

Komputerowa analiza zagadnień różniczkowych

6. Metoda diagramowa. Obszary stabilności.

P. F. Góra

<http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/>

2013

Metoda diagramowa

“Ręczne” wyprowadzanie równan wiążących współczynniki metod Rungego-Kutty, oparte na rozwinięciu w szereg Taylora jest żmudne i bardzo łatwo o pomyłki, zwłaszcza dla metod rzędu większego niż 4. J. C. Butcher rozwinął specjalną metodę diagramową, opartą o *drzewa zakorzenione*, bardzo ułatwiającą wyliczanie wszystkich współczynników. Zobacz

- J. C. Butcher, *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*, Wiley, 2003, rozdział 3.
- J. C. Butcher, Trees and numerical methods for ordinary differential equations, *Numer. Alg.* **53**, 153 (2009).

Osoby zainteresowane powinny sięgnąć do podręcznika Butchera, jeśli chcą poznać *dowód* podawanych tu przepisów.

Drzewa zakorzenione

Drzewo zakorzenione to spójny graf bez pętli, mający wyróżniony węzeł zwany *korzeniem*. Krawędzie grafu są skierowane. Korzeń (i tylko korzeń) nie jest punktem końcowym żadnej krawędzi. Punkty końcowe krawędzi, niebędące początkami innych krawędzi, nazywamy *liśćmi*.

Liczbę wierzchołków w drzewie nazywamy stopniem drzewa.

Każde nietrywialne drzewo odpowiada jednemu związkowi na współczynniki metod Rungego-Kutty. Każdemu drzewu przypisujemy pewne wyrażenie symboliczne Φ i liczbę naturalną γ , z których konstruujemy poszukiwane równanie. Należy uwzględnić **wszystkie** drzewa danego stopnia.

Obliczenie Φ

- Każdemu wierzchołkowi, oprócz liści, przypisujemy etykietę i, j, \dots ; korzeniowi przypisujemy etykietę i .
- Korzeniowi przypisujemy wielkość w_i .
- Każdej krawędzi niekończącej się w liściu przypisujemy wielkość β_{kl} , gdzie k, l są etykietami początkowego i końcowego wężła tej krawędzi.
- Każdej krawędzi kończącej się w liściu przypisujemy wielkość α_l , gdzie l jest etykietą przypisaną początkowi tej krawędzi.
- Sporządzamy iloczyn

$$w_i \cdot (\text{iloczyn wszystkich } \beta_{kl}) \cdot (\text{iloczyn wszystkich } \alpha_l) .$$

- Sumujemy po wszystkich występujących w grafie etykietach i, j, \dots od 1 do s , gdzie s jest liczbą etapów.

Obliczenie γ

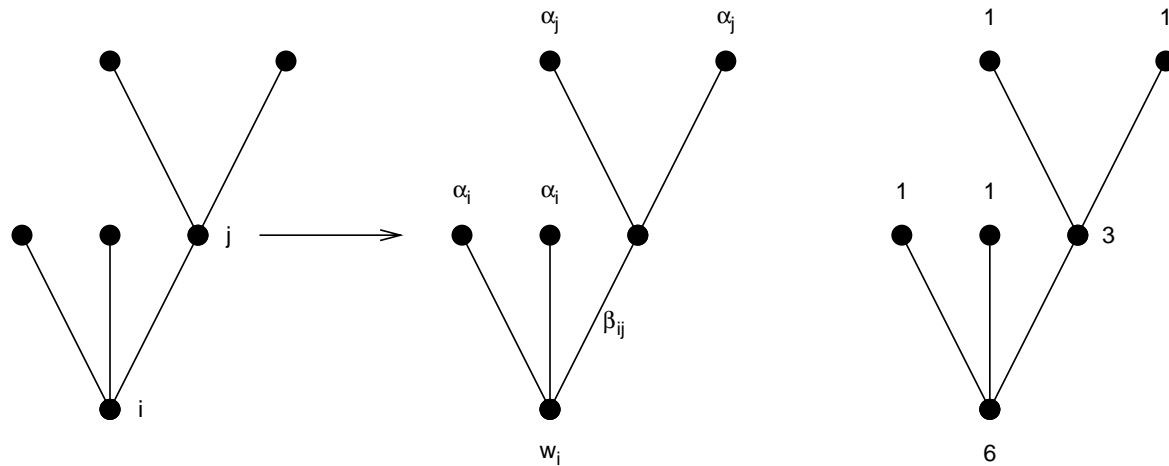
- Każdemu liściowi przypisujemy wagę 1.
- Każdemu węzłowi niebędącemu liściem przypisujemy wagę równą (suma wag węzłów, do których dochodzą krawędzie wychodzące z danego węzła) + 1.
- $\gamma =$ iloczyn wag wszystkich węzłów drzewa.

