

Численное решение жестких систем ОДУ

1. Введение.

Задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений ставится следующим образом

$$\mathbf{y}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)), \quad \mathbf{y}(x_0) = \mathbf{y}_0$$

где \mathbf{y} и \mathbf{f} – вектор-функции. Однако для простоты обычно рассматривается одно уравнение, так как обобщение на системы часто очевидно

$$y'(x) = f(x, y(x)), \quad y(x_0) = y_0.$$

где $y(x)$ неизвестная функция и f заданная функция. Будем предполагать, что решение рассматриваемой задачи существует и единственно на некотором отрезке $[0, X]$. Кроме того, в процессе изложения от функций y и f может потребоваться дополнительная гладкость, которая будет предполагаться без конкретных уточнений.

Разобьем отрезок на части точками x_k так, что $x_{k+1} = x_k + h_k$, $k=0, \dots, M-1$. Будем искать приближенное решение в точках x_k .

Численные методы решения ОДУ делятся на одношаговые и многошаговые, которые в свою очередь можно разделить на явные и неявные. Явные одношаговые методы можно записать в виде

$$y_{k+1} = y_k + h\Phi(x_k, y_k)$$

где для простоты полагаем $h_k = h$, через y_k будем обозначать приближенное решение в точке x_k , а $y(x)$ – точное решение, в частности, $y(x_k)$ – точное решение в точке x_k . Для продвижения на один шаг одношаговые методы используют значения решения лишь в одной предыдущей точке.

Явные многошаговые методы используют решение в нескольких предыдущих точках

$$y_{k+1} = y_k + h\Phi(x_k, y_k, y_{k-1}, \dots, y_{k-m})$$

Неявные одношаговые методы записываются в виде

$$y_{k+1} = y_k + h\Phi(x_{k+1}, y_{k+1})$$

Неявные многошаговые

$$y_{k+1} = y_k + h\Phi(x_{k+1}, y_{k+1}, y_k, \dots, y_{k-(m-1)})$$

В неявных методах для нахождения y_{k+1} требуется решить, вообще говоря, нелинейное уравнение или в общем случае систему уравнений.

Далее будем использовать понятие порядка метода. Возьмем любую формулу метода и подставим в нее точное решение. Например, для явного одношагового метода будем иметь

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + h\Phi(x_k, y(x_k)) + \delta_{k+1}$$

Величину δ_{k+1} называют погрешностью метода на шаге.

Определение. Будем говорить, что метод имеет порядок p ($p > 0$), если $\delta_{k+1} = O(h^{p+1})$. Последнее означает, что справедливо неравенство $|\delta_{k+1}| \leq Ch^{p+1}$, где константа C не зависит от h .

Очевидно, что явные методы в реализации проще неявных и с этой точки зрения предпочтительнее, однако имеется класс задач, для которых явные методы не работают. Это так называемые жесткие задачи.

2. Примеры жестких уравнений.

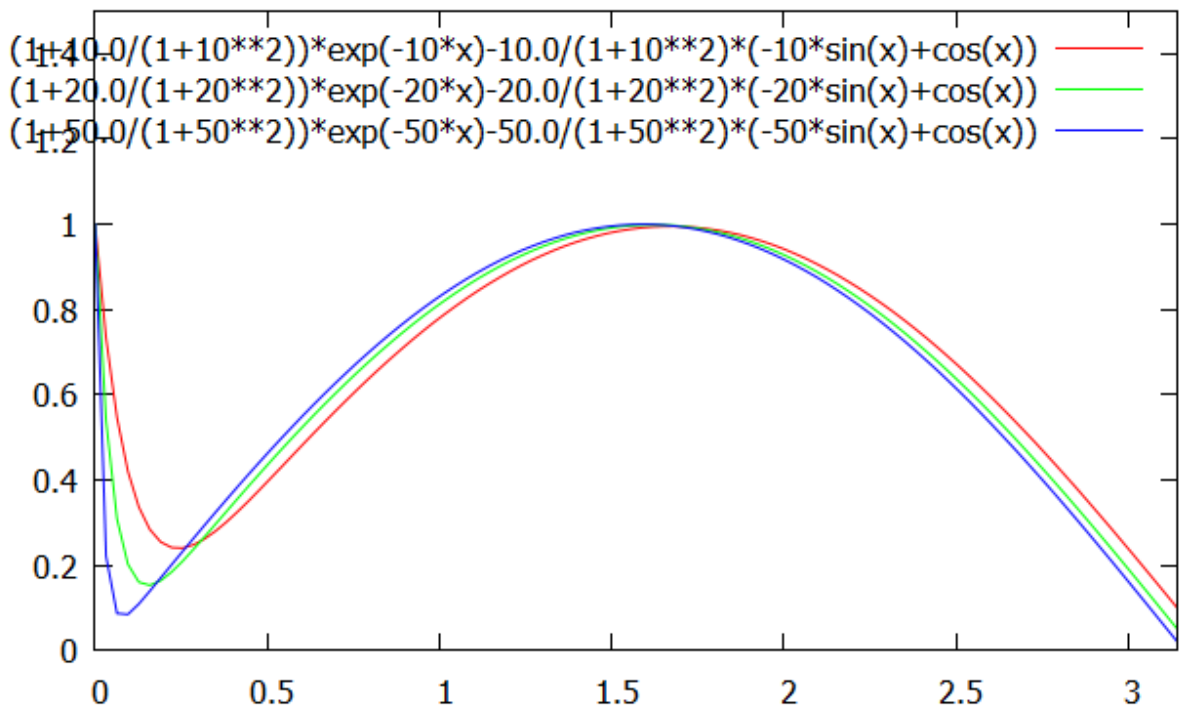
1) $y' = -\lambda(y - \sin x)$, $y(0) = 1$, ($\lambda > 0$)

Решение имеет вид

$$y = Ce^{-\lambda x} - \frac{\lambda}{1 + \lambda^2}(-\lambda \sin x + \cos x), \quad C = 1 + \frac{\lambda}{1 + \lambda^2}$$

Если λ велико, то $\frac{\lambda}{1 + \lambda^2} \approx \frac{1}{\lambda} \approx 0$, $C \approx 1$. Тогда при малых x приближенно можно записать $y \approx e^{-\lambda x}$.

При увеличении x и больших λ первое слагаемое мало и здесь $y \approx \sin x$. Точное решение показано на следующем рисунке при $\lambda = 10, 20, 50$.



Наличие резкого убывания решения вблизи $x=0$ (пограничный слой), как будет видно далее, создает проблемы при численном решении.

2) Рассмотрим уравнение колебаний осциллятора с демпфированием.

$$y'' + cy' + ky = 0, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 0 \quad (c > 0, k > 0)$$

Введем вспомогательную переменную z и запишем уравнение в виде системы двух уравнений первого порядка

$$\left. \begin{aligned} y' &= z \\ z' &= -cz - ky \end{aligned} \right\}$$

с начальными условиями $y(0) = 1, z(0) = 0$.

Запишем систему в матрично-векторном виде

$$\begin{pmatrix} y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -k & -c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}$$

или, вводя обозначения, $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}$, $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -k & -c \end{pmatrix}$, в виде $\mathbf{u}' = \mathbf{A}\mathbf{u}$.

Частное решение однородного уравнения $\mathbf{u} = \mathbf{b}e^{\lambda t}$. Подставляя в уравнение, получим

$$(\lambda I - \mathbf{A})\mathbf{b} = \mathbf{0}$$

Для того чтобы система имела нетривиальное решение ее определитель должен быть равен нулю

$$\det = \begin{vmatrix} \lambda & -1 \\ k & \lambda + c \end{vmatrix} = 0, \text{ или } \lambda^2 + c\lambda + k = 0.$$

Положим $c=k+1$. Тогда имеем $\lambda^2 + (k+1)\lambda + k = 0$, откуда $\lambda_1 = -k, \lambda_2 = -1$.

