Жесткая задача Коши

A- и L- устойчивые методы

Цыбулин Иван (tsybulin@crec.mipt.ru)

Сравнение методов РК разных порядков

Возьмем в качестве модельной задачи задачу о движении тела в поле Земли и Луны (орбита Аренсторфа)

$$x'' = x + 2y' - M\frac{x+m}{\sqrt{(x+m)^2+y^2}^3} - m\frac{x-M}{\sqrt{(x-M)^2+y^2}^3}$$

$$y'' = y - 2x' - M\frac{y}{\sqrt{(x+m)^2+y^2}^3} - m\frac{y}{\sqrt{(x-M)^2+y^2}^3}$$

$$m = 0.012277471,\ M = 1 - m$$

$$x(0) = 0.994,\ y(0) = 0$$

$$x'(0) = 0,\ y'(0) = -2.001585106379$$

```
import numpy as np
# Вычисляет правую часть системы ОДУ
# du/dt = aren(t, u)
def aren(t, u):
    x, y, vx, vy = u
    m = 0.012277471; M = 1 - m
    Dm = ((x+m)**2+y**2)**(1.5);
    De = ((x-M)**2+y**2)**(1.5)
    return np.array([vx, vy,
            x+2*vy-M*(x+m)/Dm-m*(x-M)/De,
            y-2*vx-M*  y  /Dm-m*  y  /De])

aren_init = np.array([0.994, 0, 0, -2.001585106379])
aren_tmax = 17.06521656015796
```

Методы

Решать задачу будем явными методами Рунге-Кутты 1го, 2го и 4го порядков со следующими таблицами Бутчера:

$$
\begin{array}{c|c}
\multicolumn{2}{c}{\text{Euler}} \\
0 & \\
\hline
 & 1
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|cc}
\multicolumn{3}{c}{\text{Midpoint}} \\
0 & & \\
1/2 & 1/2 & \\
\hline
 & 0 & 1
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|cccc}
\multicolumn{5}{c}{\text{RK4}} \\
0 & & & & \\
1/2 & 1/2 & & & \\
1/2 & 0 & 1/2 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6
\end{array}
$$

```python
def euler(f, tau, t, u):
    k1 = f(t, u)
    return u + tau * k1
euler.order = 1; euler.name = 'Явный метод Эйлера'

def midpoint(f, tau, t, u):
    k1 = f(t, u)
    k2 = f(t + tau/2, u + tau/2*k1)
    return u + tau * k2
midpoint.order = 2; midpoint.name = 'Явный метод средней точки'

def rk4(f, tau, t, u):
    k1 = f(t, u)
    k2 = f(t + tau/2, u + tau/2*k1)
    k3 = f(t + tau/2, u + tau/2*k2)
    k4 = f(t + tau  , u + tau  *k3)
    return u + tau * (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4) / 6
rk4.order = 4; rk4.name = 'Классический метод РК 4 порядка'
```

```python
def fixed_stepsize(f, y0, tmax, method, tau=0.1):
    t = 0; u = y0
    T = [0]; Y = [y0]
    name = method.name
    while t < tmax:
        # Если последний шаг выхдит за tmax - уменьшаем tau
        if t + tau > tmax: tau = tmax - t
        u = method(f, tau, t, u)
        t += tau;
        T.append(t)
        Y.append(u)
    print('%s, всего шагов: %d'%(name, len(T)-1))
    return np.array(T), np.array(Y)
```