Równanie, któremu odpowiada dane drzewo, znajdujemy jako

$$\Phi = \frac{1}{\gamma}. \quad (1)$$

Uwaga! Tak wyprowadzone równania *implicite* zawierają warunek $\alpha_i = \sum_j \beta_{ij}$, który wobec tego trzeba uwzględnić “ręcznie”.

Przykład

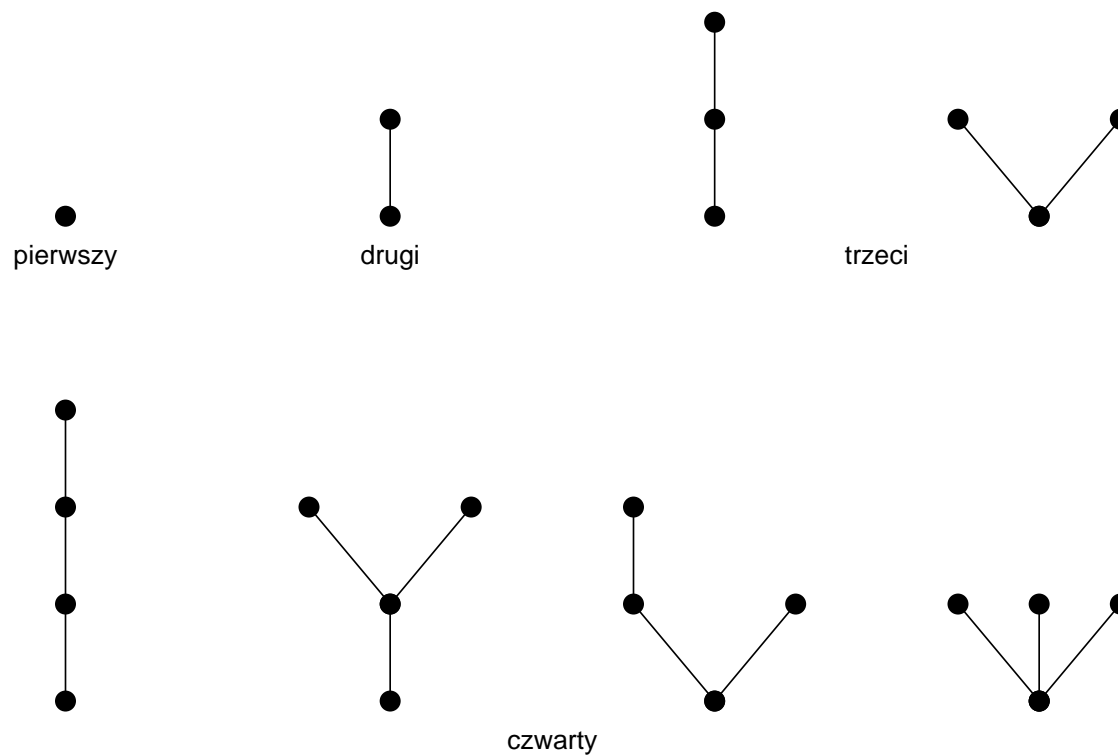


$$\Phi = \sum_{ij}^s w_i \beta_{ij} \alpha_i^2 \alpha_j^2, \quad \gamma = 1 \cdot 1 \cdot 3 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 6 = 18.$$

