde{\omega}$
- $\tilde{\omega}$ — неизвестная численная частота (проще в вычислении, чем q)
- $\omega - \tilde{\omega}$ — погрешность частоты
- Используем действительную часть как физически обоснованную часть комплексного выражения

Вывод решения конечно-разностной схемы

$$y^n = Uq^n = U\exp(\tilde{\omega}\tau n) = U\exp i\tilde{\omega}t = U\cos(\tilde{\omega}t) + iU\sin(\tilde{\omega}t).$$

$$
\begin{aligned}
y^n_{\bar{t}t} &= \frac{y^{n+1} - 2y^n + y^{n-1}}{\tau^2} \\
&= U\frac{q^{n+1} - 2q^n + q^{n-1}}{\tau^2} \\
&= \frac{U}{\tau^2}\left(e^{i(\tilde{\omega}t+\tau)} - 2e^{i(\tilde{\omega}t)} + e^{i(\tilde{\omega}t-\tau)}\right) \\
&= Ue^{i(\tilde{\omega}t)}\frac{1}{\tau^2}\left(e^{i\tau} + e^{-i\tau} - 2\right) \\
&= Ue^{i(\tilde{\omega}t)}\frac{2}{\tau^2}\left(\cos(\tilde{\omega}\tau) - 1\right) \\
&= -Ue^{i(\tilde{\omega}t)}\frac{4}{\tau^2}\sin^2\left(\frac{\tilde{\omega}\tau}{2}\right)
\end{aligned}
$$

Решение относительно численной частоты

Подставляя $y^n = Ue^{\tilde{\omega}\tau n}$ в разностную схему, получим

$$
-Ue^{i(\tilde{\omega}t)}\frac{4}{\tau^2}\sin^2\left(\frac{\tilde{\omega}\tau}{2}\right) + \omega^2 Ue^{i(\tilde{\omega}t)} = 0.
$$

Разделив последнее выражение на $Ue^{i(\tilde{\omega}t)}$, получим

$$
\frac{4}{\tau^2}\sin^2\left(\frac{\tilde{\omega}\tau}{2}\right) = \omega^2.
$$

Отсюда

$$
\tilde{\omega} = \pm\frac{2}{\tau}\arcsin\left(\frac{\omega\tau}{2}\right). \tag{7}
$$

- Численная частота $\tilde{\omega}$ никогда не равна точной ω.
- Насколько хороша аппроксимация?

Полиномиальная аппроксимация погешности частоты

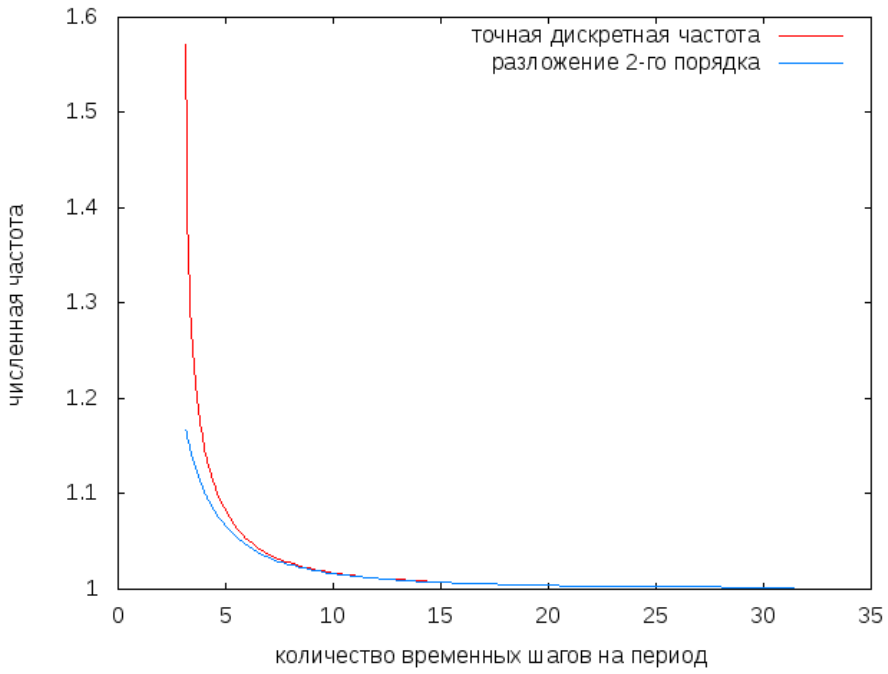
Разложение в ряд Тейлора по τ дает

```
>>> from sympy import *
>>> tau, omega = symbols('tau omega')
>>> omega_tilde_e = 2/tau*asin(omega*tau/2)
>>> omega_tilde_series = w_tilde_e.series(tau, 0, 4)
>>> print omega_tilde_series
>>> omega + tau**2*omega**3/24 + O(tau**4)
```