Для определения \mathbf{b} получаем систему уравнений

$$\left. \begin{aligned} \lambda b_y + b_z &= 0 \\ kb_y + (\lambda + c)b_z &= 0 \end{aligned} \right\}$$

Из первого уравнения имеем $b_z = -\lambda b_y$. Общее решение запишется в виде

$$y = b_{y1}e^{-kt} + b_{y2}e^{-t}, \quad z = -kb_{y1}e^{-kt} - b_{y2}e^{-t}$$

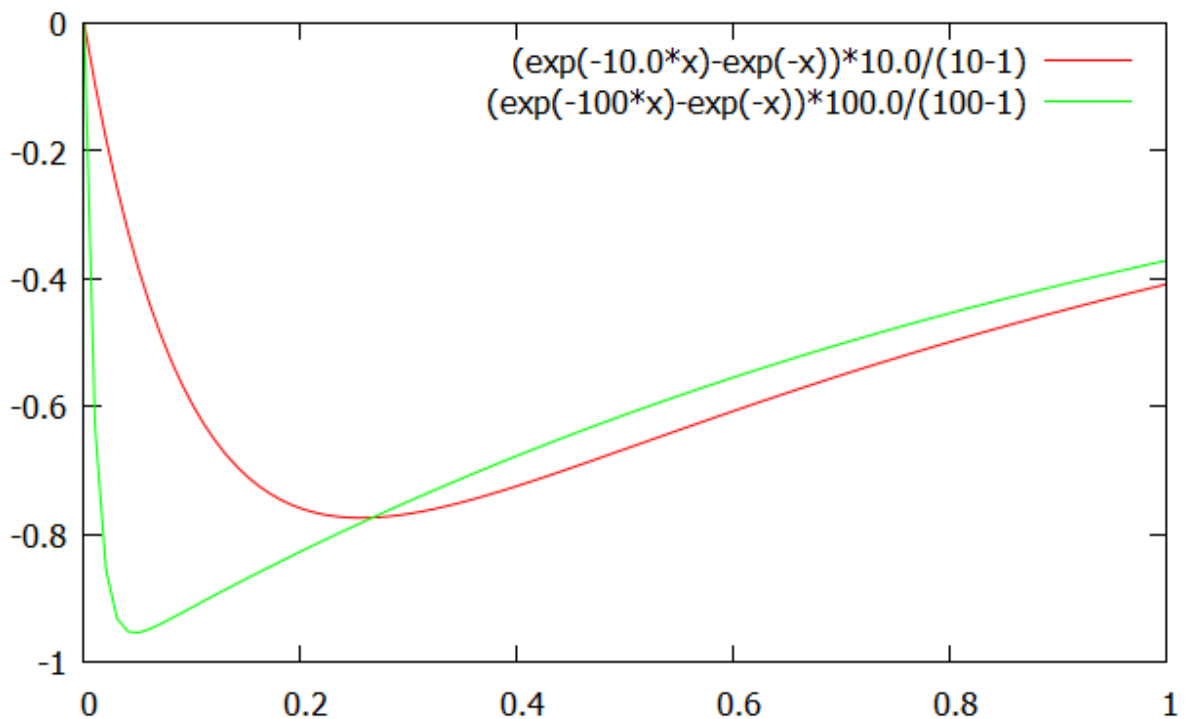
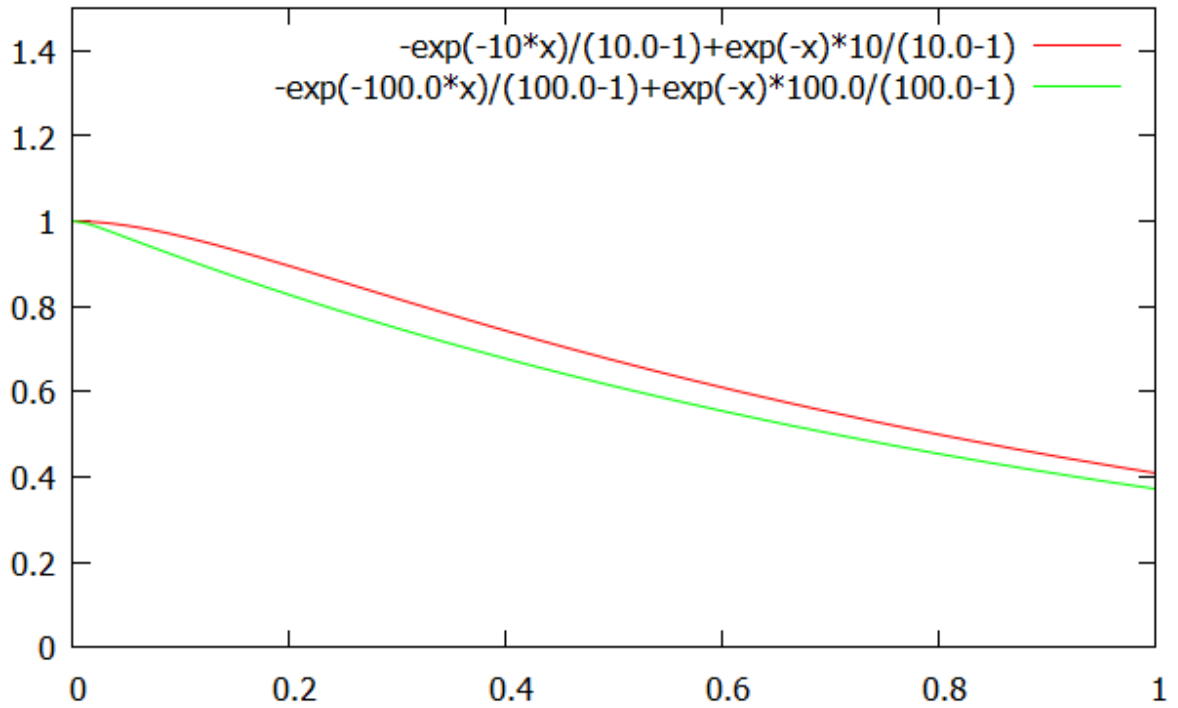
Определяя постоянные из начальных условий, получим

$$y = -\frac{1}{k-1}e^{-kt} + \frac{k}{k-1}e^{-t}$$

$$z = \frac{k}{k-1}e^{-kt} - \frac{k}{k-1}e^{-t}$$

Отсюда видно, что при больших k имеем $y \approx e^{-t}$ и $z \approx e^{-kt} - e^{-t}$. Но при малых t (и больших k) можно записать $z \approx e^{-kt} - 1$.

На следующих рисунках приведены графики y и z при $k=10, 100$.



Таким образом, не возникает пограничный слой для переменной y , но возникает для переменной z . Это связано с тем, что при малых t и больших k имеем $y \approx e^{\lambda_2 t}$ и $z \approx e^{\lambda_1 t} - 1$. То есть одна компонента решения, изменяющаяся плавно, связана с малым по модулю собственным числом $|\lambda_2| = 1$, а другая, имеющая пограничный слой, с $|\lambda_1| = k$ - большим по модулю собственным числом. В связи с этим вводится понятие числа жесткости для систем уравнений с $\lambda_i < 0$

$$s = \frac{\max|\lambda_i|}{\min|\lambda_i|}$$

или в общем случае комплексных собственных чисел $\operatorname{Re}(\lambda_i) < 0$

$$s = \frac{\max|\operatorname{Re}(\lambda_i)|}{\min|\operatorname{Re}(\lambda_i)|}$$

Одно из определений жесткости: система ОДУ называется жесткой, если число жесткости велико.

В последнем примере $s=k$. При $k=100$ систему можно считать жесткой.

3. Тестовое уравнение.

Так как каждое жесткое уравнение жестко по своему, то при изучении численных методов решения жестких систем принято рассматривать следующее модельное уравнение

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0$$

где λ - в общем случае комплексное число, причем $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$. Его решение

$$y(x) = y_0 e^{\lambda x}$$

Определение. Назовем решение устойчивым, если оно ограничено для любого $x > 0$, асимптотически устойчивым, если оно устойчиво и $y \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$, неустойчивым в противном случае.