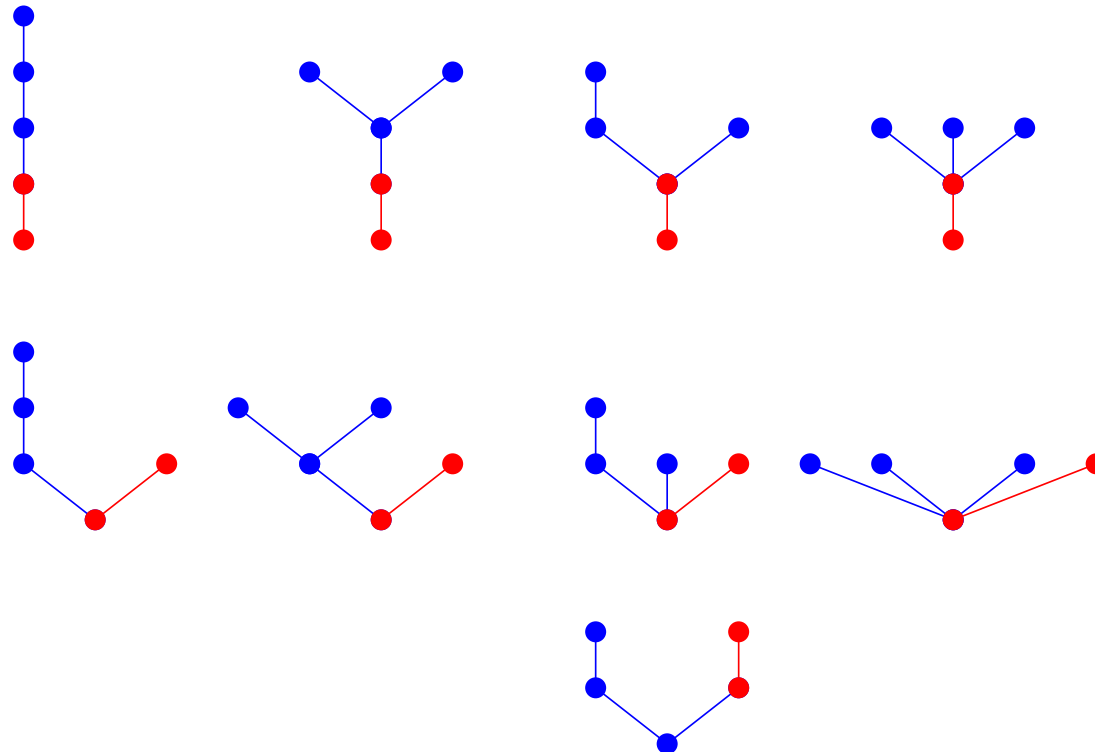
Dyskutowane drzewo stopnia szóstego odpowiada równaniu

$$\sum_{i=1}^s w_i \alpha_i^2 \sum_{j=1}^s \beta_{ij} \alpha_j^2 = \frac{1}{18}. \quad (2)$$

Wszystkie drzewa stopnia nie większego niż 4



Drzewa stopnia piątego



Drzewa stopnia piątego powstają przez dodanie jednej krawędzi do drzew stopnia czwartego

Stabilność metod RK

Dla ustalenia uwagi przypominam, że rozwiązujemy problem Cauchy'ego

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \end{cases} \quad (3)$$

za pomocą s -etapowej metody Rungego-Kutty rzędu p :

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \sum_{i=1}^s w_i \mathbf{k}_i + O(h^{p+1}), \quad (4a)$$

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{f}\left(t_n + h\alpha_i, \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^s \beta_{ij} \mathbf{k}_j\right). \quad (4b)$$

W celu zbadania stabilności metody RK, zaburzymy y_n w (4a) oraz (4b) przez pewne ε_n , przy czym $\|\varepsilon_n\| \ll 1$. W miejsce (4a) otrzymamy

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} + \varepsilon_{n+1} &= y_n + \varepsilon_n + h \sum_{i=1}^s w_i \mathbf{k}_i(y_n + \varepsilon_n) \\
 &\simeq y_n + \varepsilon_n + h \sum_{i=1}^s w_i \mathbf{k}_i(y_n) + h \sum_{i=1}^s w_i \mathbf{L}_i \varepsilon_n \\
 &= y_{n+1} + \varepsilon_n + h \mathbf{w}^T \vec{\mathbf{L}} \varepsilon_n = y_{n+1} + \mathbf{G} \varepsilon_n, \quad (5)
 \end{aligned}$$

$\mathbf{L}_i, i = 1, \dots, s$, są macierzami o składowych

$$[\mathbf{L}_i]_{\mu\nu} = \frac{\partial (\mathbf{k}_i)_\mu}{\partial (\boldsymbol{\varepsilon}_n)_\nu}, \quad (6)$$

$\vec{\mathbf{L}}$ oznacza wektor złożony z tych macierzy, $\mathbf{w}^T = [w_1, \dots, w_s]^T$, zaś $\mathbf{G} = \mathbb{I} + h\vec{\mathbf{w}}^T \vec{\mathbf{L}}$ jest macierzą wzmocnienia. Metoda jest stabilna, gdy wszystkie wartości własne macierzy wzmocnienia \mathbf{G} spełniają zależność $|g| < 1$ (wartości własne g mogą być zespolone). Kluczowe staje się obliczenie macierzy \mathbf{L}_i . Mamy

