

Два метода для неявного интегрирования жёстких систем реакции

Бутаков Иван Дмитриевич, butakov.id@phystech.edu
Терехов Кирилл Михайлович

Структура доклада

- Постановка задачи
- Обзор методов
- Модифицированный метод Ньютона
- Взвешенный метод Эйлера
- Обобщённая функция знака
- Численные эксперименты

Постановка задачи

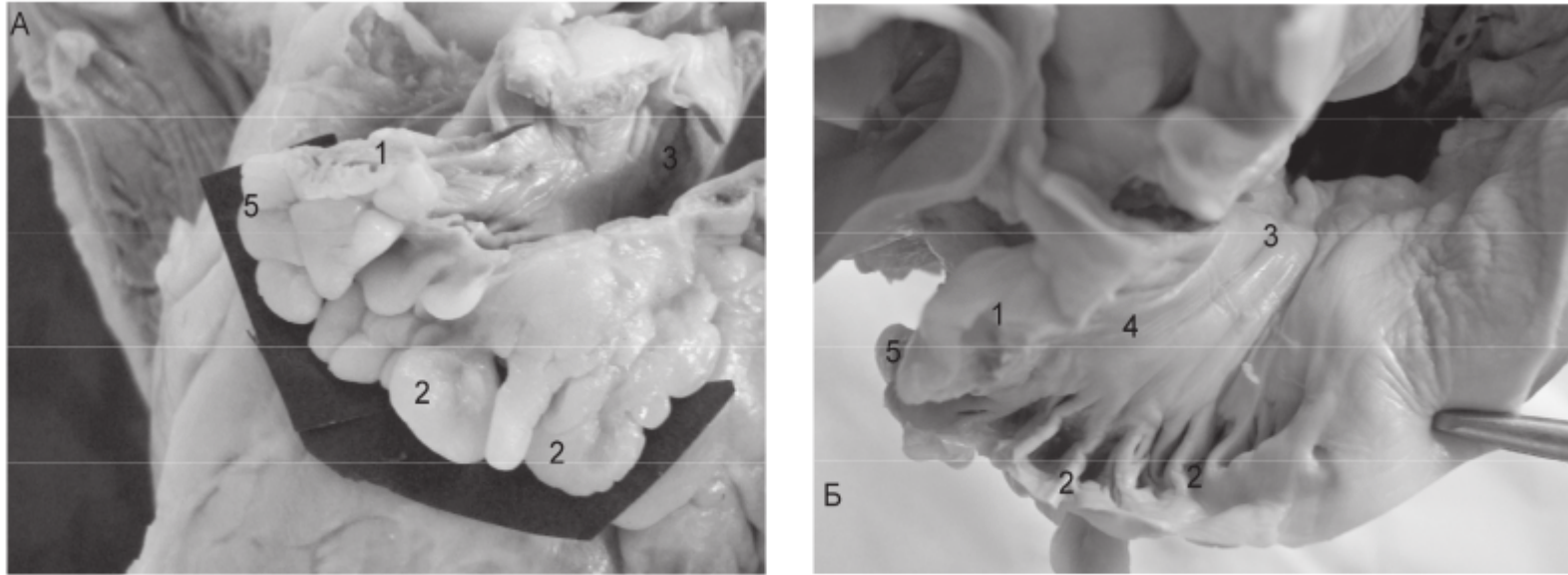


Рис. 2. Внешний (А) и внутренний (Б) вид левого ушка при митральном пороке. 1 – верхний край, 2 – нижний край с куполоподобными полостями, 3 – устье, 4 – тело, 5 – верхушка.

При патологиях в сердце характер течения в придатке левого предсердия меняется, повышается риск образования в нем тромба.