Отсюда следует, что решение устойчиво, если $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$, асимптотически устойчиво, если $\operatorname{Re}(\lambda) < 0$ и неустойчиво, если $\operatorname{Re}(\lambda) > 0$. Таким образом, рассматриваются только устойчивые решения тестового уравнения.

4. Явный метод Эйлера

Рассмотрим задачу

$$y' = f(x, y), \quad y(0) = y_0$$

Проинтегрируем уравнение по отрезку $[x_k, x_{k+1}]$

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) dx$$

Для вычисления интеграла применим формулу левых прямоугольников

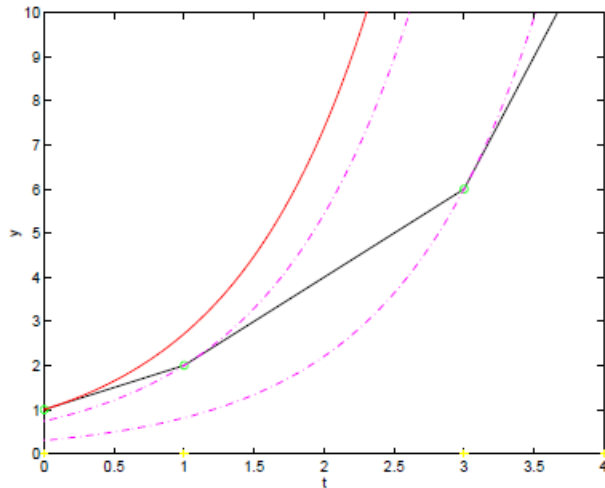
$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) + \delta_{k+1}$$

где δ_{k+1} - остаточное слагаемое, причем $\delta_{k+1} = O(h^2)$. Отбрасывая остаточное слагаемое, получим вычислительную формулу метода

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k), k = 0, \dots, M - 1$$

Из вида остаточного слагаемого вытекает, что метод имеет первый порядок.

Геометрическая интерпретация.



Рассмотрим применение явного метода Эйлера для тестового уравнения. Будем иметь

$$y_{k+1} = y_k + h\lambda y_k = (1 + h\lambda)y_k, k = 0, \dots, M - 1$$

Выразим приближенное решение через начальное значение

$$y_{k+1} = (1 + h\lambda)y_k = (1 + h\lambda)^2 y_{k-1} = \dots = (1 + h\lambda)^{k+1} y_0$$

Предположим, что решение исходного уравнения устойчиво, то есть $\text{Re}(\lambda) \leq 0$. Потребуем, чтобы приближенное решение также было устойчивым (ограниченным). Очевидно, для этого необходимо и достаточно выполнения условия

$$|1 + h\lambda| \leq 1$$

Обозначим $h\lambda = \mu$ и введем функцию $R(\mu) = 1 + \mu$, которая называется **функцией устойчивости метода**. Из предыдущего следует, что функция устойчивости должна удовлетворять неравенству (которое далее будем называть неравенством устойчивости)

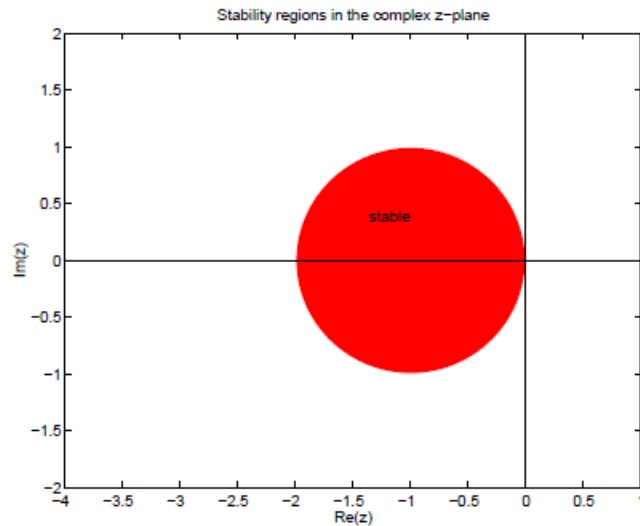
$$|R(\mu)| \leq 1$$

Для явного метода Эйлера, вводя обозначение, $\mu = \mu_r + i\mu_i$ получаем неравенство

$$(1 + \mu_r)^2 + \mu_i^2 \leq 1$$

Определение. Множество значений μ , для которых неравенство устойчивости выполняется, называется **областью устойчивости метода**.

На комплексной плоскости областью устойчивости явного метода Эйлера будет внутренность круга с центром в точке $\mu_r = -1$, $\mu_i = 0$ и радиусом 1.



На вещественной оси будем иметь неравенство

$$-1 \leq 1 - h|Re(\lambda)| \leq 1$$

Правое неравенство выполняется для любых h , а из левого следует

$$h \leq \frac{2}{|Re(\lambda)|}$$

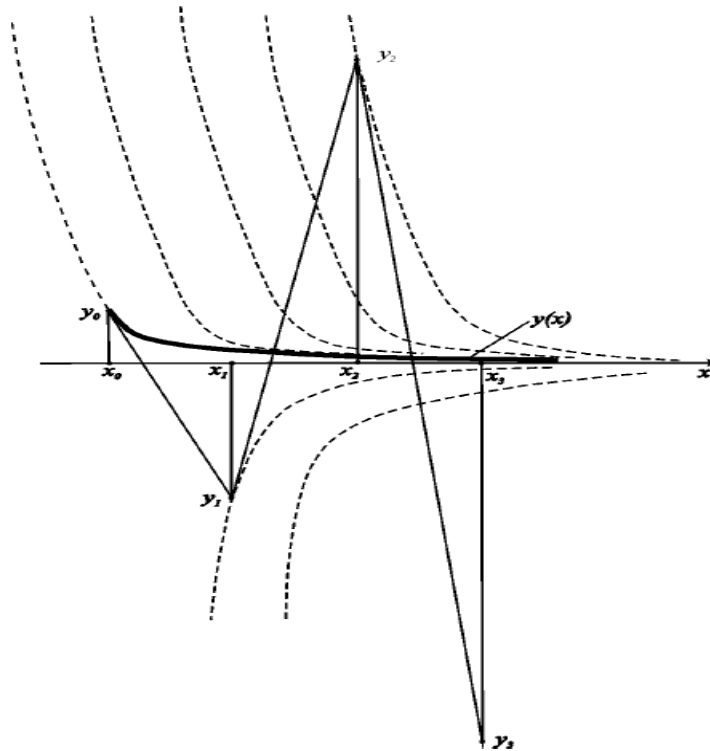
Таким образом, **явный метод Эйлера является условно устойчивым.**

Если $Re(\lambda)$ велико, то в решении возникает пограничный слой и именно здесь требуется малый шаг по x , чтобы обеспечить заданную точность. В областях медленного изменения решения, казалось бы, шаг можно увеличить, однако условие устойчивости не позволит это сделать, и мы вынуждены продолжать считать с малым шагом. В этом заключается проблема при численном решении жестких уравнений.

На следующем рисунке показано решение, когда не выполнено условие устойчивости.

В случае системы дифференциальных уравнений условие устойчивости имеет вид

$$h \leq \frac{2}{\max |Re(\lambda_i)|}$$



5. Неявный метод Эйлера

Вновь проинтегрируем уравнение по отрезку $[x_k, x_{k+1}]$

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) dx$$

Для вычисления интеграла применим формулу правых прямоугольников

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + hf(x_{k+1}, y(x_{k+1})) + \delta_{k+1}$$

где δ_{k+1} - остаточное слагаемое, причем, как и ранее, $\delta_{k+1} = O(h^2)$. Отбрасывая остаточное слагаемое, получим вычислительную формулу метода

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_{k+1}, y_{k+1}), k = 0, \dots, M - 1$$

Это неявный метод Эйлера, так как значение y_{k+1} определяется неявно через решение уравнения. Из вида остаточного слагаемого вытекает, что метод имеет первый порядок.