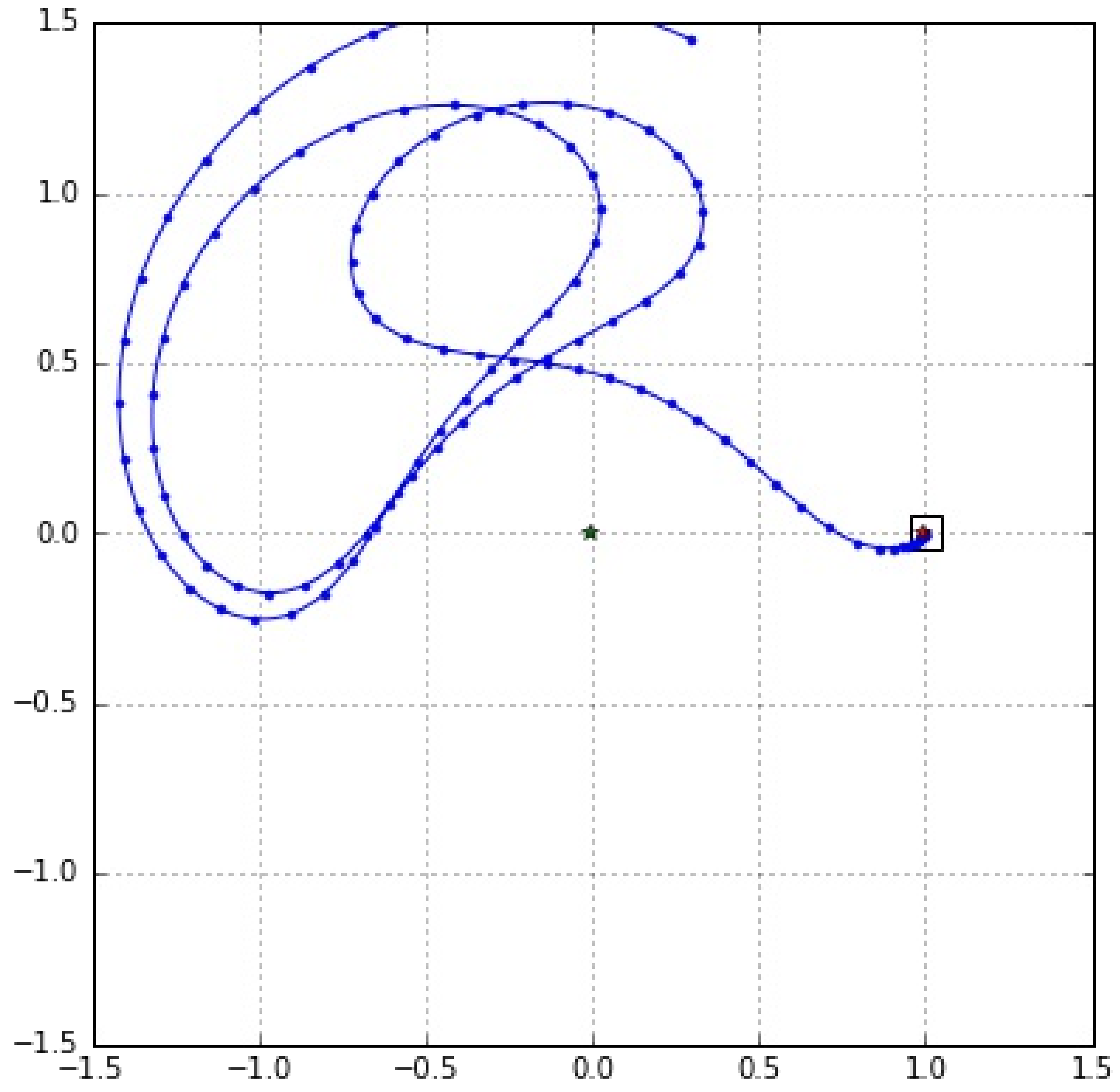
Метод с выбором шага

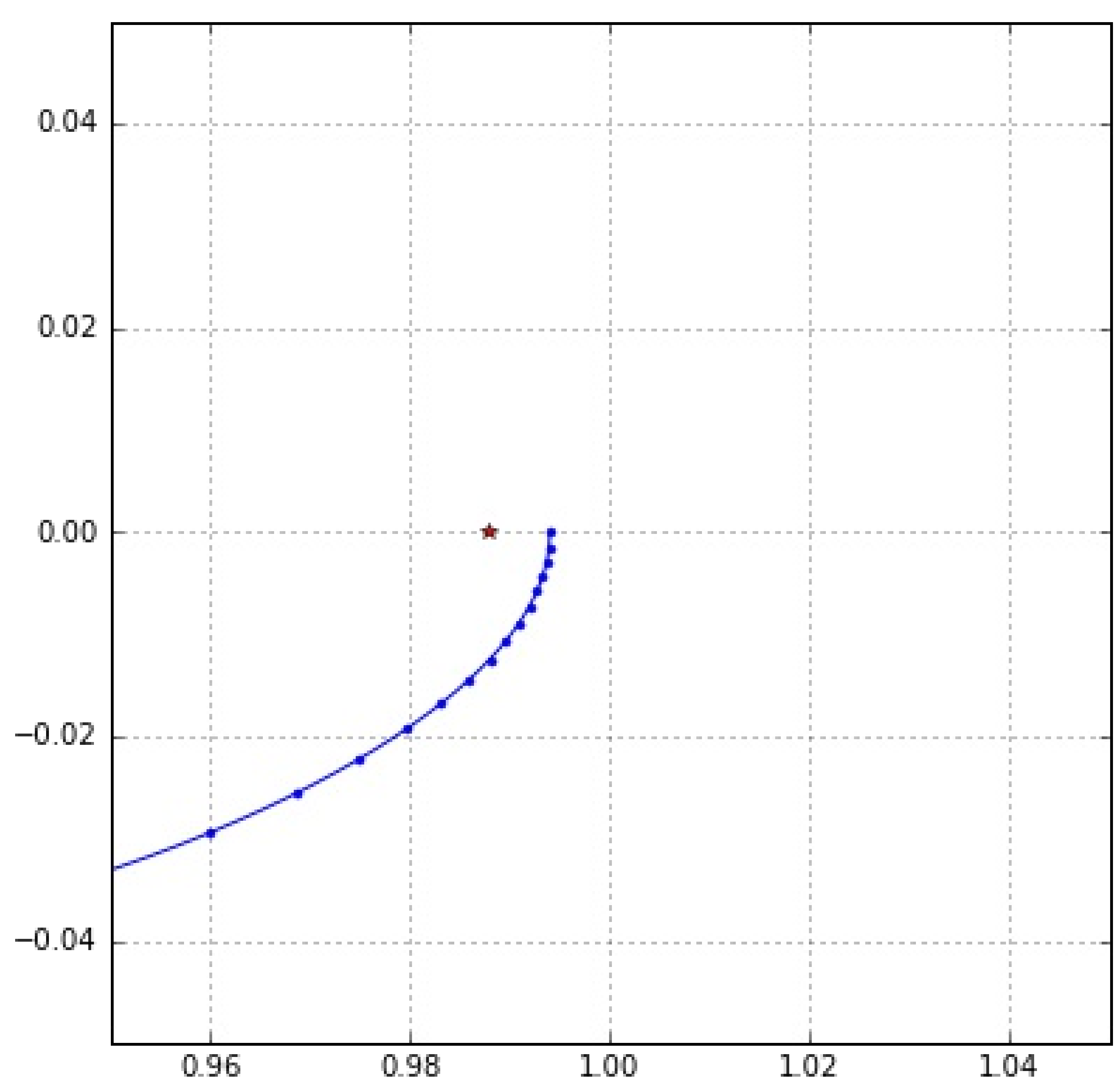
Методы Рунге-Кутты без проблем работают с неравномерной сеткой по времени. Значение $\tau_n = t_{n+1} - t_n$ может быть задано независимо от $\tau_{n-1}, \tau_{n-2}, \dots$ на предыдущих шагах. Обычно шаг стараются выбрать так, чтобы погрешность метода на каждом интервале $[t_n, t_{n+1}]$ не превышала заданную величину ε. Оценить погрешность на данном шаге можно пользуясь правилом Рунге. Более эффективный способ оценки погрешности дают *вложенные методы Рунге-Кутты*.

```python
def adaptive_stepsize(f, y0, tmax, method, tol, tau=0.1):
    t = 0; u = y0
    T = [0]; Y = [y0]
    p = method.order; name = method.name
    failed = 0 # Число неудачных шагов
    while t < tmax:
        if t + tau > tmax: tau = tmax - t
        u1 = method(f, tau, t, u)                # Целый шаг
        u2 = method(f, tau/2, t, u)
        u2 = method(f, tau/2, t+tau/2, u2)     # Два полушага
        err = np.linalg.norm(u1-u2)/(1-2**-p) # Правило Рунге
        fac = (tol/err)**(1 / (p+1))       # Подстраиваем tau
        taunew = tau * min(2, max(0.25, 0.8 * fac))
        if err < tol:            # Ошибка мала, принимаем шаг
            t += tau; u = u1
            T.append(t); Y.append(u)
        else: # Если ошибка велика, повторяем шаг с новым tau
            failed += 1
        tau = taunew
    print('%s, всего шагов: %d, отброшено: %d'%(name, len(T)-1, failed))
    return np.array(T), np.array(Y)
```

```
T, Y = adaptive_stepsize(aren, aren_init, aren_tmax, euler, 1e-4)
orbit_plot(Y, skip=20) # Отмечаем точкой каждый 20й шаг
```

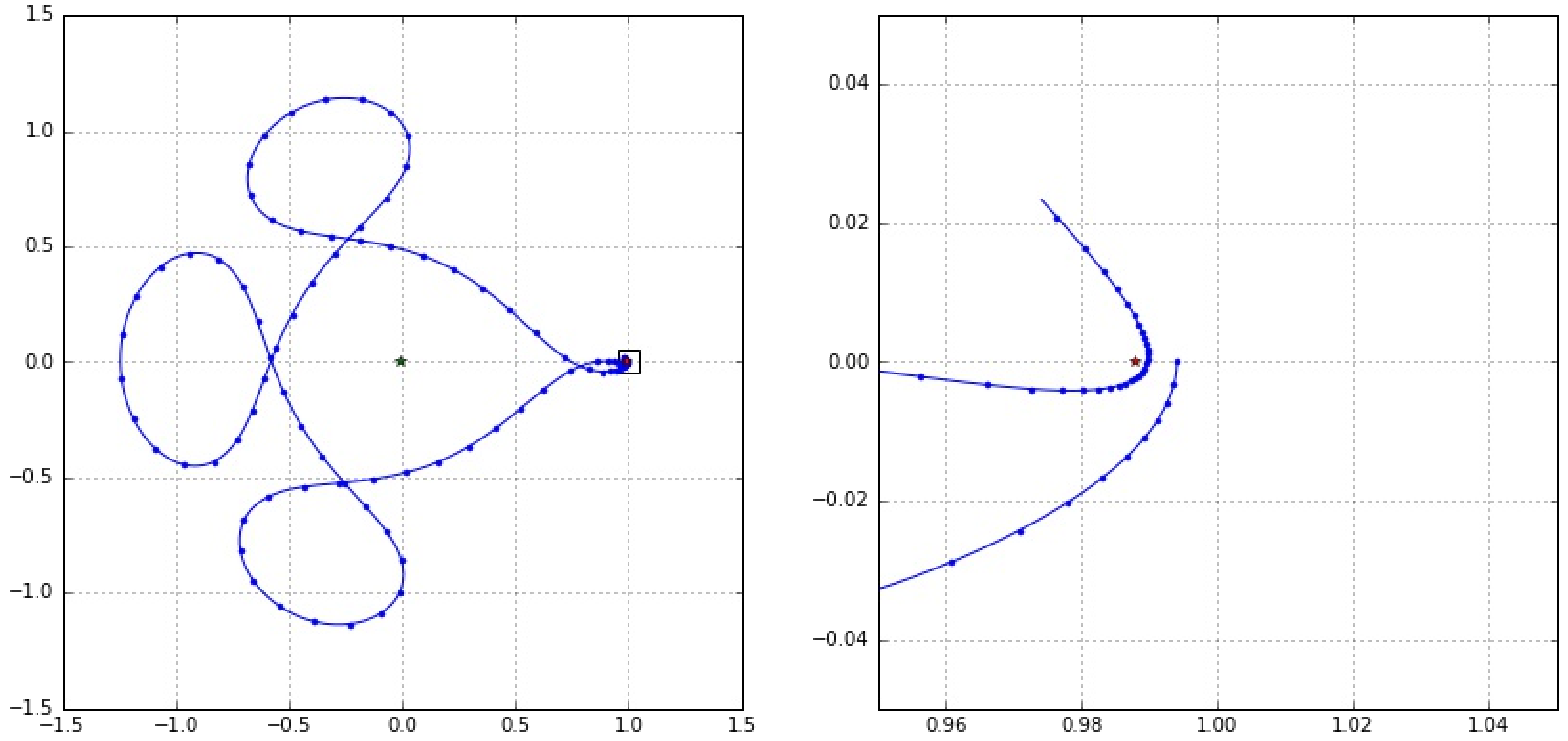
Явный метод Эйлера, всего шагов: 2321, отброшено: 6





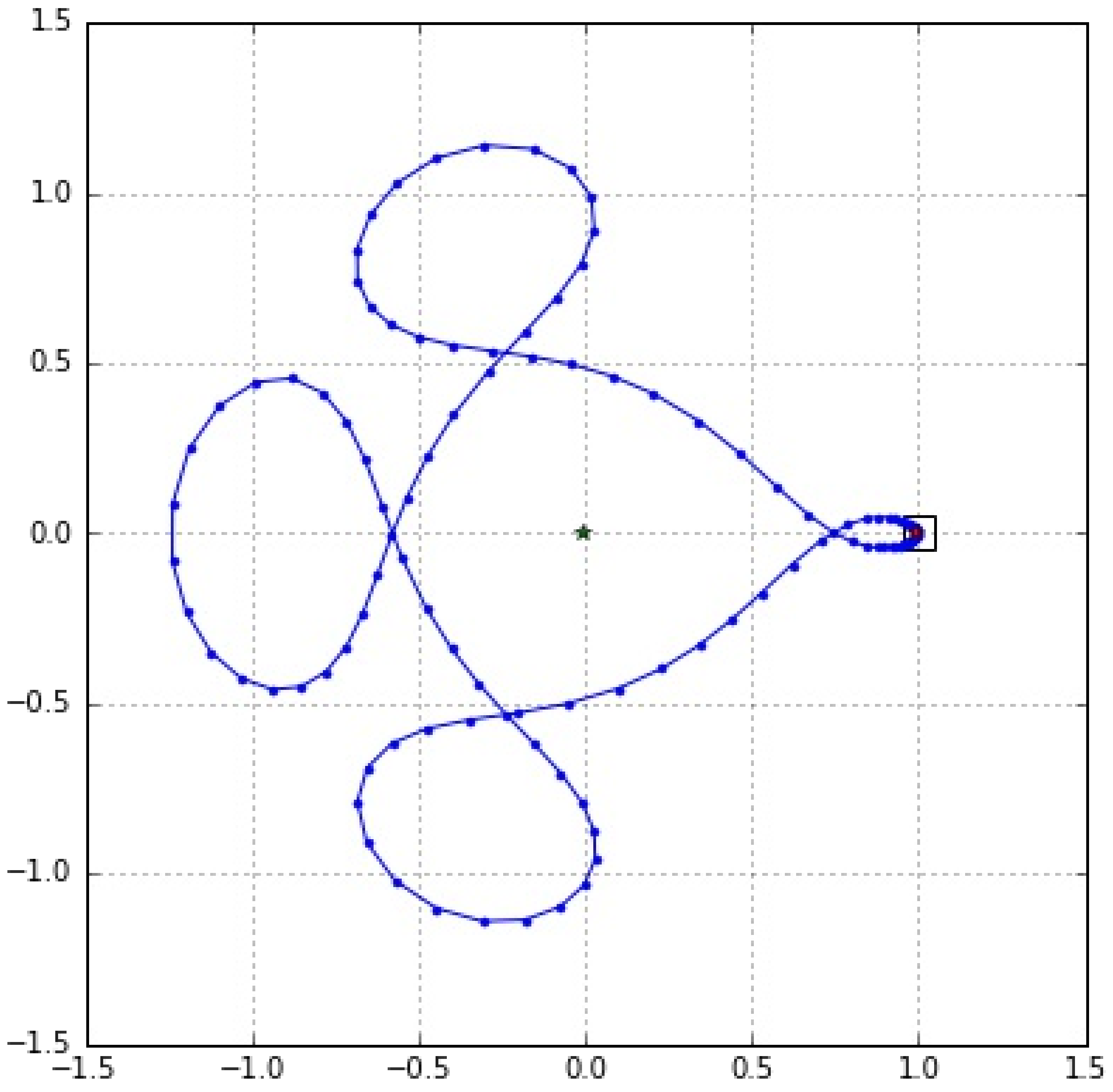
```
T, Y = adaptive_stepsize(aren, aren_init, aren_tmax, midpoint, 1e-4)
orbit_plot(Y, skip=5) # Отмечаем точкой каждый 5й шаг
```