Постановка задачи

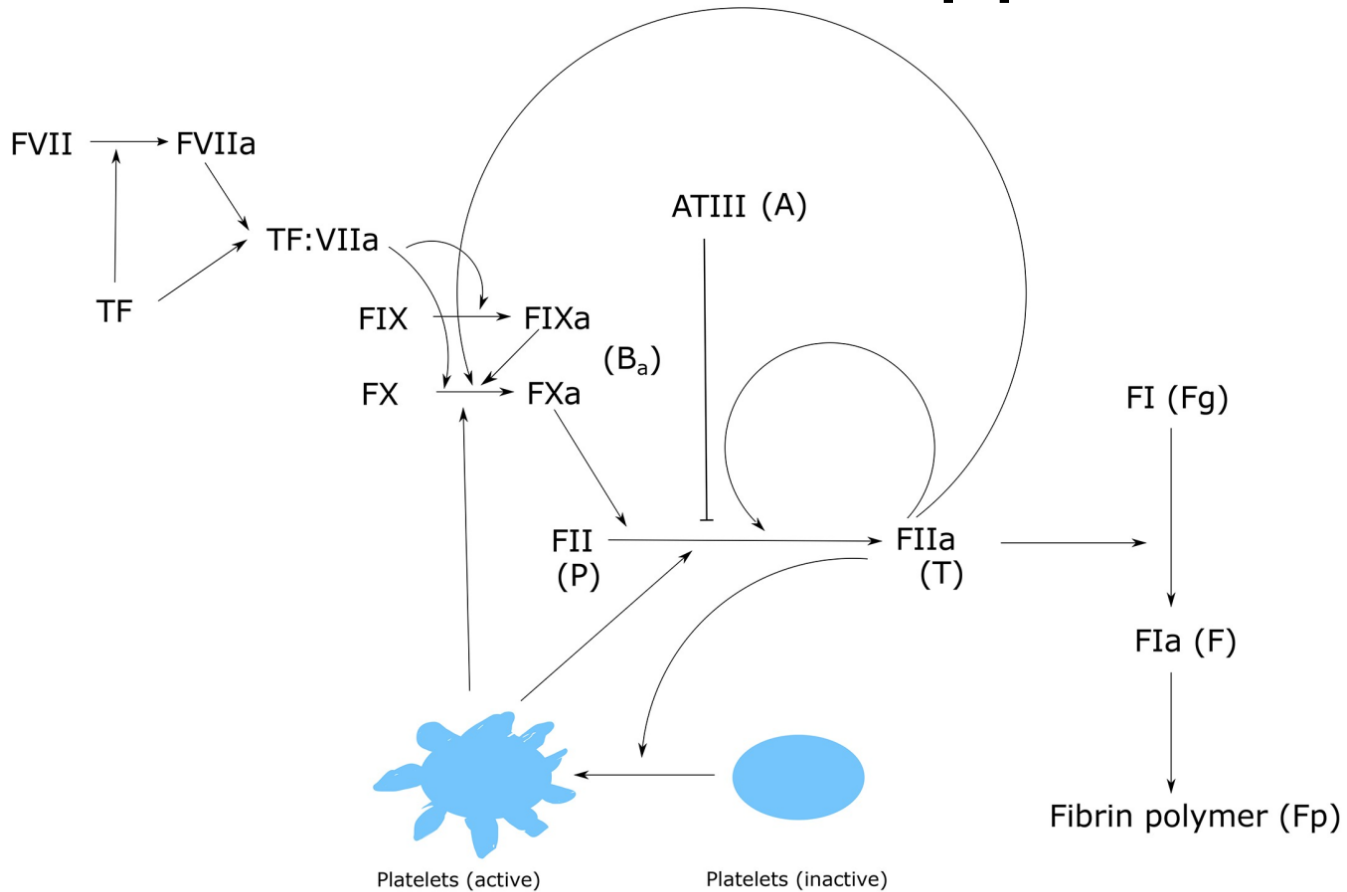


Fig 1. Schematic representation of the part of the coagulation cascade described in the model.