Применим неявный метод Эйлера к тестовому уравнению

$$y_{k+1} = y_k + h\lambda y_{k+1}, k = 0, \dots, M - 1$$

Отсюда получаем

$$y_{k+1} = \frac{1}{1 - h\lambda} y_k$$

Функция устойчивости метода

$$R(\mu) = \frac{1}{1 - \mu}$$

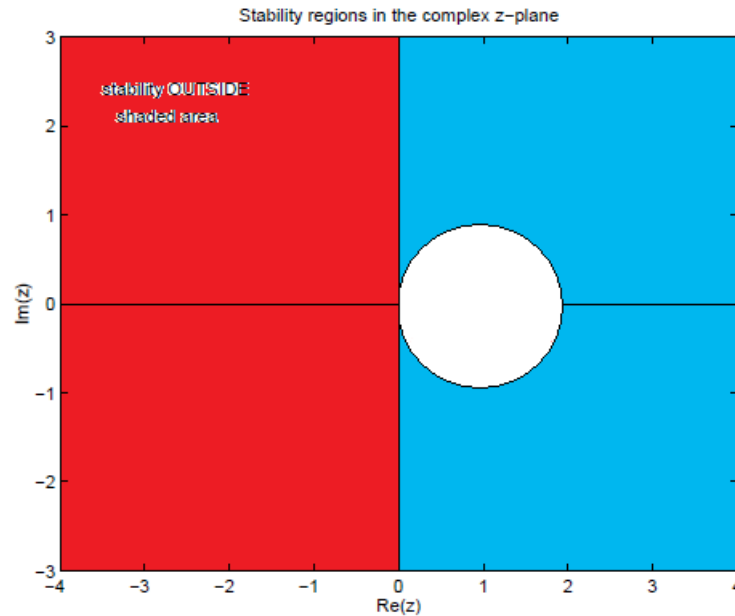
где $h\lambda = \mu$. Для устойчивости метода необходимо и достаточно выполнения условия

$$|R(\mu)| \leq 1$$

Подставляя $\mu = \mu_r + i\mu_i$, получаем неравенство

$$(1 - \mu_r)^2 + \mu_i^2 \geq 1$$

На комплексной плоскости областью устойчивости будет внешность круга с центром в точке $\mu_r = +1$, $\mu_i = 0$ и радиусом 1.



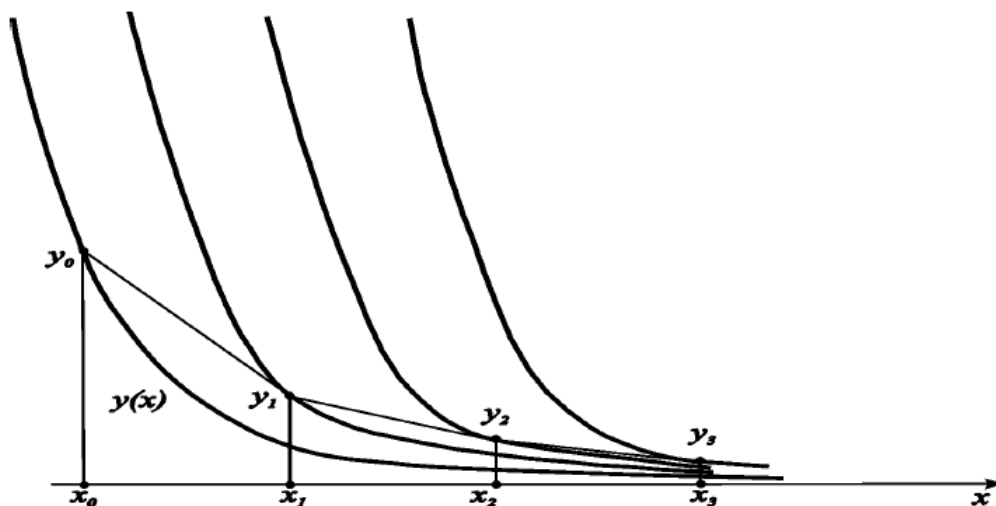
Заметим, что во всей области устойчивости исходной задачи $Re(\lambda) \leq 0$ неявный метод Эйлера также устойчив.

Определение. Метод, устойчивый для тестового уравнения во всей полуплоскости $Re(\lambda) \leq 0$, называется **A-устойчивым**.

Неявный метод Эйлера является A-устойчивым.

Таким образом, неявный метод Эйлера не предполагает никаких ограничений на шаг метода. Поэтому область быстрого изменения решения можно пройти с малым шагом, а в области медленного изменения шаг увеличить настолько, насколько позволяют соображения точности.

На следующем рисунке приведена иллюстрация неявного метода Эйлера.



Недостаток метода состоит в том, что на каждом шаге надо решать уравнение вида

$$z = y_k + hf(x_{k+1}, z)$$

относительно величины $z=y_{k+1}$. Естественным является метод простой итерации по формуле

$$z^{n+1} = y_k + hf(x_{k+1}, z^n)$$

где n – итерационный индекс. Условием сходимости итерационного процесса является неравенство

$$h \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| < 1$$

При условии $\left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \leq L$ получаем ограничение на шаг $h < 1/L$. Так как для жестких задач константа L обычно велика, то получаемое ограничение того же порядка, что и для явной схемы.

Можно воспользоваться методом Ньютона. Для этого запишем уравнение в виде

$$\varphi(z) \equiv z - hf(x_{k+1}, z) - y_k = 0$$

Разложим функцию $\varphi(z)$ по формуле Тейлора в окрестности предыдущей итерации, сохраняя только линейные слагаемые

$$\varphi(z^{n+1}) \approx \varphi(z^n) + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^n (z^{n+1} - z^n) = 0$$

Обозначим $\delta z = z^{n+1} - z^n$ и будем решать уравнение

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^n \delta z &= -\varphi(z^n) \\ z^{n+1} &= z^n + \delta z \end{aligned}$$

Метод Ньютона сходится быстро, но для него нужно хорошее начальное приближение. Для этого можно, например, использовать интерполяцию по предыдущим значениям y_k .

В случае системы m дифференциальных уравнений имеем не одно уравнение, а систему m линейных алгебраических уравнений

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{z}}\right)^n \delta \mathbf{z} = -\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}^n)$$

где $\boldsymbol{\varphi}$ и \mathbf{z} – вектор-функции из m компонент, а $\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{z}}$ – матрица Якоби размером $m \times m$, составленная из частных производных $\frac{\partial \varphi_i}{\partial z_j}$. Как правило, эти производные приходится вычислять численно, что при больших m сопряжено с большими вычислительными затратами. Поэтому в таких случаях применяют модификацию метода, вычисляя матрицу Якоби только один раз на первой итерации, и далее используют ее на следующих итерациях. Возможен компромиссный вариант, когда матрица Якоби обновляется через определенное количество шагов.

6. Методы Рунге-Кутты.

Методы Рунге-Кутты в общем случае записываются следующим образом

$$y_{k+1} = y_k + h \sum_{i=1}^s b_i K_i$$

$$K_i = f\left(x_k + c_i h, y_k + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j\right), i = 1, \dots, s$$

Число s называется числом стадий метода.

Для записи методов РК часто используют таблицу Бутчера (Butcher)

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array} \implies \frac{\mathbf{c}}{\mathbf{b}^T} \mid \begin{array}{c} A \\ \hline \end{array}$$

6.1. Явные методы Рунге-Кутты.

Если матрица A – нижняя треугольная, то метод называется явным. Соответствующая таблица имеет вид

| | | | | | |
|----------|----------|----------|----------|-------------|-------|
| 0 | | | | | |
| c_2 | a_{21} | | | | |
| c_3 | a_{31} | a_{32} | | | |
| \vdots | \vdots | \vdots | \ddots | | |
| c_s | a_{s1} | a_{s2} | \cdots | $a_{s,s-1}$ | |
| | b_1 | b_2 | \cdots | b_{s-1} | b_s |

Формулы для K_i запишутся в виде

$$K_i = f\left(x_k + c_i h, y_k + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j\right), i = 1, \dots, s$$

или

$$\begin{aligned}
 K_1 &= f(x_k, y_k) \\
 K_2 &= f(x_k + c_2 h, y_k + h a_{21} K_1) \\
 &\dots\dots\dots \\
 K_s &= f(x_k + c_s h, y_k + h a_{s1} K_1 + h a_{s2} K_2 + \dots + h a_{s,s-1} K_{s-1})
 \end{aligned}$$

Таким образом можно последовательно вычислить K_1, K_2, \dots, K_s .