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (\mathbf{k}_i)_\mu}{\partial (\boldsymbol{\varepsilon}_n)_\nu} &= \frac{\partial \left(\mathbf{f} \left(x_n + \alpha_i h, \mathbf{y}_n + \boldsymbol{\varepsilon}_n + h \sum_j^s \beta_{ij} \mathbf{k}_j (\mathbf{y}_n + \boldsymbol{\varepsilon}_n) \right) \right)_\mu}{\partial (\boldsymbol{\varepsilon}_n)_\nu} \\
&= \sum_{\sigma=1}^N \mathbf{J}_{\mu\sigma} \left(\delta_{\sigma\nu} + h \sum_{j=1}^s \beta_{ij} \frac{\partial (\mathbf{k}_j)_\sigma}{\partial (\boldsymbol{\varepsilon}_n)_\nu} \right). \tag{7}
\end{aligned}$$

\mathbf{J} jest macierzą Jacobiego funkcji \mathbf{f} po drugim argumentcie. Formalnie rzecz biorąc, jej elementy należałoby obliczać w każdym punkcie pośrednim z osobna. Przyjmijmy jednak przybliżenie polegające na tym, iż obliczamy tę macierz w lewym krańcu przedziału — prowadzi to do poprawek wyższego rzędu w h .

Reprezentacja diagonalna

Przejdźmy do reprezentacji, w której macierz ta jest diagonalna i oznaczmy przez λ pewną wartość własną macierzy \mathbf{J} . Formalnie rzecz biorąc, poniższą procedurę należy powtórzyć dla wszystkich wartości własnych \mathbf{J} , okaże się jednak, że nie jest to konieczne. Równanie (7) możemy przepisać teraz w postaci

$$\mathbf{L}_i = \lambda \left(1 + h \sum_{j=1}^s \beta_{ij} \mathbf{L}_j \right), \quad i = 1, \dots, s. \quad (8)$$

(8) jest układem równań, z którego można wyliczyć poszukiwane wielkości \mathbf{L}_i .

Współczynnik wzmocnienia

Układ ten można zapisać w postaci

$$[\mathbb{I} - \lambda h \mathbf{B}] \vec{\mathbf{L}} = \lambda \hat{\mathbf{e}}, \quad (9)$$

gdzie $\hat{\mathbf{e}} = [1, 1, \dots, 1]^T$, zaś $[\mathbf{B}]_{ij} = \beta_{ij}$. Oznaczając $z = \lambda h$, ostatecznie otrzymujemy następujące wyrażenie na współczynnik wzmocnienia:

$$g = 1 + z \vec{\mathbf{w}}^T [\mathbb{I} - z \mathbf{B}]^{-1} \hat{\mathbf{e}}. \quad (10)$$

g jest liczbą, nie macierzą; “macierzowość” macierzy wzmocnienia \mathbf{G} brała się z “macierzowości” jacobianu, a skoro jacobian zastąpiliśmy wartością własną, \mathbf{G} zastąpiliśmy jej wartościami własnymi.

Obszar stabilności

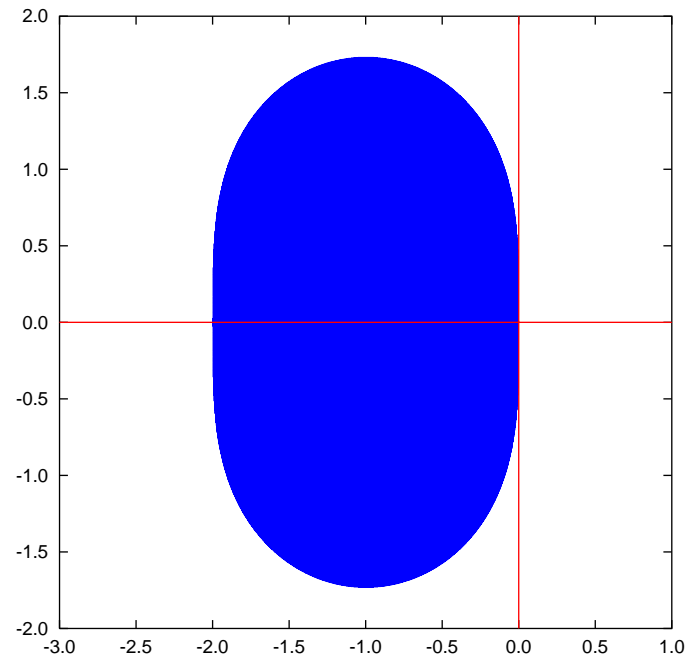
Badanie stabilności metod RK sprowadza się teraz do wyznaczenia *obszaru stabilności* metody, to jest zbioru takich $z \in \mathbb{C}$, że współczynniki g wyliczone dla wszystkie wartości własnych macierzy Jacobiego spełniają $|g| < 1$. Metoda RK jest stabilna, jeśli dla *wszystkich* wartości własnych macierzy Jacobiego we *wszystkich* punktach pośrednich, $z = h \times$ (wartość własna) należy do obszaru stabilności. Zauważmy, że w ten sposób “uwolniliśmy się” niejako od szczegółów równania, które rozwiązujemy: własności równania (funkcji f) tkwią w wartościach własnych macierzy Jacobiego, czyli w liczbach z . **Kształt obszaru stabilności zależy tylko od wybranej metody RK.**