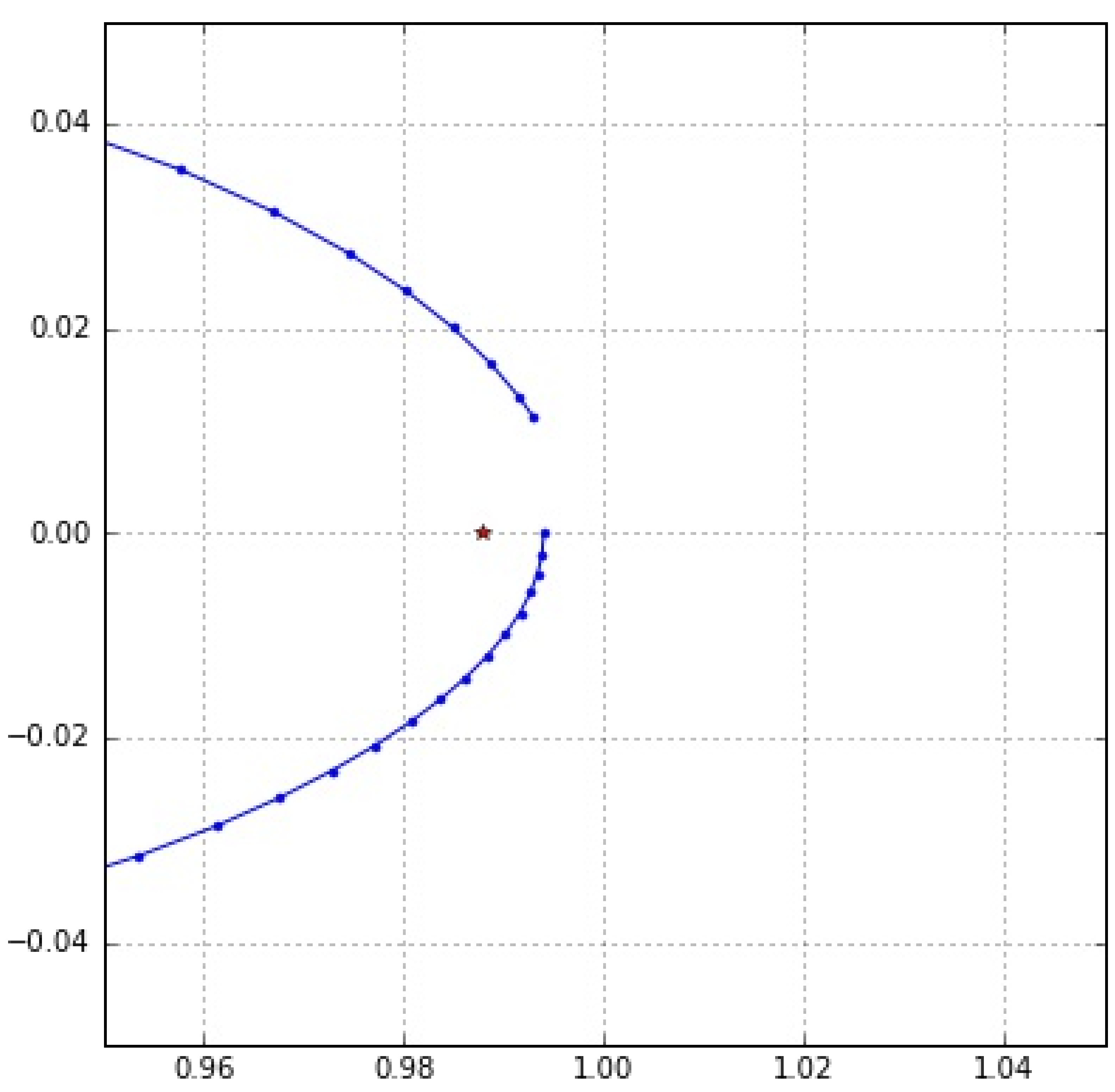
Явный метод средней точки, всего шагов: 563, отброшено: 5



```
T, Y = adaptive_stepsize(aren, aren_init, aren_tmax, rk4, 1e-4)
orbit_plot(Y, skip=1) # Отмечаем точкой каждый шаг
```

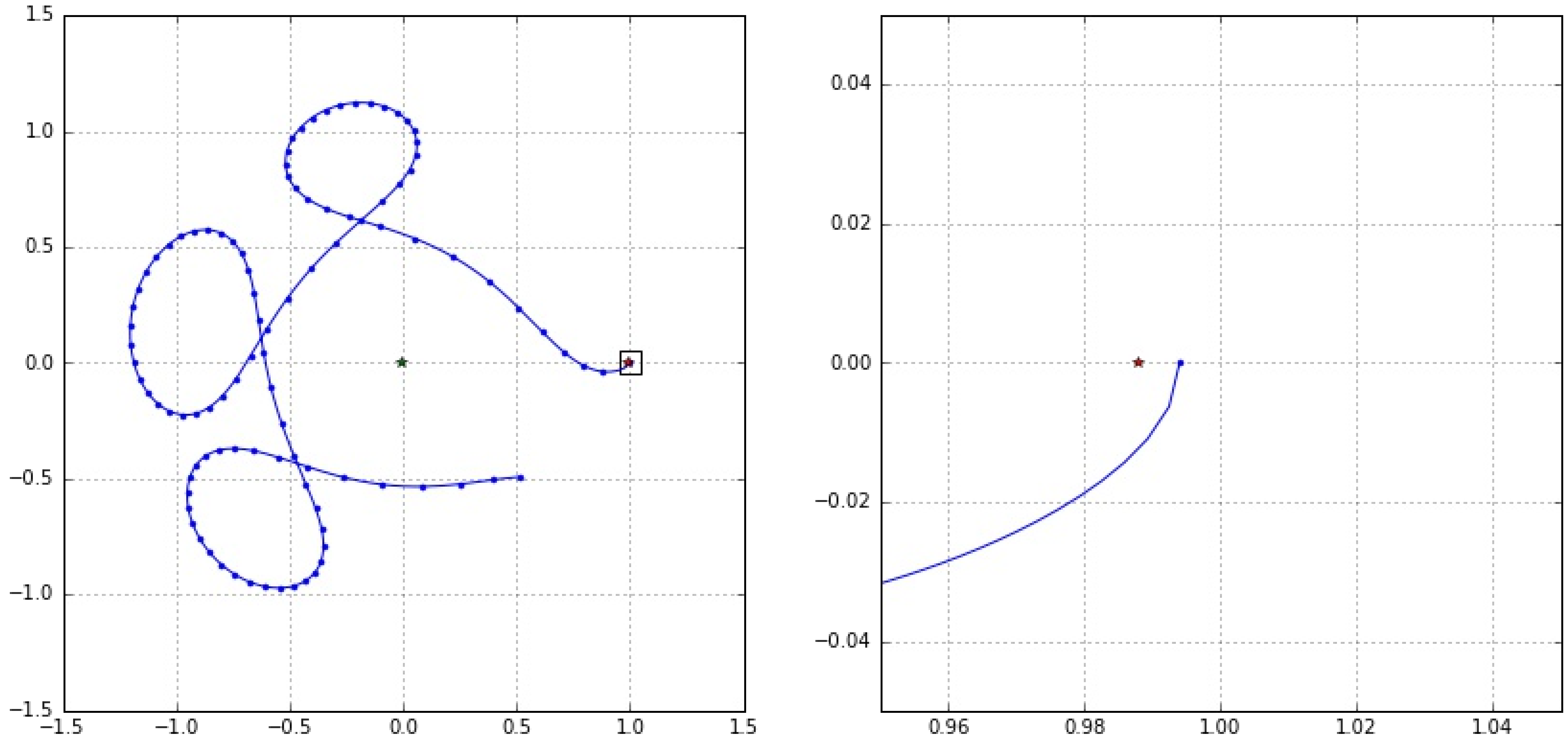
Классический метод РК 4 порядка, всего шагов: 117, отброшено: 16





```
T, Y = fixed_stepsize(aren, aren_init, aren_tmax, rk4, aren_tmax/5000)
orbit_plot(Y, skip=50) # Отмечаем точкой каждый 50й шаг
```

Классический метод РК 4 порядка, всего шагов: 5001



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).