$$\tilde{\omega} = \omega \left(1 + \frac{1}{24}\omega^2\tau^2\right) + \mathcal{O}(\tau^4). \tag{8}$$

Слишком большая численная частота дает слишком быстро колеблющийся профиль.

График погрешности частоты



Рекомендация: 25-30 точен на период.

Точное дискретное решение

$$y^n = U\cos(\tilde{\omega}\tau n), \quad \tilde{\omega} = \frac{2}{\tau}\arcsin\left(\frac{\omega\tau}{2}\right). \tag{9}$$

Сеточная функция погрешности:

$$\begin{aligned} e^n &= u_e(t_n) - u^n = U\cos(\omega\tau n) - U\cos(\tilde{\omega}\tau n) \\ &= -2U\sin\left(\frac{t}{2}(\omega - \tilde{\omega})\right)\sin\left(\frac{t}{2}(\omega + \tilde{\omega})\right). \end{aligned} \tag{10}$$

Построенная сеточная функция погрешности идеальна для целей тестирования.

Сходимость

Можно легко показать сходимость:

$$e^n \to 0 \text{ при} \tau \to 0,$$

т.к.

$$\lim_{\tau \to 0} = \lim_{\tau \to 0} \frac{2}{\tau} \arcsin\left(\frac{\omega\tau}{2}\right) = \omega.$$

Это можно проверить, например, с помощью sympy:

```
>>> import sympy as sym
>>> tau, omega = sym.symbols('tau omega')
>>> sym.limit((2/tau)*sym.asin(omega*tau/2),tau,0,dir='+')
omega
```

Устойчивость

Наблюдения:

- Численное решение имеет правильную постоянную амплитуду, но ошибку в частоте.
- Постоянная амплитуда будет, если $\arcsin(\omega\tau/2)$ будет действительнозначным $\Rightarrow |\omega\tau/2| < 1$
- При $|\omega\tau/2| > 1$ значения $\arcsin(\omega\tau/2)$ и, следовательно, $\tilde{\omega}$ являются комплексными:

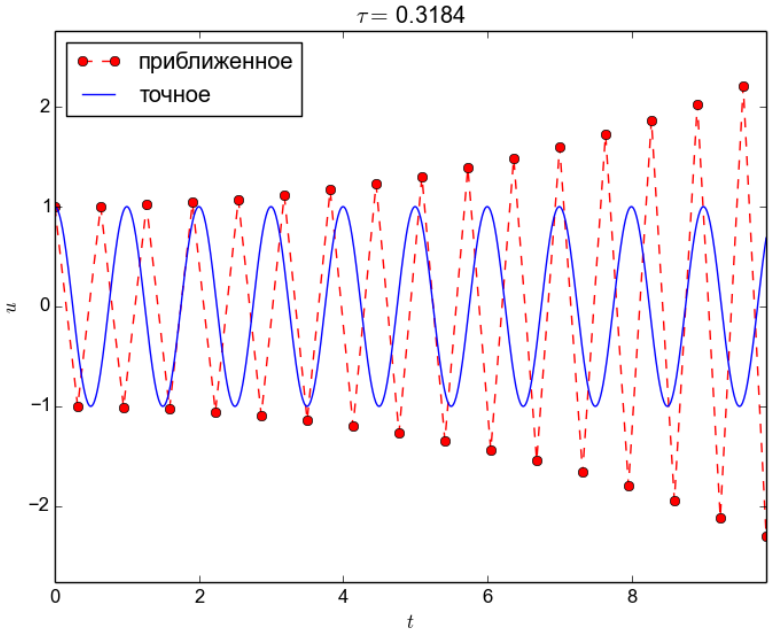
Какие последствия того, что $\tilde{\omega}$ комплексное?