Постановка задачи

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= - (k_1 \phi_c + k_2 B_\alpha + k_3 T + k_4 T^2 + k_5 T^3) P, \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= (k_1 \phi_c + k_2 B_\alpha + k_3 T + k_4 T^2 + k_5 T^3) P - k_6 AT, \\ \frac{\partial B_\alpha}{\partial t} &= (k_7 \phi_c + k_8 T) (B^0 - B_\alpha) - k_9 AB_\alpha, \quad \frac{\partial A}{\partial t} = -k_6 AT - k_9 AB_\alpha, \\ \frac{\partial F_g}{\partial t} &= -\frac{k_{10} T F_g}{K_{10} + F_g}, \quad \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{k_{10} T F_g}{K_{10} + F_g} - k_{11} F, \quad \frac{\partial F_p}{\partial t} = k_{11} F, \\ \frac{\partial \phi_c}{\partial t} &= - (k_{12} T - k_{13} \phi_c) \phi_f, \quad \frac{\partial \phi_f}{\partial t} = (k_{12} T - k_{13} \phi_c) \phi_f. \end{aligned}$$

Коэффициент	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	k_7
Значение	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$7.5 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-6}$	10^{-10}	$4.817 \cdot 10^{-6}$	10^{-9}

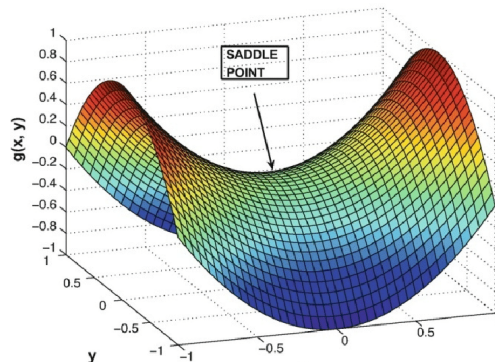
Коэффициент	k_8	k_9	k_{10}	K_{10}	k_{11}	k_{12}	k_{13}	B^0
Значение	$5.2173 \cdot 10^{-5}$	$2.223 \cdot 10^{-9}$	0.005	3160	0.1	0.002	$4 \cdot 10^{-9}$	200

Постановка задачи

Система **жёсткая, нелинейная, чувствительная** к выходу переменных в **отрицательную область.**

$$\Delta t \approx 10^{-9} \text{ с} \quad T \approx 10^3 \text{ с}$$

Гипотеза: седловой характер системы.



Обзор методов

- Стабильные неявные методы [1, 2, 3, 4]
- Поиск всех корней нелинейного уравнения [5]
- Квазиньютоновские методы [6, 7, 8, 9]

1. W. Auzinger, R. Frank, G. Kirlinger, Modern convergence theory for stiff initial-value problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 45 (1-2) (1993) 516.
2. G. G. Dahlquist, A special stability problem for linear multistep methods, *BIT Numerical Mathematics* 3 (1) (1963) 2743.
3. G. Dahlquist, On stability and error analysis for stiff non-linear problems part i, *Tech. rep.*, CM-P00069396 (1975).
4. M. Liu, L. Zhang, C. Zhang, Study on banded implicit runge-kutta methods for solving stiff differential equations, *Mathematical Problems in Engineering* 2019 (2019).
5. Patrick E. Farrell and Casper H L Beentjes and 'Asgeir Birkisson, The computation of disconnected bifurcation diagram, *arXiv: Numerical Analysis* (2016).
6. P. N. Brown, A. C. Hindmarsh, H. F. Walker, Experiments with quasi-newton methods in solving stiff ode systems, *SIAM journal on scientific and statistical computing* 6 (2) (1985) 297313.
7. R. Alexander, The modified newton method in the solution of stiff ordinary differential equations, *mathematics of computation* 57 (196) (1991) 673701.
8. P. K. Moore, L. R. Petzold, A stepsize control strategy for stiff systems of ordinary differential equations, *Applied numerical mathematics* 15 (4) (1994) 449463.
9. S. Schlenkrich, A. Walther, A. Griewank, Application of ad-based quasi-newton methods to stiff odes, in: *Automatic Differentiation: Applications, Theory, and Implementations*, Springer, 2006, pp. 8998.