Пример жесткой задачи из хим. кинетики

Рассмотрим две реакции

$$\mathrm{X} \overset{\text{slow}}{\to} \mathrm{Z}$$

$$\mathrm{Y} \overset{\text{fast}}{\to} \mathrm{X},$$

причем первая — медленная, а вторая — быстрая.

$$\frac{dx}{dt} = -0.5x + 30y$$

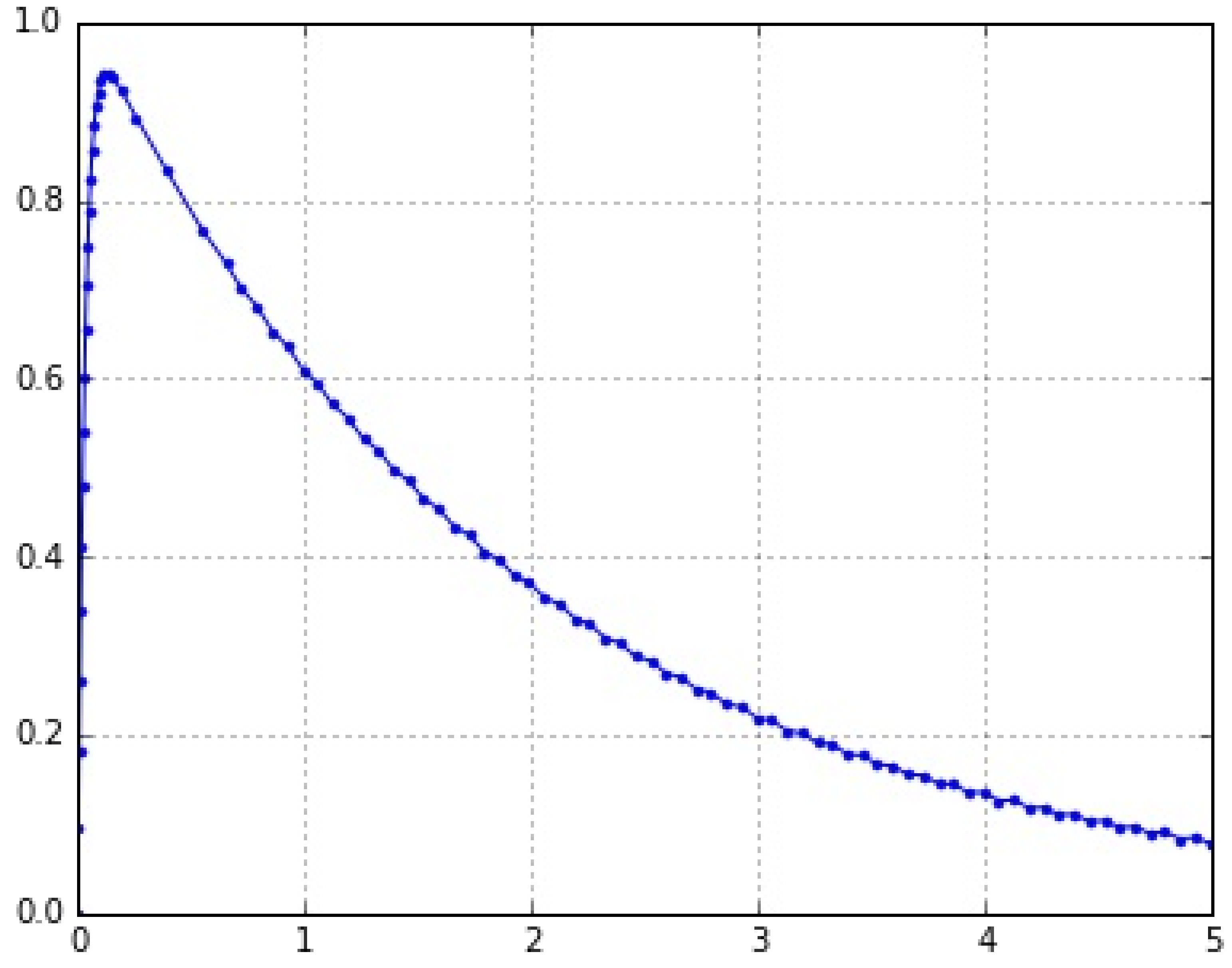
$$\frac{dy}{dt} = -30y$$

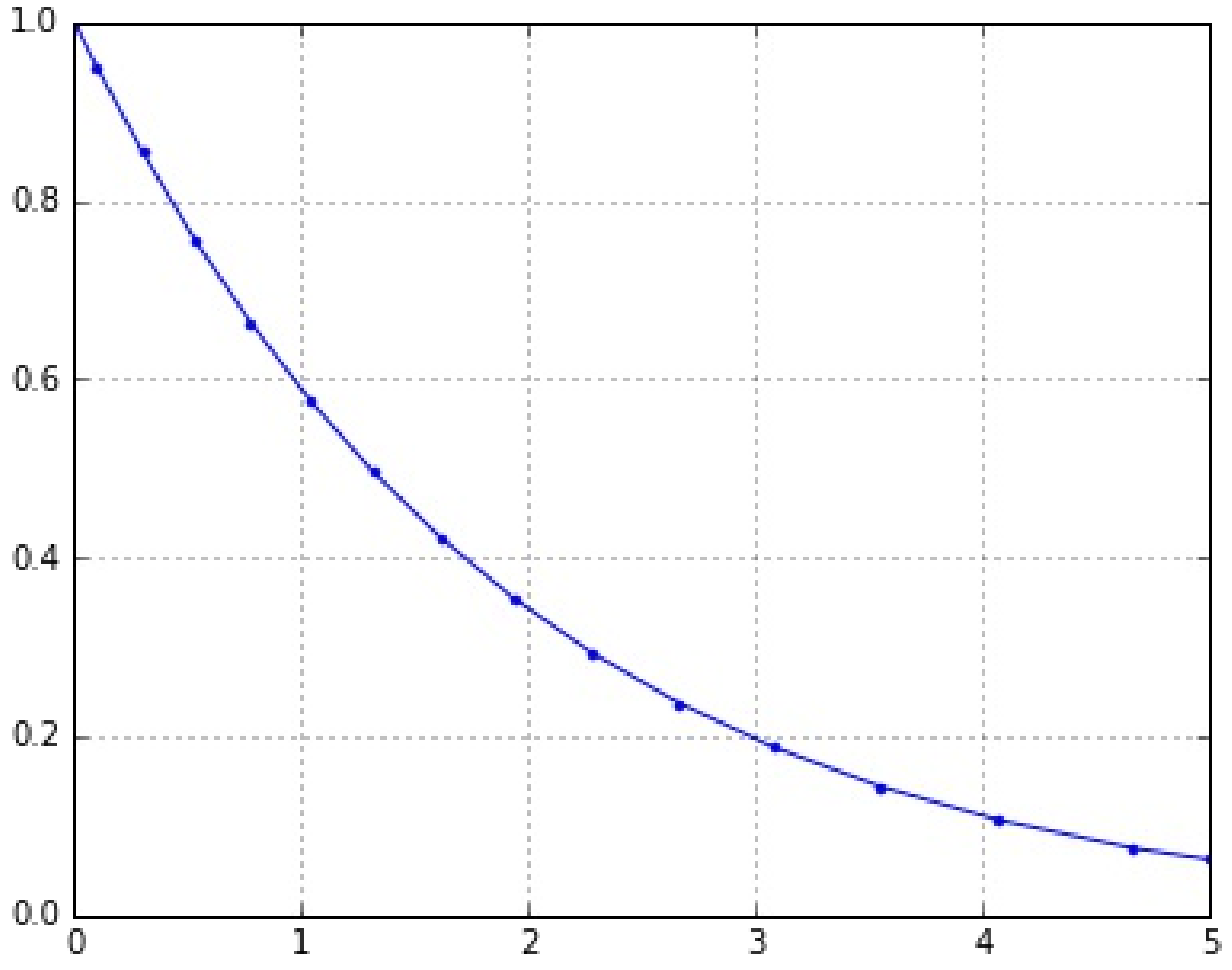
```python
def chem(t, u):
    x, y = u
    return np.array([-0.5*x+30*y, -30*y])

chem_init = np.array([0, 1])
chem_tmax = 5
```

```
T, Y = adaptive_stepsize(chem, chem_init, chem_tmax, euler, 1e-2)
T2, Y2 = adaptive_stepsize(lambda t,u:-0.5*u, np.array([1]), chem_tmax, euler, 1e-2)
plt.figure(figsize=(14, 5))
plt.subplot(1,2,1); plt.plot(T, Y[:, 0], '.-'); plt.grid();
plt.subplot(1,2,2); plt.plot(T2, Y2[:, 0], '.-') # <<похожая>> задача
plt.grid(); plt.show()
```