- Пусть $\tilde{\omega} = \tilde{\omega}_r + i\tilde{\omega}_i$.
- Так как $\arcsin(x)$ имеет отрицательную мнимую часть при $x > 1$, $\tilde{\omega}_i < 0$, то $e^{i\tilde{\omega}t} = e^{-\tilde{\omega}t}e^{i\tilde{\omega}t}$, что означает экспоненциальный рост со временем, так как $e^{-\tilde{\omega}t}$ при $\tilde{\omega} < 0$ имеет положительную степень.
- Это и есть неустойчивость.

Условие устойчивости

$$\frac{\omega\tau}{2} \leq 1 \Rightarrow \tau \leq \frac{2}{\omega}. \tag{11}$$

Возьмем $\tau = \pi^{-1} + 9.01 \cdot 10^{-5}$.



Выводы

Из анализа точности и устойчивости можно сделать некоторые выводы:

1. Ключевой параметр в формулах $p = \omega\tau$. Пусть период колебаний $P = 2\pi/\omega$, количество временных шагов на период $N_P = P/\tau$. Тогда $p = \omega\tau = 2\pi N_P$, т.е. основным параметром является количество временных шагов на период. Наименьшее возможное $N_P = 2$, т.е. $p \in (0, \pi]$.

2. Если $p \leq 2$, то амплитуда численного решения постоянна.

3. Отношение численной угловой частоты к точной есть $\tilde{\omega}/\omega \approx 1 + \frac{p^2}{24}$. Погрешность $\frac{p^2}{24}$ приводит к смещенным пикам численного решения, и это погрешность расположения пиков растет линейно со временем.

Обобщения: затухание, нелинейные струны и внешние воздействия

$$mu'' + f(u') + s(u) = F(t), \quad t \in (0, T], \quad u(0) = U, \quad u'(0) = V. \tag{12}$$

Здесь m, $f(u')$, $s(u)$, $F(t)$, U, V и T — входные параметры.
Типичные варианты выбора f и s:

- линейное затухание $f(u') = bu'$ или
- квадратичное затухание $f(u') = bu'|u'|$
- линейные пружины: $s(u) = cu$
- нелинейные пружины $s(u) \sim \sin(u)$ (маятник)

Разностная схема для линейного затухания

$$my^n_{\bar{t}t} + by^n_{\mathring{t}} + s(y^n) = F^n, \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{13}$$

$$y^0 = U, \quad y^0_{\mathring{t}} = \frac{y^1 - y^{-1}}{2\tau} = V. \tag{14}$$

В индексной форме:

$$m\frac{y^{n+1} - 2y^n + y^{n-1}}{\tau^2} + b\frac{y^{n+1} - y^{n-1}}{2\tau} + s(y^n) = F^n, \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{15}$$

$$y^0 = U, \quad \frac{y^1 - y^{-1}}{2\tau} = V. \tag{16}$$

$$y^{n+1} = \frac{2my^n + (0.5\tau - m)y^{n-1} + \tau^2(F^n - s(y^n))}{m + 0.5b\tau}, \quad n = 1, 2, \ldots, N-1. \tag{17}$$