Простейший явный метод РК – это явный метод Эйлера. Так как он имеет малую точность, обратимся к более точным методам. Проинтегрируем уравнение по отрезку $[x_k, x_{k+1}]$

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y) dy$$

Вычислим интеграл по более точной формуле средних прямоугольников. Получим

$$y_{k+1} = y_k + h f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_{k+1/2}\right), k = 0, \dots, M - 1$$

Вычислим $y_{k+1/2}$ по явному методу Эйлера

$$y_{k+1/2} = y_k + \frac{h}{2} f(x_k, y_k)$$

В итоге получили один из методов РК второго порядка точности (p=2) или модифицированный метод Эйлера.

Вводя обозначения K_i , формулы метода можно записать в виде

$$\begin{aligned}
 y_{k+1} &= y_k + h K_2 \\
 K_1 &= f(x_k, y_k) \\
 K_2 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + h \frac{K_1}{2}\right)
 \end{aligned}$$

Данный метод является двухстадийным $s=2$ и имеет порядок точности $p=2$. В общем случае явных методов РК справедливо неравенство $p \leq s$. В следующей таблице приведено

минимальное число стадий, которое необходимо, чтобы достичь определенного порядка точности

| | | | | | | | | |
|----------|---|---|---|---|---|---|---|----|
| p | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| $\min s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 6 | 7 | 9 | 11 |

Применение полученных формул второго порядка к тестовому уравнению $y' = \lambda y$ дает следующую функцию устойчивости

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

где $\mu = \lambda h$. Условие устойчивости

$$\left| 1 + \mu + \frac{\mu^2}{2} \right| \leq 1$$

При λ вещественном получаем

$$-1 \leq \left(1 + \frac{\lambda h}{2} \right)^2 + \frac{(\lambda h)^2}{4} \leq 1$$

Здесь левое неравенство выполнено, а правое дает условие

$$h \leq \frac{2}{|\lambda|}$$

Таким образом, данный метод оказывается условно устойчивым.

Теорема. Если явный метод РК имеет порядок p , то

$$R(\mu) = 1 + \mu + \frac{\mu^2}{2!} + \dots + \frac{\mu^p}{p!} + O(h^{p+1})$$

Доказательство.

Тестовое уравнение на первом шаге имеет точное решение $y(h) = e^{\lambda h} = e^\mu$, ($y(0)=1$)

Приближенное решение $y_1 = R(\mu)$.

Для метода порядка p имеем $y(h) - y_1 = e^\mu - R(\mu) = O(h^{p+1})$.

Отсюда $R(\mu) = e^\mu + O(h^{p+1})$

Следствие. Если $p=s$ ($s \leq 4$), то

$$R(\mu) = 1 + \mu + \frac{\mu^2}{2!} + \dots + \frac{\mu^p}{p!}$$

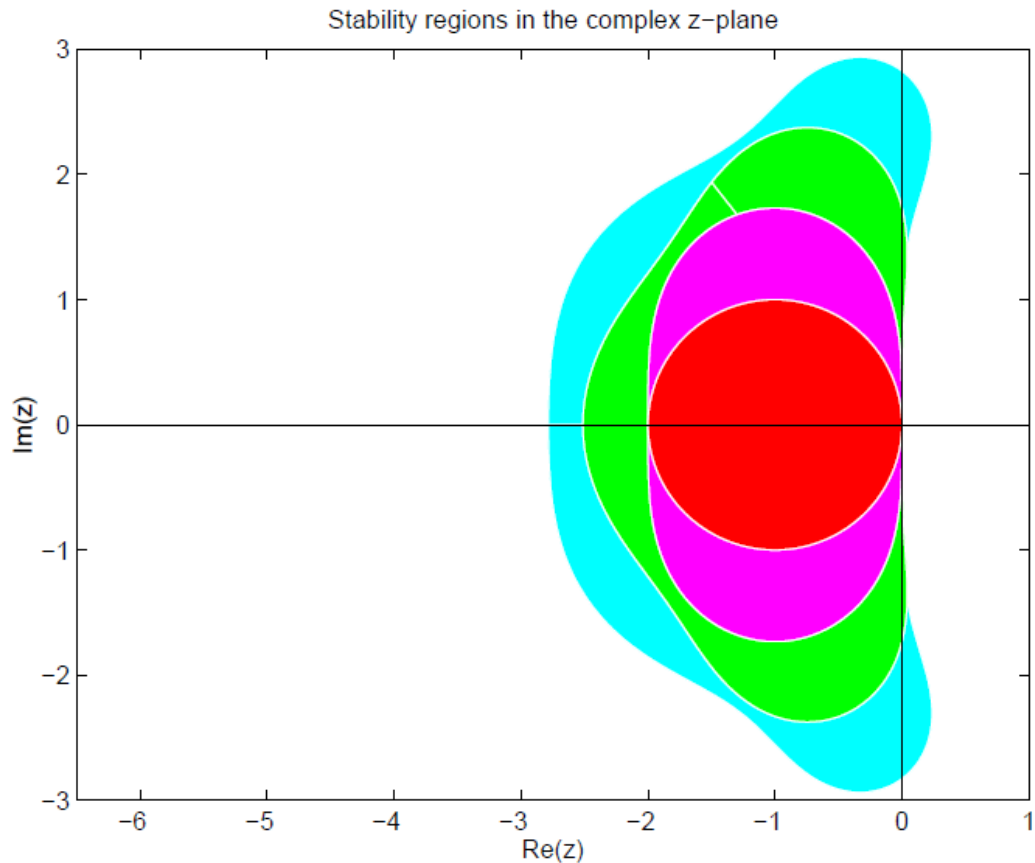


Figure 4.4: Stability regions for p -stage explicit Runge-Kutta methods of order p , $p = 1, 2, 3, 4$. The inner circle corresponds to forward Euler, $p = 1$. The larger p is, the larger the stability region. Note the “ear lobes” of the 4th order method protruding into the right half plane.

Области устойчивости в этом случае даются неравенством

$$\left| 1 + \mu + \frac{\mu^2}{2!} + \dots + \frac{\mu^p}{p!} \right| \leq 1$$

Они показаны на рисунке для $s=1, 2, 3, 4$.

В общем случае $R(\mu)$ - полином степени s . Так как $|R(\mu)| \rightarrow \infty$ при $|\mu| \rightarrow \infty$, то очень большие отрицательные величины μ не могут быть в области устойчивости. Следовательно, явные методы РК не являются А-устойчивыми и не годятся для решения жестких систем.

6.2. Неявные методы РК

Проинтегрируем уравнение по отрезку $[x_k, x_{k+1}]$

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y) dy$$

Вычислим интеграл по формуле трапеций. Получим

$$y_{k+1} = y_k + h \frac{f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})}{2}, k = 0, \dots, M - 1$$

Это неявный метод РК второго порядка точности. Иначе он называется **методом трапеций**.

Вводя обозначения K_i , формулы метода можно записать в виде

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + h \frac{K_1 + K_2}{2} \\ K_1 &= f(x_k, y_k) \\ K_2 &= f\left(x_k + h, y_k + h \frac{K_1 + K_2}{2}\right) \end{aligned}$$

Метод имеет $s=2$ стадии, так что в этом случае $p=s=2$.