Явный метод Эйлера, всего шагов: 92, отброшено: 6

Явный метод Эйлера, всего шагов: 15, отброшено: 0





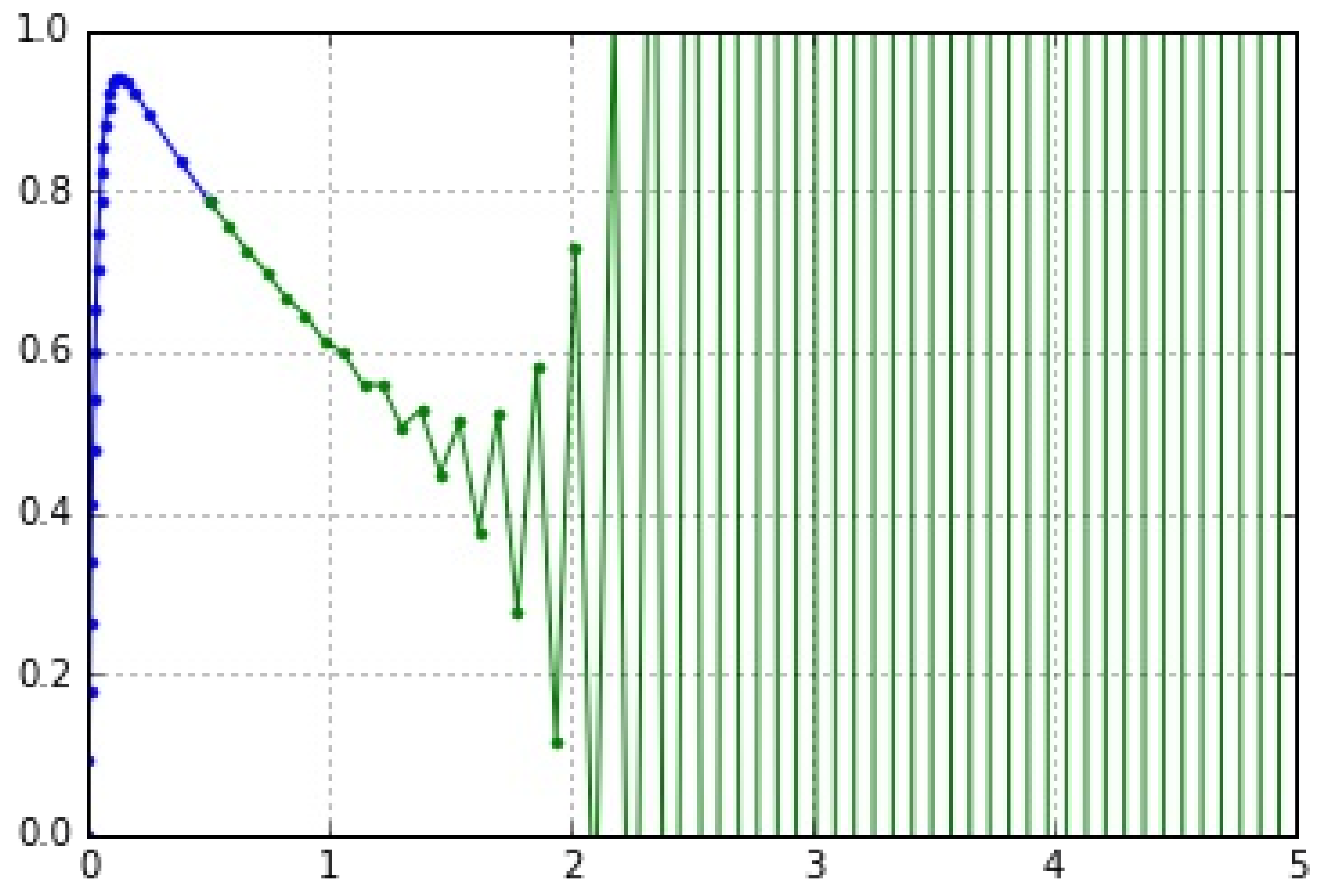
Ручное управление шагом

Попробуем руками увеличить шаг в "гладкой" области.

```
T1, Y1 = adaptive_stepsize(chem, chem_init, 0.5, euler, 1e-2)
T2, Y2 = fixed_stepsize(chem, Y1[-1,:], chem_tmax-0.5, euler, 0.08)
plt.plot(T1, Y1[:, 0], '.-')
plt.plot(T2+0.5, Y2[:, 0], '.-')
plt.axis([0, 5, 0, 1])
plt.grid(); plt.show()
```

Явный метод Эйлера, всего шагов: 25, отброшено: 3

Явный метод Эйлера, всего шагов: 57



Жесткая устойчивость

Решение выглядит как неустойчивое. Но сам метод устойчив (как любой метод Рунге-Кутты) и при уменьшении шага этот эффект пропадает. Все явные методы подвержены этой проблеме — они продолжают чувствовать быстрые процессы даже после того, как они прекращают существенно влиять на решение.

Однако, некоторые неявные методы вполне хорошо такие задачи решают. Такие методы называют A-устойчивыми.

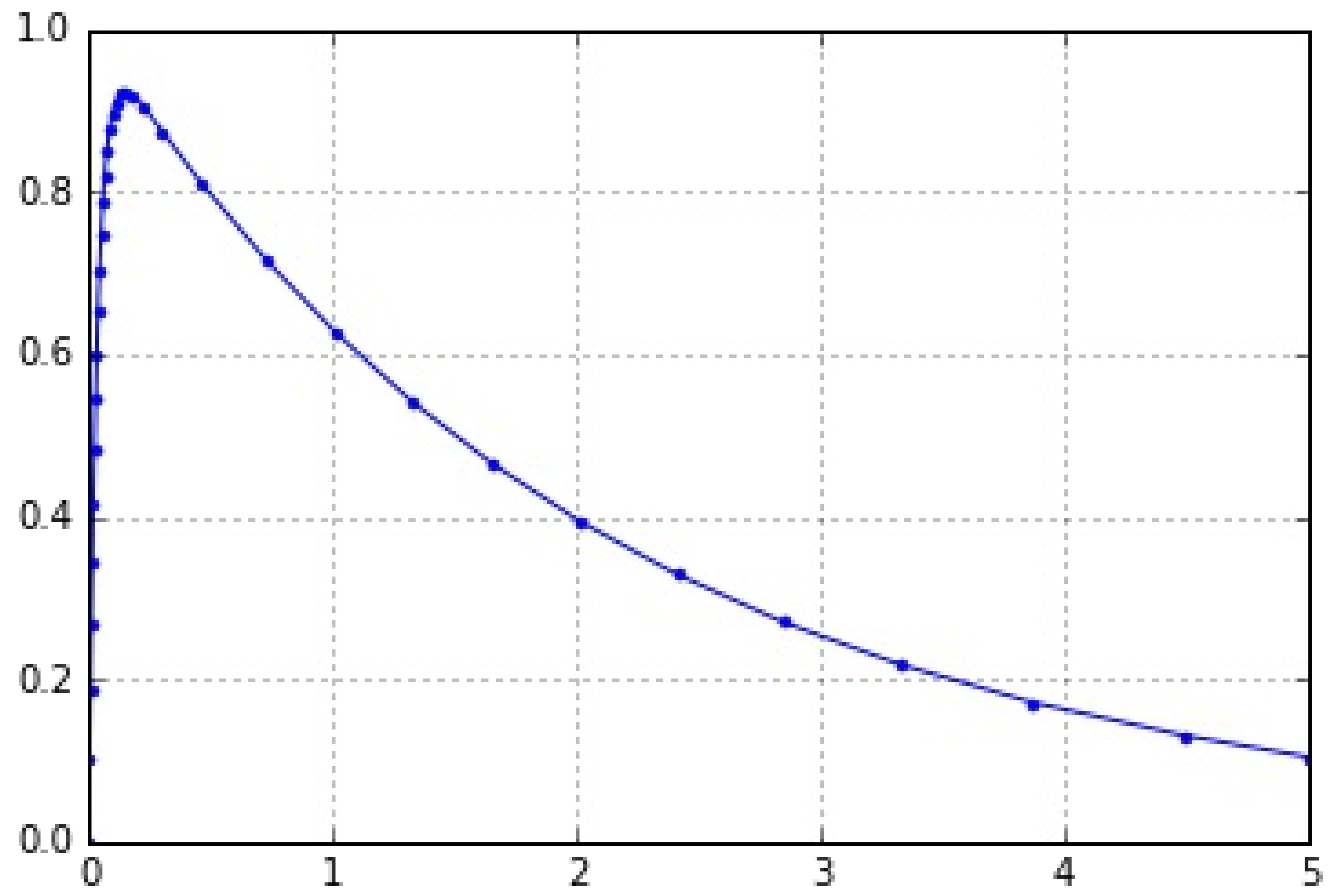
```python
def newton(F, dFdx, x0):
    x = x0.copy()
    for it in range(50):
        dx = np.linalg.solve(dFdx(x), F(x))
        x -= dx
        if np.linalg.norm(dx) < 1e-12:
            return x
    print('Максимальное число итераций превышено!')
    return x
```

```python
def imeuler(f, h, t, u):
    E = np.eye(len(u))
    k1 = newton(
        lambda k: k - f(t+h, u+h*k), # Уравнение k-f(t+h,u+h*k) = 0
        lambda k: E - h*f(t+h, u+h*k, jac=True), # Производная по k
        f(t, u)) # Начальное приближение
    return u + h*k1
imeuler.order=1; imeuler.name='Неявный Эйлер'

def immidpoint(f, h, t, u):
    E = np.eye(len(u))
    k1 = newton(
        lambda k: k - f(t+h/2, u+h/2*k), # Уравнение k-f(t+h/2,u+h/2*k) = 0
        lambda k: E - h*f(t+h/2, u+h/2*k, jac=True), # Производная по k
        f(t, u)) # Начальное приближение
    return u + h*k1
immidpoint.order=2; immidpoint.name='Неявная средняя точка'
```

```python
# Добавим вычисление производной, необходимой для метода Ньютона
def chem(t, u, jac=False):
    x, y = u
    if jac:
        return np.array([[-0.5, 30], [0, -30]])
    return np.array([-0.5*x+30*y, -30*y])
```

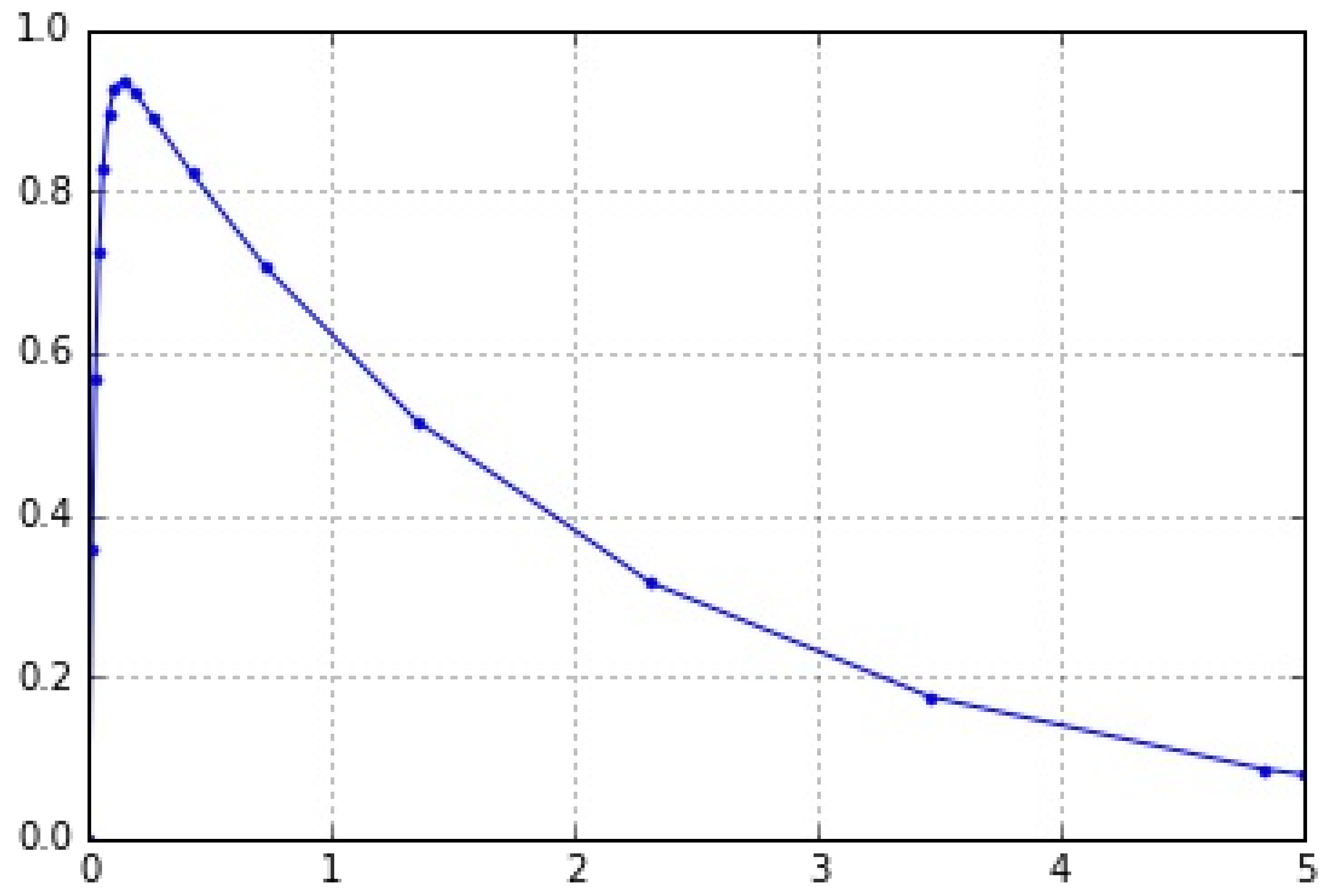
```
T, Y = adaptive_stepsize(chem, chem_init, chem_tmax, imeuler, 1e-2)
plt.plot(T, Y[:, 0], '.-')
plt.grid(); plt.show()
```