Начальные условия

При $n = 0$ с учетом второго начального условия имеем

$$y^1 = y^0 + \tau V + \frac{\tau^2}{2m}(F^0 - s(y^0) - bV). \tag{18}$$

Разностная схема для квадратичного затухания

- Пусть $f(u') = bu'|u'|$.
- Аппроксимацию $f(u')$ выполним, основываясь на использовании геометрического среднего:

$$(w^2)^n \approx w^{n-1/2} w^{n+1/2},$$

При $w = u'$ имеем

$$(u'|u'|)^n \approx u'(t_{n+1/2})|u'(t_{n-1/2})|.$$

Для аппроксимации u' в точках $t_{n\pm1}$ воспользуемся направленными разностями, которые имеют второй порядок аппроксимации относительно полуцелых точек:

$$u'(t_{n+1/2}) \approx \frac{y^{n+1} - y^n}{\tau} = y_t^n, \quad u'(t_{n-1/2}) \approx \frac{y^n - y^{n-1}}{\tau} = y_{\bar{t}}^n.$$

Разностная схема для квадратичного затухания

Таким образом, получим разностное уравнение

$$m y_{\bar{t}t}^n + b y_t^n y_{\bar{t}}^n + s(y^n) = F^n, \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{19}$$

которая является линейной относительно y^{n+1}:

$$y^{n+1} = \frac{2my^n - my^{n-1} + by^n|y^n - y^{n-1}| + \tau^2(F^n - s(y^n))}{m + b|y^n - y^{n-1}|}. \tag{20}$$

Начальные условия для квадратичного затухания

Для $t = 0$ имеем $u'(0)|u'(0)| = bV|V|$. Используя это выражение в уравнении и значение $u(0) = U$ при $t = 0$, получим

$$m y_{\bar{t}t}^1 + bV|V| + s(U) = F^0.$$

Отсюда

$$y^1 = y^0 + \tau V + \frac{\tau^2}{2m}(F^0 - mV|V| - s(U)). \tag{21}$$

Алгоритм

1. $y^0 = U$;
2. вычисляем y^1 (формула зависит от линейного/квадратичного затухания)
3. для $n = 1, 2, \ldots, N-1$:

(a) вычисляем y^{n+1} (формула зависит от линейного/квадратичного затухания)

Программная реализация

```
def solver(U, V, m, b, s, F, tau, T, damping='linear'):
    """
    Решает задачу m*u'' + f(u') + s(u) = F(t) for t in (0,T],
    u(0)=U и u'(0)=V,
    конечноразностной- схемой с шагом tau.
    Если затухание 'liniear', то f(u')=b*u, если затухание 'quadratic',
    то f(u')=b*u'*abs(u').
    F(t) и s(u) --- функции Python.
    """
    tau = float(tau); b = float(b); m = float(m) # avoid integer div.
    N = int(round(T/tau))
    u = np.zeros(N+1)
    t = np.linspace(0, N*tau, N+1)

    u[0] = U
    if damping == 'linear':
        u[1] = u[0] + tau*V + tau**2/(2*m)*(-b*V - s(u[0]) + F(t[0]))
    elif damping == 'quadratic':
        u[1] = u[0] + tau*V + \
               tau**2/(2*m)*(-b*V*abs(V) - s(u[0]) + F(t[0]))

    for n in range(1, N):
        if damping == 'linear':
            u[n+1] = (2*m*u[n] + (b*tau/2 - m)*u[n-1] +
                      tau**2*(F(t[n]) - s(u[n])))/(m + b*tau/2)
        elif damping == 'quadratic':
            u[n+1] = (2*m*u[n] - m*u[n-1] + b*u[n]*abs(u[n] - u[n-1])
                      + tau**2*(F(t[n]) - s(u[n])))/\
                      (m + b*abs(u[n] - u[n-1]))
    return u, t
```

Верификация реализации алгоритма

- Постоянное решение $u_e(t) = U$ ($V = 0$) удовлетворяет дифференциальной и дискретной задаче. Идеально для отладки!
- Линейная функция $u_e(t) = ct + d$ дифференциальной и дискретной задаче.

- Функция $u_e(t) = bt^2 + Vt + U$ удовлетворяет дифференциальной задаче и дискретной задаче с линейным затуханием, но не с квадратичным. Специальный вид дискретной правой части может допускать u_e как решение дискретной задачи с квадратичным затуханием.

Демонстрационная программа

Сценарий vib.py допускает вызов с параметрами командной строки:

```
Terminal> python vib.py --s 'sin(u)' --F '3*cos(4*t)' --b 0.03 --T 60
```