Применим метод трапеций к тестовому уравнению.

$$y_{k+1} = y_k + h \frac{\lambda y_k + \lambda y_{k+1}}{2}$$

Отсюда для функции устойчивости получим

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{\mu}{2}}{1 - \frac{\mu}{2}} = \frac{2 + \mu}{2 - \mu}$$

Условие устойчивости

$$\left| \frac{2 + \mu}{2 - \mu} \right|^2 = \left| \frac{2 + \mu_r + i\mu_i}{2 - \mu_r - i\mu_i} \right|^2 = \frac{(2 + \mu_r)^2 + \mu_i^2}{(2 - \mu_r)^2 + \mu_i^2} \leq 1$$

Неравенство верно, если $\mu_r \leq 0$, что означает А-устойчивость метода.

Рассмотрим очень жесткий случай тестового уравнения, то есть большие величины $|Re(\lambda)|$. Точное решение имеет вид

$$y(t_{n+1}) = y_0 e^{\lambda t_{n+1}} = y_0 e^{\lambda(t_n+h)} = y(t_n) e^{\lambda h} = y(t_n) e^{\mu}$$

Тогда

$$|y(t_{n+1})| = |y(t_n)| e^{\mu_r} \ll |y(t_n)|$$

Для больших отрицательных μ_r ($|\mu_r| \rightarrow \infty$) точное решение быстро убывает. Для приближенного решения по методу трапеций получаем

$$y_{k+1} = R(\mu) y_k$$

Отсюда

$$|y_{k+1}| \leq |R(\mu)| |y_k|$$

Так как $|R(\mu)| \rightarrow 1$ при $|\mu| \rightarrow \infty$, то для больших отрицательных μ_r имеем $|R(\mu)| < 1$, но $|R(\mu)| \approx 1$, следовательно, $|y_{k+1}| < |y_k|$, но $|y_{k+1}| \approx |y_k|$, то есть y_k убывает очень медленно, что не согласуется с быстрым убыванием решения исходной задачи. Чтобы

исправить ситуацию, можно уменьшить $|\mu|$, уменьшая величину h в области очень быстрого убывания решения.

Другой способ использовать такой метод, для которого

$$|R(\mu)| \rightarrow 0 \text{ при } |\mu| \rightarrow \infty$$

Например, таким является неявный метод Эйлера

$$R(\mu) = \frac{1}{1 - \mu} = 1 + \frac{\mu}{1 - \mu}$$

Методы, обладающие указанным свойством, называются **жестко точными** (сильно устойчивые?). Неявный метод Эйлера является жестко точным, а метод трапеций таковым не является.

На рисунке приведены результаты решения примера

$$y' = -100(y - \sin x), \quad y(0) = 1$$

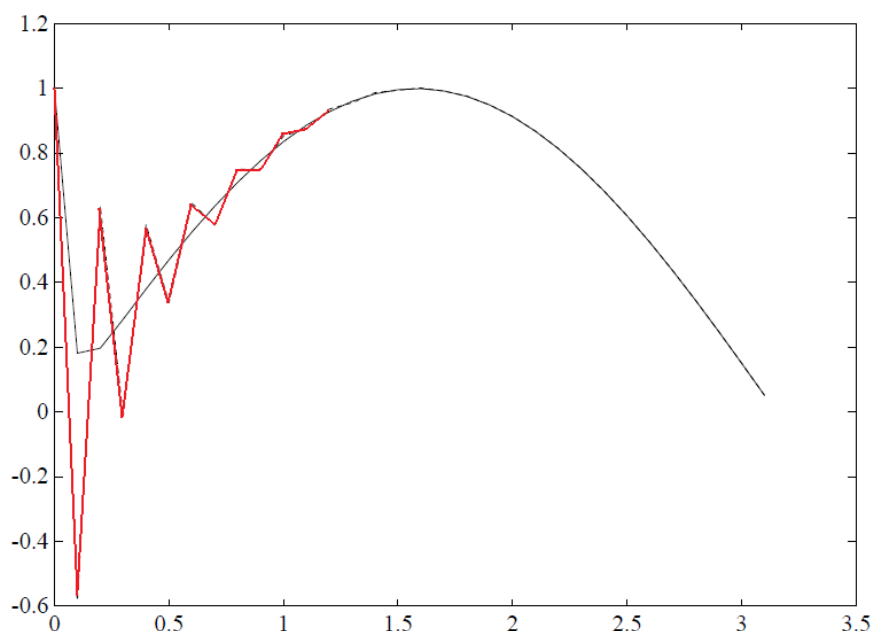


Figure 3.6: Approximate solution on a coarse uniform mesh for Example 3.2, using backward Euler (the smoother curve) and trapezoidal methods.

по двум методам с шагом $h=0.1$. Видно, что неявный метод Эйлера проскакивает область пограничного слоя, а метод трапеций дает колебания, которые медленно затухают. Для того чтобы получить хорошее решение методом трапеций, необходимо выбрать шаг в области пограничного слоя $\sim 1/\mu$, далее вне пограничного слоя шаг можно увеличить.

Одним из способов построения неявных методов РК является метод коллокаций. В нем в качестве внутренних точек в интервале $[x_k, x_{k+1}]$ выбираются узлы квадратурных формул. Используются формулы Гаусса, Радо и Лобатто.

Метод Гаусса, использующий формулу с s узлами имеет порядок точности $p=2s$. Примером метода Гаусса является метод средней точки, в котором используется формула

Гаусса с одним узлом. Ранее, применяя формулу средних прямоугольников, было получено

$$y_{k+1} = y_k + hf\left(x_k + \frac{h}{2}, y_{k+1/2}\right), k = 0, \dots, M - 1$$

Вычисляя $y_{k+1/2}$ по методу Эйлера, получаем явный двухстадийный метод второго порядка точности ($p=2$).

Вычислим $y_{k+1/2}$ по формуле

$$y_{k+1/2} = \frac{y_k + y_{k+1}}{2}$$

Положим

$$K_1 = f\left(x_k + \frac{h}{2}, \frac{y_k + y_{k+1}}{2}\right)$$

Тогда метод запишется в виде

$$y_{k+1} = y_k + hK_1$$

Отсюда получаем

$$\frac{y_k + y_{k+1}}{2} = y_k + h \frac{K_1}{2}$$

Окончательно будем иметь

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + h \frac{K_1}{2}\right) \\ y_{k+1} &= y_k + hK_1 \end{aligned} \right\}$$

Таким образом данный метод является одностадийным $s=1$ и имеет порядок точности $p=2$.

Применение его к тестовому уравнению эквивалентно методу трапеций. Однако последний является двухстадийным и его применение сложнее.

Метод Радо, использующий формулу с s узлами, имеет порядок точности $p=2s-1$.

Примером является неявный метод Эйлера.

Напомним квадратурную формулу Радо. Один из концов промежутка должен быть зафиксирован. Пусть это будет $x=-1$. Тогда формула запишется

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = Af(-1) + \sum_{j=1}^n C_j f(x_j)$$

Узлы квадратурной формулы являются корнями многочлена Якоби $P_n^{(0,1)}(x)$ с весом $1+x$,

$A = \frac{2}{(n+1)^2}$, $C_i > 0$, алгебраическая степень точности равна $2n$.

Метод Лобатто, использующий формулу с s узлами, имеет порядок точности $p=2s-2$.

Примером является метод трапеций.

6.3. Неявные методы РК на основе коллокации

В методе коллокации требуется, чтобы задача была выполнена на множестве выбранных точек, которые называются коллокационными.