Przykład: Obszar stabilności jawnej metody punktu środkowego

Badamy

$$\begin{aligned}g &= 1 + z \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \left(\mathbb{I} - z \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= 1 + z \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{z}{2} & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= 1 + z \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{z}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= 1 + z \begin{bmatrix} \frac{z}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 1 + z + \frac{z^2}{2}\end{aligned}\tag{11}$$

Brzeg obszaru stabilności znajdziemy rozwiązując $\left|1 + z + \frac{z^2}{2}\right| = 1$, czyli $1 + z + \frac{z^2}{2} = e^{i\phi}$ dla $\phi \in [0, 2\pi]$.

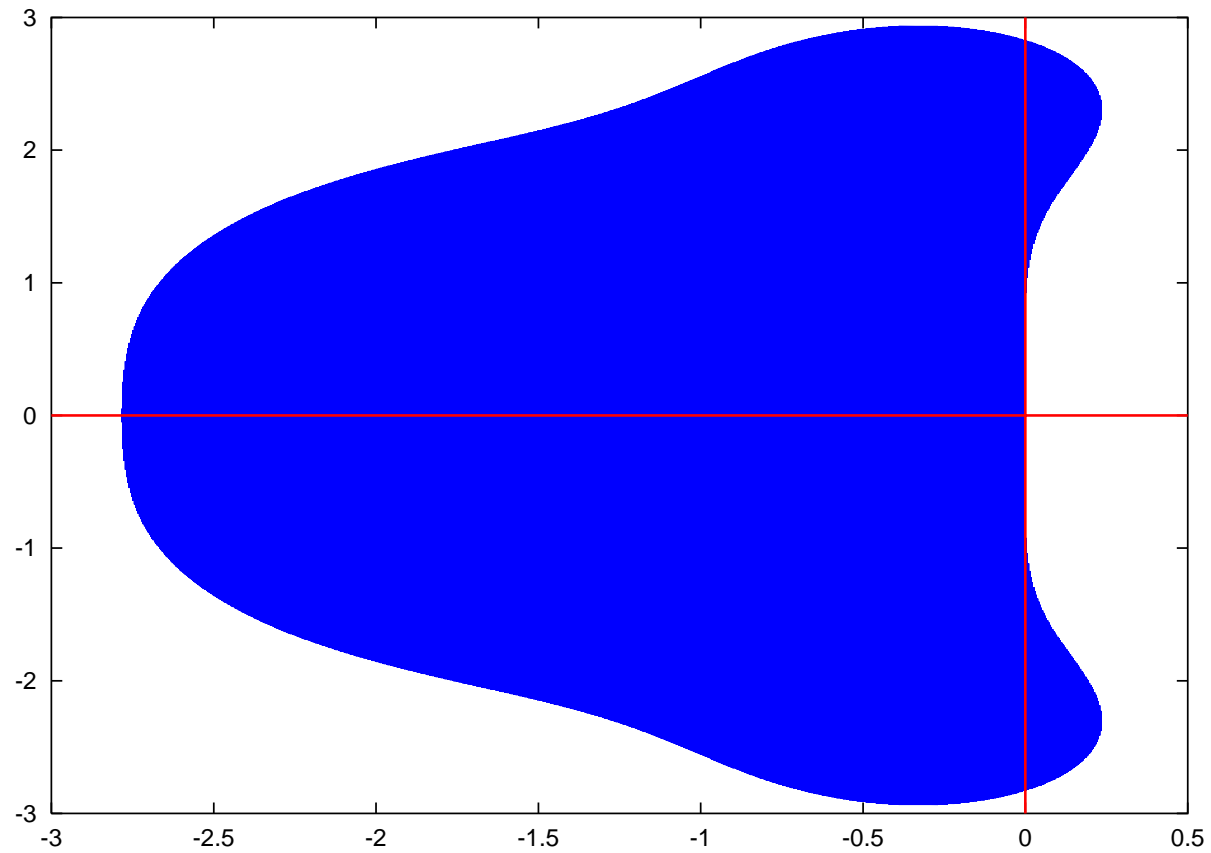


Przykład: Obszar stabilności niejawnej metody punktu środkowego

$$g = 1 + z \cdot 1 \cdot \left(1 - \frac{z}{2}\right)^{-1} \cdot 1 = \frac{2+z}{2-z},$$
$$|g|^2 = \left|\frac{2+z}{2-z}\right|^2 = \frac{(2+x)^2 + y^2}{(2-x)^2 + y^2} \quad (12)$$

gdzie $z = x + iy$. Widać, że $|g|^2 < 1 \Leftrightarrow x < 0$: Obszarem stabilności metody jest cała lewa półpłaszczyzna.

Obszar stabilności klasycznej czteroetapowej metody Rungego-Kutty



Sprawdzanie stabilności

- Aby sprawdzić stabilność metody, obliczamy $z = h\lambda$, gdzie h jest krokiem, λ jest wartością własną jakobianu prawej strony równania (3) i sprawdzamy, czy $|g(z)| < 1$, gdzie g dane jest równaniem (10).
- Procedurę powtarzamy dla *wszystkich* wartości własnych jakobianu.
- Jeżeli za którymkolwiek razem wyjdzie nam $|g(z)| > 1$, *jedyne*, co możemy zrobić, to zmienić krok całkowania h . Nie zawsze uda się w ten sposób uzyskać stabilność! Jeśli się nie uda, musimy wybrać inną metodę całkowania równania.
- Obszar stabilności **nie zależy od rozwiązywanego równania**, a tylko od zastosowanej metody. Równanie “pojawia się” w procedurze badania stabilności **tylko** poprzez wartości własne jakobianu prawej strony.