Неявный Эйлер, всего шагов: 34, отброшено: 3



```
T, Y = adaptive_stepsize(chem, chem_init, chem_tmax, immidpoint, 1e-2)
plt.plot(T, Y[:, 0], '.-')
plt.grid(); plt.show()
```

Неявная средняя точка, всего шагов: 16, отброшено: 2



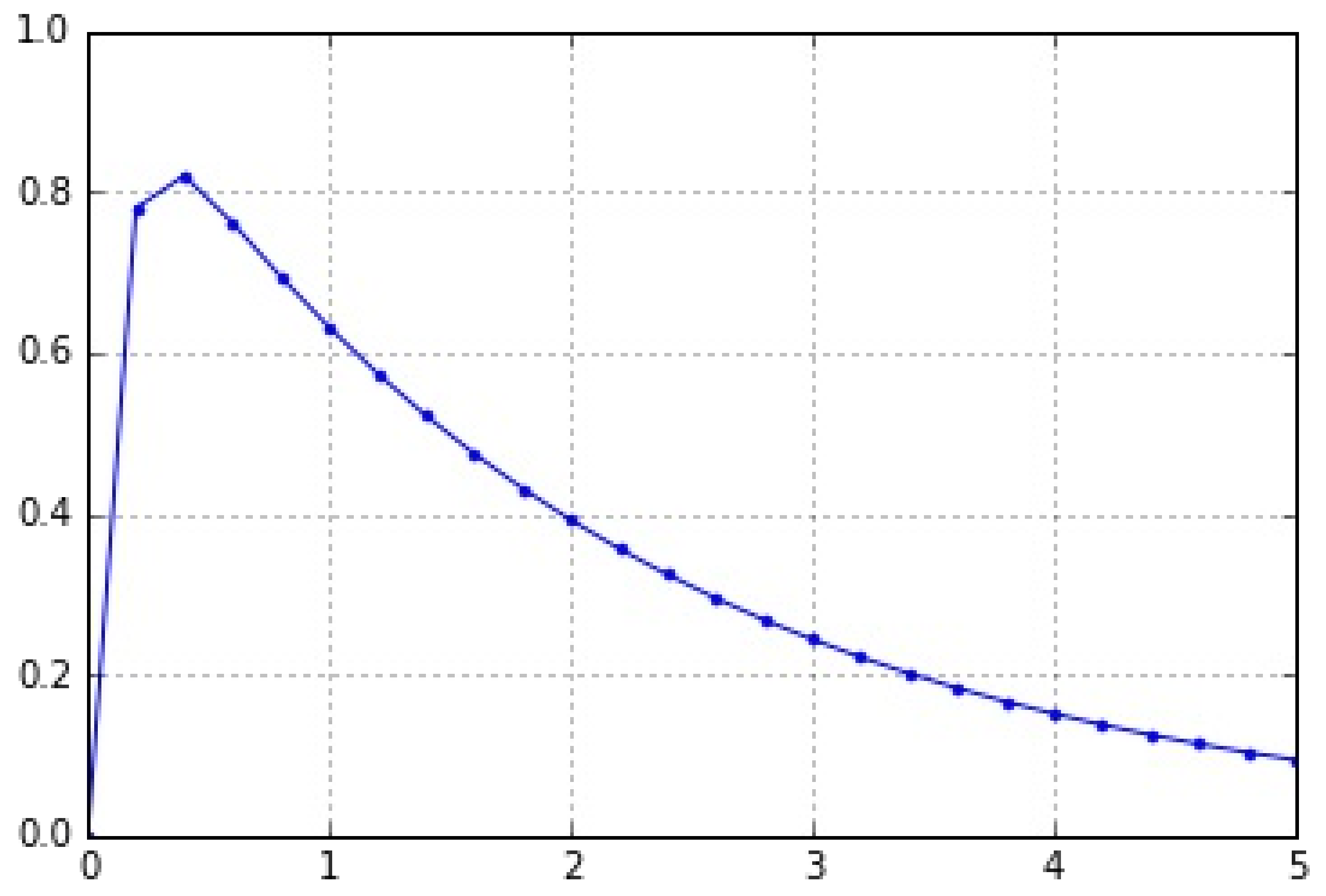
Счет всюду с большим шагом

Оказывается, для некоторых методов даже необязательно измельчать шаг в области быстрых процессов! Если точность не критична, а необходимо просто получить качественную картину процесса, эти методы могут быть удобны.

Такие методы называются L-устойчивыми.

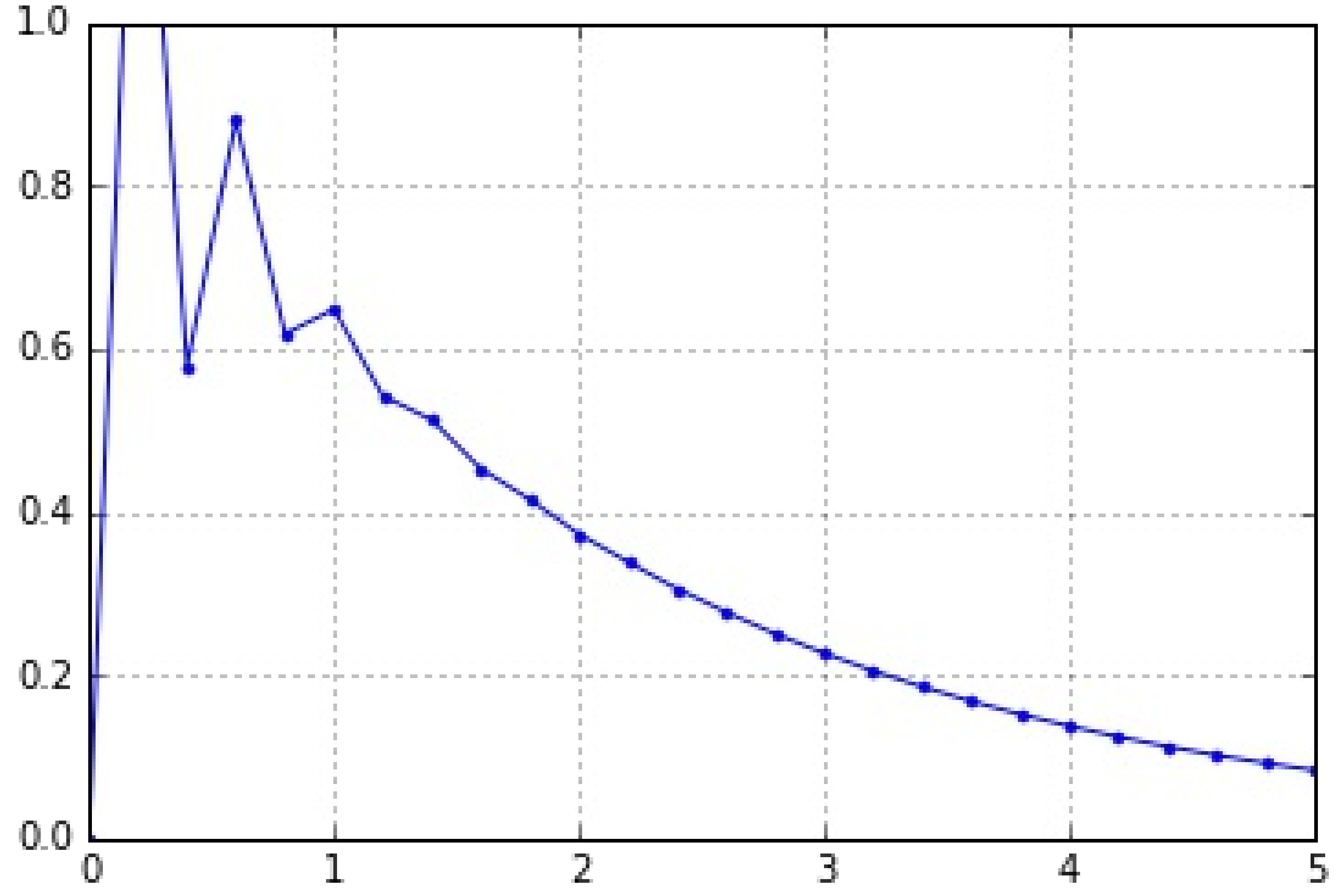
```
T, Y = fixed_stepsize(chem, chem_init, chem_tmax, imeuler, 0.2)
plt.plot(T, Y[:, 0], '.-')
plt.ylim(0, 1)
plt.grid(); plt.show()
```

Неявный Эйлер, всего шагов: 25



```
T, Y = fixed_stepsize(chem, chem_init, chem_tmax, immidpoint, 0.2)
plt.plot(T, Y[:, 0], '.-')
plt.ylim(0, 1)
plt.grid(); plt.show()
```

Неявная средняя точка, всего шагов: 25



Возмущения решения

Расмотрим решение $\mathbf{y}(t)$, удовлетворяющее системе $\frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} = \mathbf{G}(t, \mathbf{y}(t))$.