Выберем множество различных точек $0 \leq c_1 < c_2 < \dots < c_s \leq 1$. Сформируем точки коллокации на интервале $[t_{k-1}, t_k]$ следующим образом $t_i = t_{k-1} + c_i h$, ($i = 1, 2, \dots, s$). Будем искать полином $P(t)$ степени s , который удовлетворяет условиям

$$P(t_{k-1}) = y_{k-1}$$

$$P'(t_i) = f(t_i, P(t_i)), \quad (i = 1, 2, \dots, s)$$

Эти условия определяют $P(t)$ однозначно. Положим

$$y_k = P(t_k)$$

Заметим, что $P'(t)$ - полином степени $s-1$, а условия коллокации - условия интерполирования этим полиномом функции $f(t)$. Положим $K_i = P'(t_i)$ и запишем $P'(t)$ по формуле Лагранжа

$$P'(t) = \sum_{j=1}^s \Phi_j(t) K_j$$

где $\Phi_j(t)$ - полиномы степени $s-1$

$$\Phi_j(t) = \prod_{i=1, i \neq j}^s \frac{t - t_i}{t_j - t_i}$$

Проинтегрируем теперь $P'(t)$ по t от t_{k-1} до t_i ($i=1, 2, \dots, s$)

$$P(t_i) - P(t_{k-1}) = \sum_{j=1}^s \left(\int_{t_{k-1}}^{t_i} \Phi_j(t) dt \right) K_j$$

Перейдем в интеграле к новой переменной r по формуле $t = t_{k-1} + rh$

$$P(t_i) - P(t_{k-1}) = h \sum_{j=1}^s \left(\int_0^{c_i} \Phi_j(r) dr \right) K_j, \quad i = 1, 2, \dots, s$$

Аналогично проинтегрируем от t_{k-1} до t_k

$$P(t_k) - P(t_{k-1}) = h \sum_{j=1}^s \left(\int_0^1 \Phi_j(r) dr \right) K_j$$

Положим

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \Phi_j(r) dr$$

$$b_j = \int_0^1 \Phi_j(r) dr$$

Теперь получаем

$$K_i = f(t_i, P(t_i)) = f\left(t_i, y_{k-1} + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j\right) \quad i = 1, 2, \dots, s$$

$$y_k = y_{k-1} + h \sum_{j=1}^s b_j K_j$$

Функции устойчивости таких методов являются дробно-рациональными функциями (отношение двух полиномов). Они являются А-устойчивыми, причем метод Радо является жестко устойчивым.

Чтобы упростить реализацию, были выведены неколлокационные методы.

6.4. Диагонально неявные методы РК

Diagonally implicit Runge-Kutta methods (DIRK).

Матрица А является нижней треугольной матрицей.

$$\begin{array}{c|cccccc}
 c_1 & a_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 c_2 & a_{21} & a_{22} & 0 & \cdots & 0 \\
 c_3 & a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
 c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & & a_{ss} \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} & b_s
 \end{array}$$

Здесь в уравнения для K_i входят K_1, K_2, \dots, K_i , причем значения K_1, K_2, \dots, K_{i-1} уже вычислены, поэтому имеем s отдельных уравнений для определения K_i . Если решается система ОДУ, состоящая из m уравнений, то получаем s систем по m уравнений.

Дальнейшее упрощение реализации неявных методов достигается заменой диагональных элементов на постоянное значение $a_{ii} = a$. Получаем методы, которые называются Singly diagonally implicit Runge-Kutta methods (SDIRK) или однократно диагонально неявные методы РК.

Рассмотрим для простоты автономное уравнение

$$y' = f(y)$$

Это не уменьшает общности, так как любое неавтономное уравнение всегда можно представить в виде системы двух автономных уравнений. Действительно, введем переменную $z=t$ и запишем

$$\left. \begin{aligned} z' &= 1 \\ y' &= f(z, y) \end{aligned} \right\}$$

Для определения коэффициентов K_i получим отдельные уравнения

$$K_i = f \left(y_k + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j + h a K_i \right), i = 1, \dots, s$$

Итерации по Ньютону дают

$$\left(1 - h a \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^n \right) \delta^{n+1} = -K_i^n f \left(y_k + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j + h a K_i^n \right), i = 1, \dots, s$$

$$\delta^{n+1} = K_i^{n+1} - K_i^n$$

Если имеем систему m дифференциальных уравнений, то $\frac{\partial f}{\partial y}$ - это матрица размером $m \times m$, которую нужно вычислять на каждой итерации. Обычно эту матрицу определяют на нулевой итерации и фиксируют в пределах шага или используют на нескольких шагах.

7. Линейные многошаговые методы

Эти методы используют информацию о решении с нескольких предыдущих шагов. По сравнению с методами РК они требуют меньше вычислений значений функции на шаге. Но с другой стороны здесь возникают трудности при попытках изменить шаг интегрирования.

Общая форма записи для k -шагового метода имеет вид

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n-j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n-j}$$

Так как коэффициенты определены с точностью до постоянного множителя, то требуется масштабирование. Положим $\alpha_0 = 1$. Метод называется явным, если $\beta_0 = 0$ и неявным в противном случае.

Для решения нежестких задач обычно используются методы Адамса. Для жестких задач применяются методы, использующие так называемые разностные формулы дифференцирования назад (backward differentiation formulae – BDF). Они аппроксимируют производную по значениям функции в нескольких предыдущих точках. Их можно построить разными способами. Один из способов заключается в следующем. По значениям $y(t_n), y(t_{n-1}), \dots, y(t_{n-k})$ строится полином Лагранжа степени k

$$L_k(t) = \sum_{j=0}^k \Phi_j(t) y(t_j)$$

Заданная функция представляется в виде

$$y(t) = L_k(t) + r_k(t) = \sum_{j=0}^k \Phi_j(t) y(t_j) + r_k(t)$$

где $r_k(t)$ – остаточное слагаемое. Продифференцируем это равенство по t и запишем его при $t=t_n$

$$y'(t_n) = \sum_{j=0}^k \Phi_j'(t_n) y(t_j) + r_k'(t_n) = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^k \gamma_j y(t_j) + r_k'(t_n)$$

где

$$r_k'(t_n) = \frac{y^{(k+1)}(\zeta)}{k+1} h^k$$

ζ – точка промежуточная между t_{n-k} и t_n .

Отбрасывая остаточное слагаемое, получим искомую формулу

$$y'(t_n) \approx \frac{1}{h} \sum_{j=0}^k \gamma_j y(t_{n-j})$$

Точность аппроксимации, определяемая отброшенным слагаемым, есть величина $O(h^k)$.
Заменим в левой части производную в силу уравнения функцией $f(t_n, y(t_n))$ и используем известные приближенные значения y_j . Получим

$$f(t_n, y_n) = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^k \gamma_j y_{n-j}$$

Умножим здесь обе части на h и разделим на γ_0 для нормировки. В итоге будем иметь формулы метода

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n-j} = h \beta_0 f(t_n, y_n)$$

где обозначено $\alpha_j = \gamma_j / \gamma_0$, $\beta_0 = 1 / \gamma_0$. Порядок точности метода h^{k+1} .

В следующей таблице приведены коэффициенты метода. Метод первого порядка есть неявный метод Эйлера

| p | k | β_0 | α_0 | α_1 | α_2 | α_3 | α_4 | α_5 | α_6 |
|-----|-----|------------------|------------|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|-------------------|------------------|
| 1 | 1 | 1 | 1 | -1 | | | | | |
| 2 | 2 | $\frac{2}{3}$ | 1 | $-\frac{4}{3}$ | $\frac{1}{3}$ | | | | |
| 3 | 3 | $\frac{6}{11}$ | 1 | $-\frac{18}{11}$ | $\frac{9}{11}$ | $-\frac{2}{11}$ | | | |
| 4 | 4 | $\frac{12}{25}$ | 1 | $-\frac{48}{25}$ | $\frac{36}{25}$ | $-\frac{16}{25}$ | $\frac{3}{25}$ | | |
| 5 | 5 | $\frac{60}{137}$ | 1 | $-\frac{300}{137}$ | $\frac{300}{137}$ | $-\frac{200}{137}$ | $\frac{75}{137}$ | $-\frac{12}{137}$ | |
| 6 | 6 | $\frac{60}{147}$ | 1 | $-\frac{360}{147}$ | $\frac{450}{147}$ | $-\frac{400}{147}$ | $\frac{225}{147}$ | $-\frac{72}{147}$ | $\frac{10}{147}$ |

Table 5.3: Coefficients of BDF methods up to order 6

Для начала счета требуются значения y_0, y_1, \dots, y_{k-1} . Они должны быть известны с точностью $O(h^p)$ для метода порядка p . Для этого можно использовать метод РК того же порядка. Другой подход, используемый в современных пакетах, - рекурсивное использование $(k-1)$ -шагового метода. То есть сначала используется метод порядка 1, затем 2 и т.д. до p .