- Ponieważ jakobian może zmieniać się, krok, który w jednym miejscu zapewniał stabilność, w innym nie musi dawać stabilności.

Uwaga! Obszar stabilności jest obszarem na płaszczyźnie zespolonej. Mimo iż rozwiązujemy rzeczywiste równania z rzeczywistymi krokami, musimy rozważać wielkości zespolone, gdyż **wartości własne jakobianu** — będącego, w ogólności, macierzą niesymetryczną — **mogą być zespolone.**

Obszary stabilności metod jawnych i niejawnych

Współczynnik wzmocnienia g może być albo funkcją wymierną, albo wielomianem w z . W tym drugim przypadku obszar stabilności metody jest z całą pewnością skończony, jako że każdy wielomian rośnie nieograniczenie (na moduł) przy $z \rightarrow \infty$. Jeśli natomiast współczynnik g jest funkcją wymierną w z , to jest możliwe, że obszar stabilności metody jest nieograniczony. Jeśli w szczególności cała lewa półpłaszczyzna płaszczyzny zespolonej należy do obszaru stabilności, mówimy, że metoda jest A–stabilna. Oznacza to, że dowolnie wielki krok h nie prowadzi do utraty stabilności (oczywiście nie znaczy to, że rozwiązanie numeryczne uzyskane z krokiem $h \gg 0$ będzie miało wiele wspólnego z rozwiązaniem analitycznym — znaczy to tylko, że błąd z poprzednich kroków nie przenosi się do kroków następnych).

W jaki sposób g może stać się funkcją wymierną w z ? Może się tak stać tylko przy obliczaniu $[\mathbb{I} - z\mathbf{B}]^{-1}$, a jeszcze ściślej, przy dzieleniu przez wyznacznik $\det [\mathbb{I} - z\mathbf{B}]$. Zauważmy, że dla metody jawnej macierz \mathbf{B} ma tylko elementy poddiagonalne, a zatem $\det [\mathbb{I} - z\mathbf{B}] = 1$, a skoro tak, to g są wielomianami w z . Widzimy zatem, że **jawne metody RK mają ograniczony obszar stabilności** — *tylko metody niejawne mogą mieć nieograniczony obszar stabilności.*