Пусть $\mathbf{y}(t) + \boldsymbol{\epsilon}(t)$ — близкое решение той же системы. Тогда в первом приближении отклонение $\boldsymbol{\epsilon}(t)$ удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению

$$\frac{d\boldsymbol{\epsilon}(t)}{dt} = \mathbf{A}(t)\boldsymbol{\epsilon}(t), \qquad \mathbf{A}(t) = \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}}(t, \mathbf{y}(t)).$$

Модельное уравнение для возмущения

Понять, как ведет себя решение

$$\frac{d\boldsymbol{\epsilon}(t)}{dt} = \mathbf{A}(t)\boldsymbol{\epsilon}(t),$$

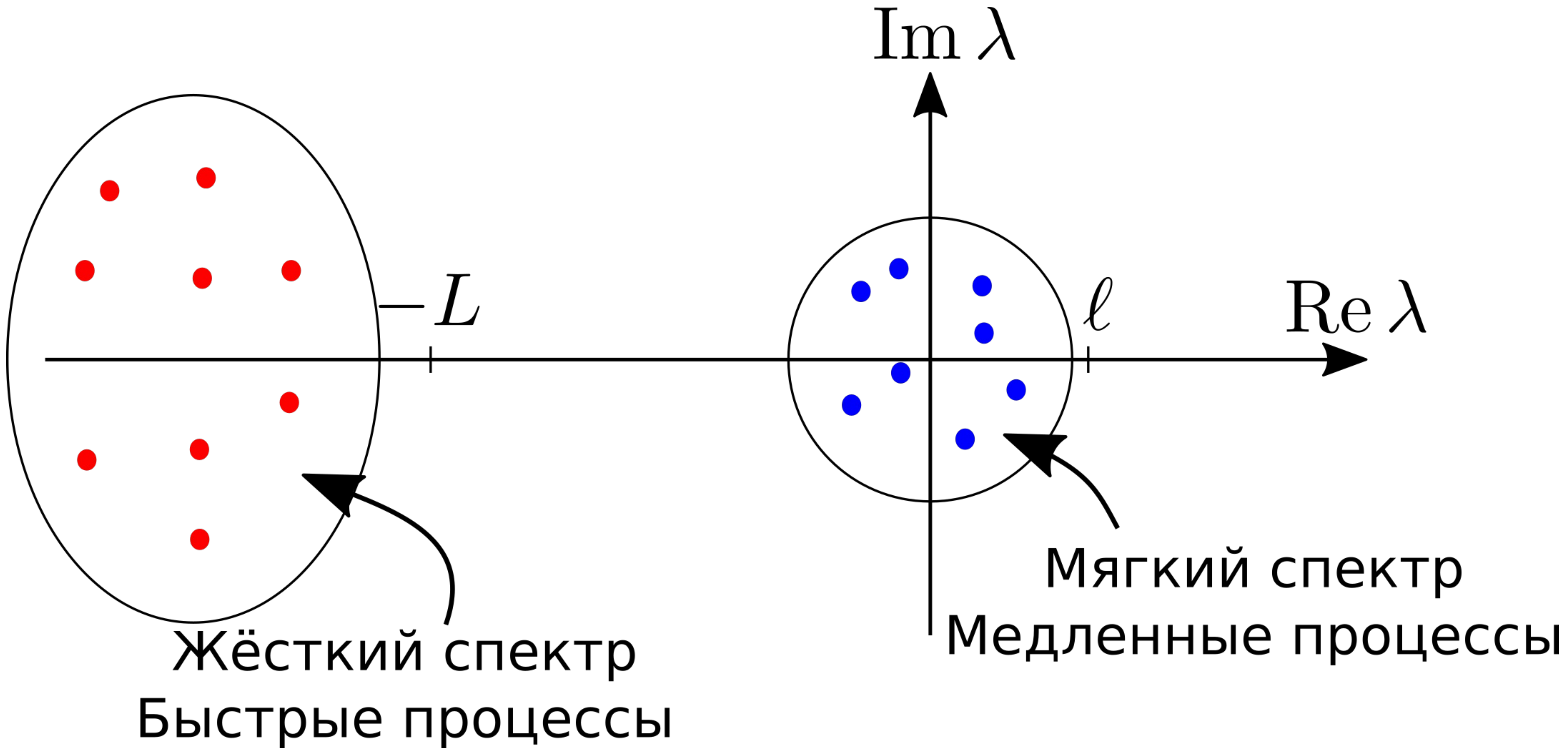
можно рассматривая совокупность модельных скалярных уравнений

$$\frac{d\epsilon}{dt} = \lambda\epsilon, \qquad \lambda \in \lambda(\mathbf{A}).$$

Таким образом, о поведении возмущений трактории в задаче можно судить по *спектру матрицы Якоби системы*.

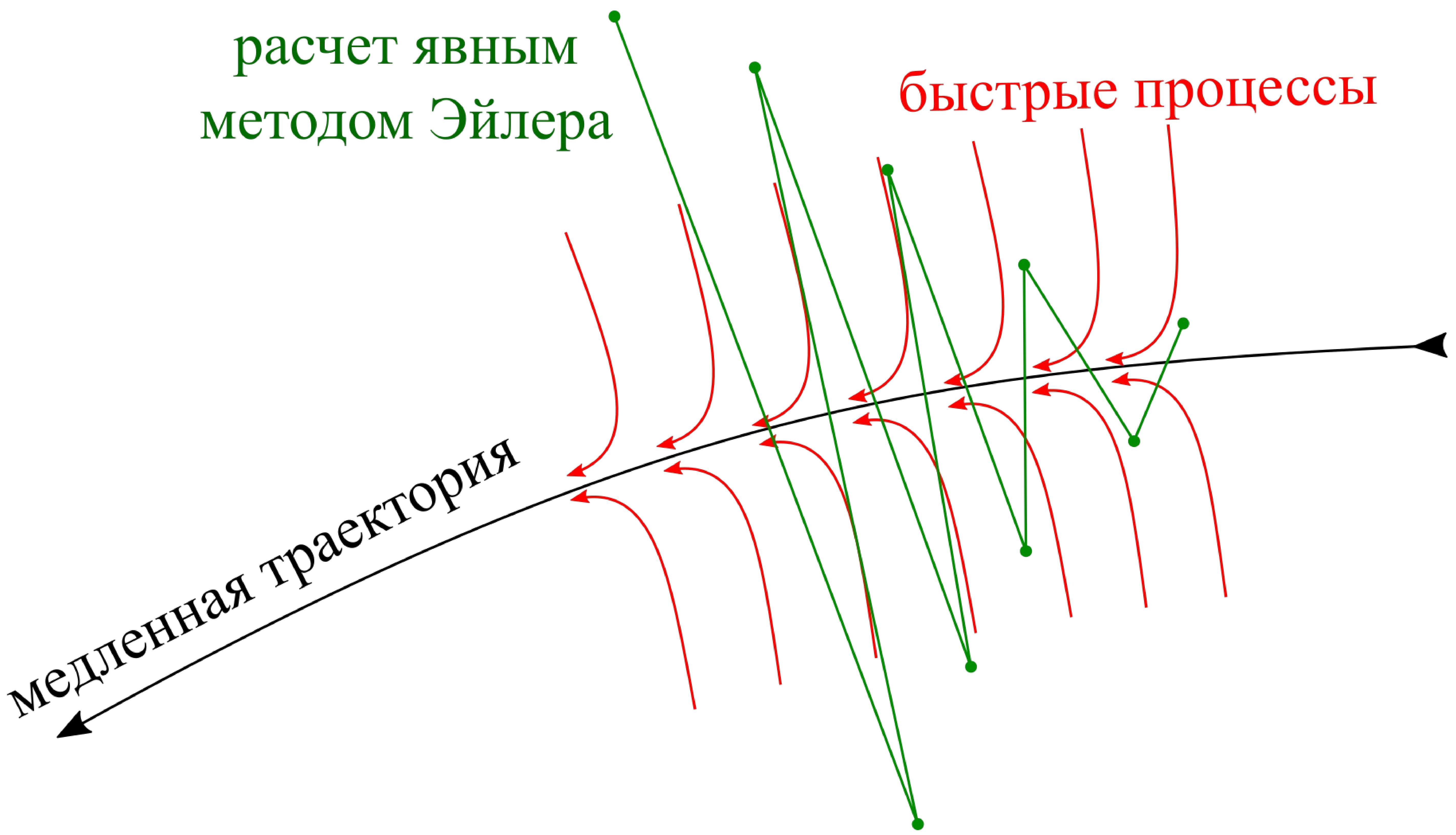
Спектр жесткой задачи

В спектре матрицы Якоби жесткой системы ОДУ можно выделить две зоны



Отношение $L/\ell \gg 1$ называется *показателем жесткости задачи*.

Решение жесткой задачи явным методом Эйлера



Проверка метода на жесткую устойчивость

Чтобы понять, годится ли тот или иной метод для решения жесткой задачи, необходимо применить его к модельному уравнению

$$\frac{dy}{dt} = \lambda y, \qquad \lambda \in \mathbb{C},\ \operatorname{Re}\lambda < 0,$$

и посмотреть, будет ли решение затухать (отклонение от траектории будут уменьшаться) или, наоборот, расти (отклонение будет увеличиваться).