Устойчивость многошаговых методов

Многошаговый метод представляет собой разностное уравнение вида

$$\alpha_0 y_n + \alpha_1 y_{n-1} + \dots + \alpha_k y_{n-k} = r_n$$

Его решение может быть представлено в форме

$$y_n = z_n + v_n$$

где z_n - общее решение однородного уравнения, а v_n - частное решение неоднородного уравнения. Частное решение однородного уравнения ищется в виде $z_n = q^n$. Подставляя в разностное уравнение при $r_n=0$, получим

$$\begin{aligned} \alpha_0 q^n + \alpha_1 q^{n-1} + \dots + \alpha_k q^{n-k} &= 0 \\ q^{n-k}(\alpha_0 q^k + \alpha_1 q^{k-1} + \dots + \alpha_k) &= 0 \\ \rho(q) \equiv \alpha_0 q^k + \alpha_1 q^{k-1} + \dots + \alpha_k &= 0 \end{aligned}$$

В итоге получили полином, имеющий k корней. Если все корни различные, то общее решение есть суперпозиция частных решений плюс решение неоднородного уравнения

$$z_n = c_1 q_1^k + c_2 q_2^k + \dots + c_k q_k^k + v_n$$

Если среди корней есть кратные, например, $q_1=q_2=q$, то общее решение записывается в виде

$$z_n = (c_1 + c_2 n)q^k + \dots + c_k q_k^k + v_n$$

Постоянные определяются из начальных условий.

Линейный многошаговый метод назовем устойчивым, если все корни полинома $\rho(q)$ удовлетворяют условию $|q_i| \leq 1$ и если $|q_i| = 1$, то q_i простой корень. Разностное уравнение асимптотически устойчиво, если все корни удовлетворяют условию $|q_i| < 1$.

Область устойчивости на комплексной плоскости можно найти, построив ее границу с помощью вычисления величины $w = \rho(e^{i\theta})$ для углов θ , изменяющихся от 0 до 2π . На следующих рисунках построены области стабильности для BDF методов.

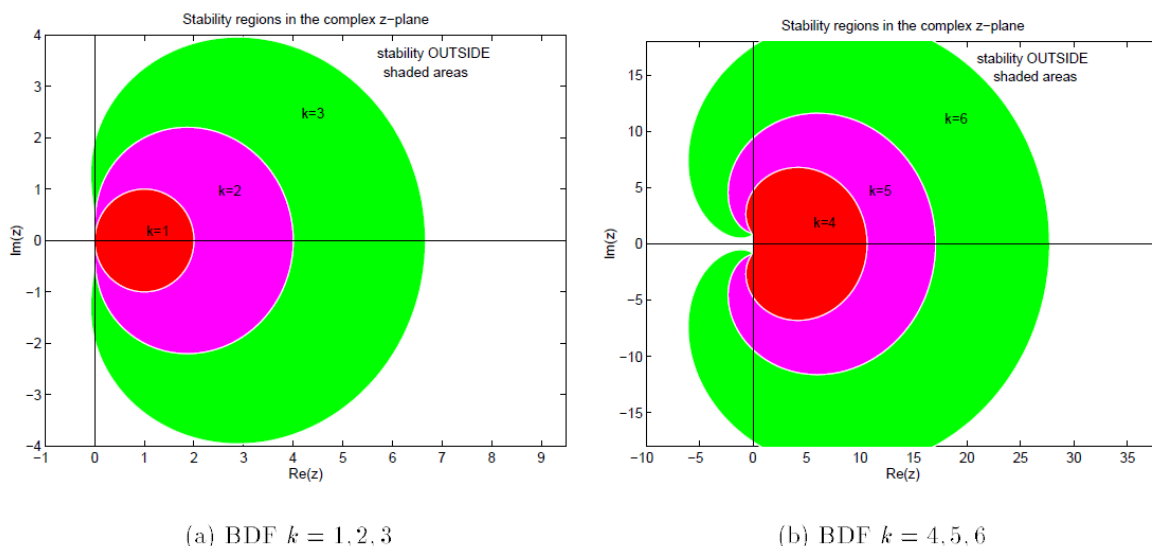


Figure 5.6: BDF absolute stability regions. The stability regions are outside the shaded area for each method.

Видно, что только методы для $k=1$ и 2 являются A-устойчивыми.

Барьер Далквиста. Было строго доказано, что среди явных многошаговых методов не существует A-устойчивых. Порядок A-устойчивых многошаговых методов не может превышать 2.

В связи с этим было введено понятие $A(\alpha)$ -устойчивости.

Определение. Метод называется $A(\alpha)$ -устойчивым, если его область устойчивости заключена в угле $[-\alpha, \alpha]$.

Из рисунков видно, что методы для $k=3, 4, 5, 6$ являются $A(\alpha)$ -устойчивыми, однако не существует $A(\alpha)$ -устойчивых методов для $k>6$, поэтому они не употребляются для решения жестких уравнений.

Использование модифицированного метода Ньютона

При использовании BDF формул приходится решать в общем случае систему нелинейных алгебраических уравнений относительно вектора неизвестных \mathbf{y}_n .

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \mathbf{y}_{n-j} = h\beta_0 \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n)$$

Обозначим

$$\Phi(\mathbf{y}) \equiv \mathbf{y} - h\beta_0 \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}) + \sum_{j=1}^k \alpha_j \mathbf{y}_{n-j} = \mathbf{0}$$

Разложим функцию $\Phi(\mathbf{y})$ по формуле Тейлора в окрестности предыдущей итерации

$$\Phi(\mathbf{y}^{m+1}) \approx \Phi(\mathbf{y}^m) + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{y}}\right)^m (\mathbf{y}^{m+1} - \mathbf{y}^m) = \mathbf{0}$$

Обозначим $\delta^m = \mathbf{y}^{m+1} - \mathbf{y}^m$ и будем решать уравнение

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{y}}\right)^m \delta^m = -\Phi(\mathbf{y}^m)$$

или

$$\left(1 - h\beta_0 \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\right)^m\right) \delta^m = -\Phi(\mathbf{y}^m)$$
$$\mathbf{y}^{m+1} = \mathbf{y}^m + \delta^m$$

Получили систему линейных алгебраических уравнений, которую нужно решать на каждой итерации метода Ньютона. В качестве начального приближения можно построить интерполяционный полином для \mathbf{y} по k предыдущим точкам и вычислить его значение в точке t_k .

Заметное время может отнимать вычисление матрицы производных $\left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\right)^m$. Чтобы сократить вычислительные затраты эту матрицу обычно вычисляют один раз для нулевого приближения и далее используют ее в итерационном процессе

$$\left(1 - h\beta_0 \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\right)^0\right) \delta^m = -\Phi(\mathbf{y}^m)$$

Получаем модифицированный метод Ньютона. Тогда для решения системы алгебраических уравнений удобно использовать LU разложение, так как его нужно будет делать только один раз для начального приближения.

Метод Ньютона требует хорошего начального приближения. С этой целью можно построить интерполяционный полином для \mathbf{y} по k предыдущим точкам и вычислить его значение в точке t_k .

Если метод все-таки расходится, можно попробовать метод Ньютона с демпфированием, уменьшая полученное приращение по формуле

$$\mathbf{y}^{m+1} = \mathbf{y}^m + \alpha \delta^m$$

где $\alpha > 0$ – демпфирующий множитель.

Литература

1. L. F. Shampine. Numerical Solution of Ordinary Differential Equations. Chapman & Hall. 1994.
2. J. D. Lambert. Numerical Methods for Ordinary Differential Systems. Wiley. 1991.
3. K. Brenan, S. Campbell, L. Petzold. Numerical Solution of Initial Value Problems in Differential Algebraic Equations. SIAM, second edition. 1996.
4. U. Ascher, R. Mattheij, and R. Russell. Numerical Solution of Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations. SIAM, second edition. 1995.
5. R.C. Aiken, ed., Stiff Computation, Oxford University Press, Oxford, U.K., 1985.