Функция устойчивости

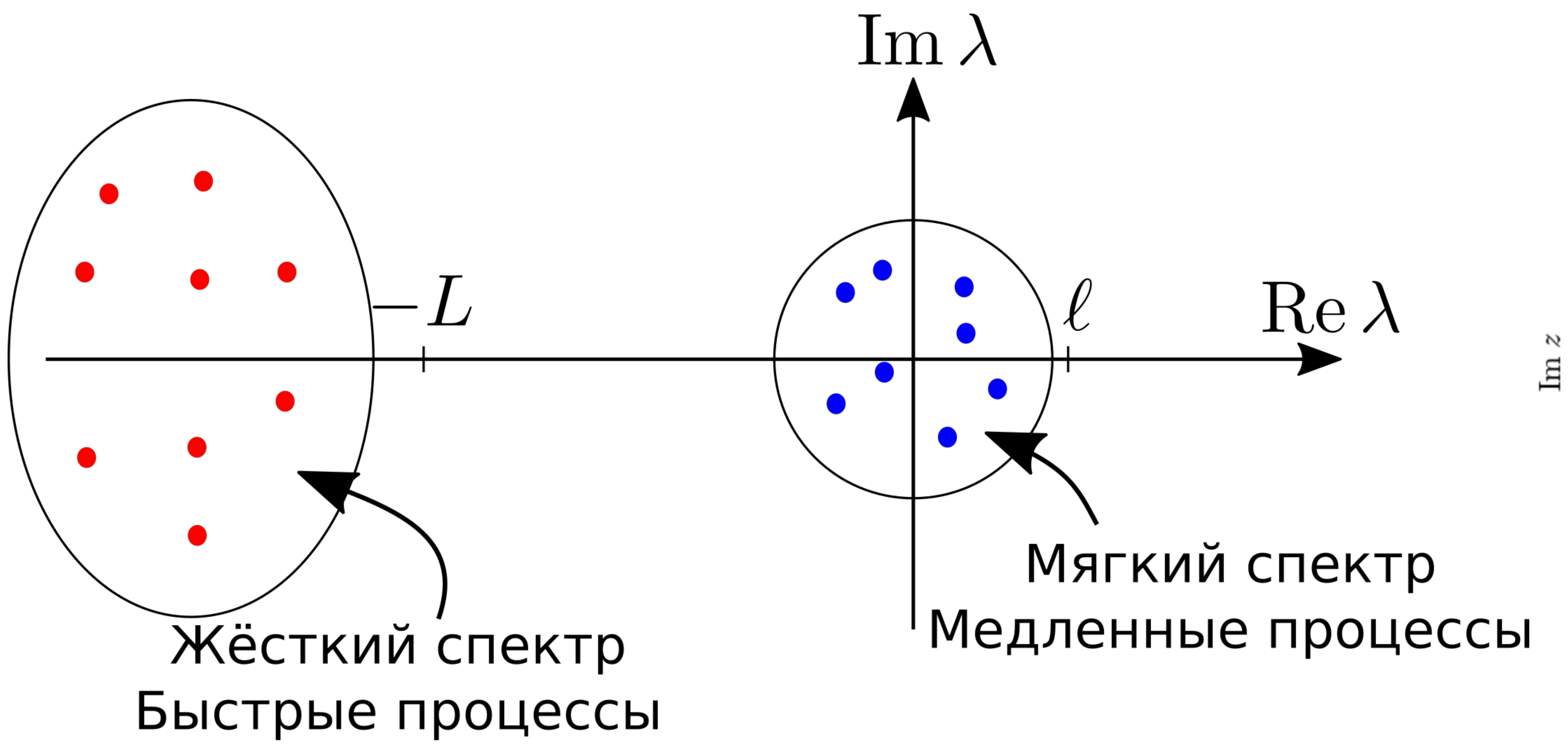
Оказывается, что применение любого одношагового метода (например, любого метода Рунге-Кутты) к $y' = \lambda y$ дает следующий численный метод:

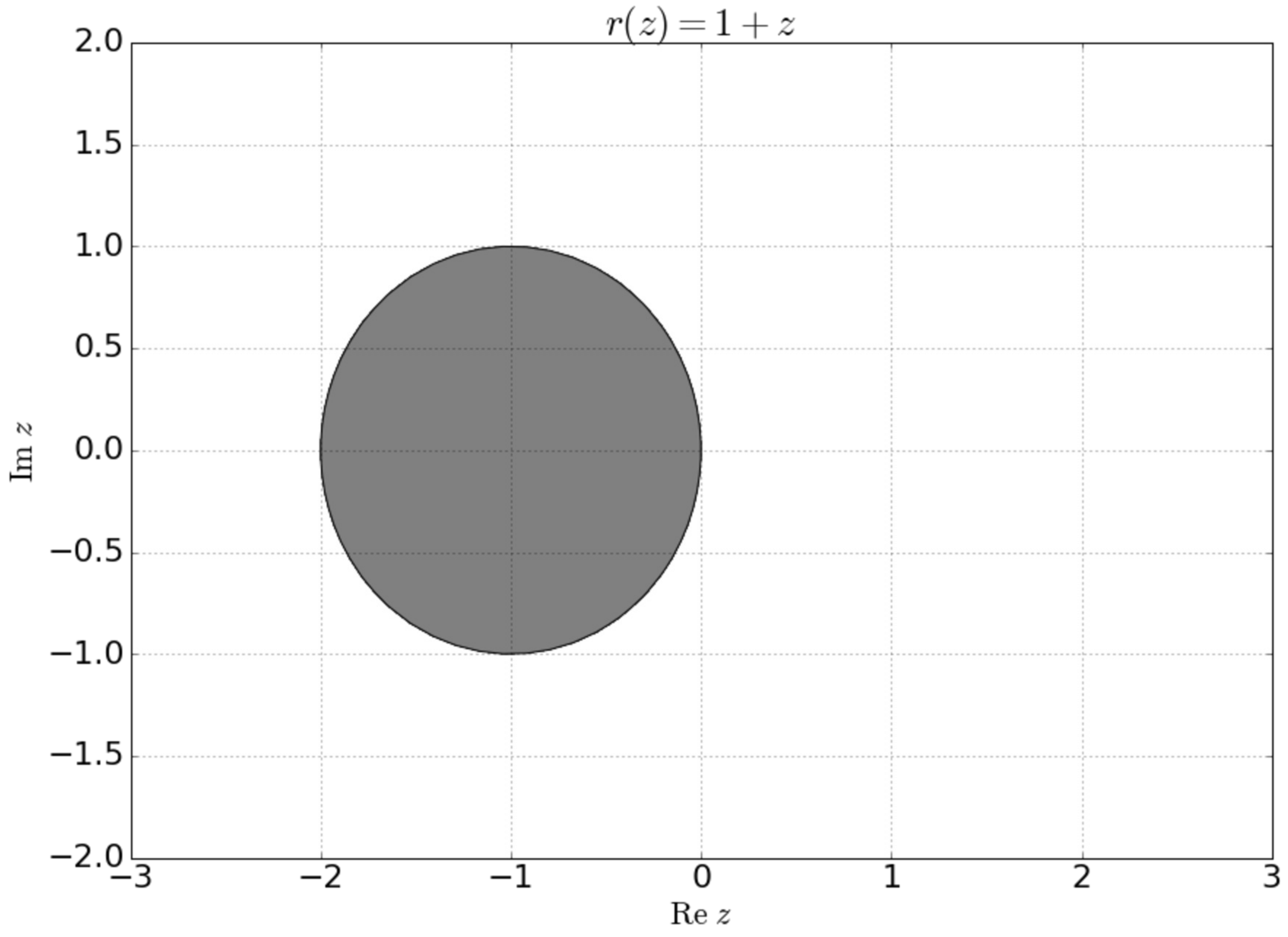
$$u_{n+1} = r(\lambda\tau)u_n,$$

где $r(z)$ — функция, зависящая только от самого метода. Эта функция называется *функцией устойчивости* данного метода. Легко видеть, что условие $|r(\lambda\tau)| \leqslant 1$ гарантирует отсутствие развития неустойчивости. Область значений z, где $|r(z)| \leqslant 1$ называется *областю устойчивости метода*.

Область устойчивости и спектр задачи

Для того, чтобы численный метод был жестко устойчив для данной задачи требуется, чтобы все жесткие собственные числа λ_i задачи попали после умножения на τ в область устойчивости.





Функция устойчивости метода Рунге-Кутты

Для методов Рунге-Кутты существует удобная формула, выражающая $r(z)$ через коэффициенты таблицы Бутчера.

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b \end{array} \qquad r(z) = \frac{\det(E - zA + zB)}{\det(E - zA)}, \qquad B = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} b = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \dots & b_n \\ b_1 & b_2 & \dots & b_n \\ & & \vdots & \\ b_1 & b_2 & \dots & b_n \end{pmatrix}$$

Свойства функции устойчивости

Для метода Рунге-Кутты с s стадиями

$$r(z) = \frac{P_s(z)}{Q_s(z)},$$

где $P_s(z), Q_s(z)$ — многочлены степени не больше s. Если метод явный, то $Q_s(z) = 1$.

Свойства функции устойчивости

Сравним точное решение модельного уравнения

$$[y]_{n+1} = e^{\lambda\tau}[y]_n$$

и численное решение

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

Условие сходимости порядка p: $\max_n |[y]_n - u_n| = O(\tau^p)$ влечет

$$r(z) = e^z + O(z^{p+1})$$

Классификация методов по функции устойчивости

Если область устойчивости содержит левую комплексную полуплоскость $\mathbb{C}^- = \{z \mid \operatorname{Re} z < 0\}$, метод называется A-устойчивым (подходит для всех жестких задач).

Если область устойчивости содержит конус $\left\{z \mid \left|\frac{\pi}{2} - \arg z\right| < \alpha\right\}$, метод называется A($\alpha$)-устойчивым (подходит для жестких задач, у которых жесткий спектр содержится в таком же конусе).

Если метод A-устойчив и дополнительно $\lim\limits_{z \to -\infty} r(z) = 0$, метод называется L-устойчивым.

Позволяет интегрировать с большим шагом даже участки, где быстрые процессы еще не закончились, качественно повторяя картину решения.