Метод Ньютона

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = f(\mathbf{x}, t), \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \end{cases} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad f : \mathbb{R}^d \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$$

$$\mathcal{R}(\mathbf{x}^{n+1}) = \mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n - \Delta t f(\mathbf{x}^{n+1}, t^{n+1}) = \mathbf{0}$$

Метод Ньютона

$$\mathcal{J}_m (\mathbf{x}_{m+1}^{n+1} - \mathbf{x}_m^{n+1}) = -\mathcal{R}_m,$$

$$\mathcal{R}_m = \mathbf{x}_m^{n+1} - \mathbf{x}^n - \Delta t f(\mathbf{x}_m^{n+1}, t^{n+1}), \quad \mathbf{x}_0^{n+1} = \mathbf{x}^n,$$

$$\mathcal{J}_m = \left. \frac{\partial \mathcal{R}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_m^{n+1}} = \mathbb{I} - \Delta t F_m, \quad F_m = \left. \nabla f(\mathbf{x}, t^{n+1}) \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_m^{n+1}}$$

Модифицированный метод Ньютона

$$F^n = E\Lambda E^{-1}, \quad M = ESE^{-1}, \quad S = \frac{1}{2} (1 - \varphi(\Delta t\lambda_i))$$

$$\mathbf{x}_{m+1}^{n+1} = \mathbf{x}_m^{n+1} - (\mathbb{I} - \Delta t M F_m^{n+1})^{-1} \mathcal{R}_m^{n+1}.$$

Обобщённая функция знака:

$$\varphi : \quad \lim_{\operatorname{Re} z \rightarrow \pm\infty} \varphi(z) = \pm 1$$

Взвешенный метод Эйлера

Подберём невязку так, чтобы получить желаемую матрицу Якоби:

$$\bar{\mathcal{R}}(\mathbf{x}^{n+1}) = \mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n - \Delta t M f(\mathbf{x}^{n+1}, t^{n+1}) - \Delta t (\mathbb{I} - M) f(\mathbf{x}^n, t^n) = \mathbf{0}$$

Обобщённая функция знака

Подбором обобщённой функции знака решим **точно** автономную задачу, имеющую аналитическое решение.

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = F^n (\mathbf{x} - \mathbf{x}^n) + f^n, \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^n, \end{cases} \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad f^n \in \mathbb{R}^d, \quad F^n \in \mathbb{R}^{d \times d}$$

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}^n + (F^n)^{-1} (\exp(tF^n) - \mathbb{I}) f^n$$

Обобщённая функция знака

Подбором обобщённой функции знака решим **точно** автономную задачу, имеющую аналитическое решение.

$$(\mathbb{I} - \Delta t M F^n) (\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n) = \Delta t f^n$$

$$(\mathbb{I} - \Delta t M F^n) (F^n)^{-1} (\exp(\Delta t F^n) - \mathbb{I}) f^n = \Delta t f^n$$

Обобщённая функция знака

Подбором обобщённой функции знака решим **точно** автономную задачу, имеющую аналитическое решение.

$$M = (\Delta t F^n)^{-1} - (\exp(\Delta t F^n) - \mathbb{I})^{-1}$$

$$\varphi(z) = 1 - \frac{2}{z} + \frac{2}{e^z - 1} \approx \frac{z}{6} - \frac{z^3}{360} + O(z^5)$$

$$M = E \operatorname{diag} \left(\frac{1}{\lambda_i \Delta t} - \frac{1}{e^{\lambda_i \Delta t} - 1} \right) E^{-1}$$

Лемма 1. Рассмотрим целую функцию $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ с действительными коэффициентами в разложении в ряд Тейлора и $F = E\Lambda E^{-1} \in \mathbb{R}^{d \times d}$, где $\Lambda = \text{diag}(\lambda_i)$. В этих условиях матрица $E \text{diag}(f(\lambda_i))E^{-1}$ вещественная.

Доказательство.

$$E \text{diag}(f(\lambda_i))E^{-1} = E \text{diag} \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n \lambda_i^n \right) E^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n E \Lambda^n E^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (E \Lambda E^{-1})^n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (F)^n \in \mathbb{R}^{d \times d}.$$

□

Следствие 1. Если $F \in \mathbb{R}^{d \times d}$ диагонализуемая и невырожденная со спектром в области определения $\varphi(z)$, то весовая матрица M , определённая в (6), вещественная.

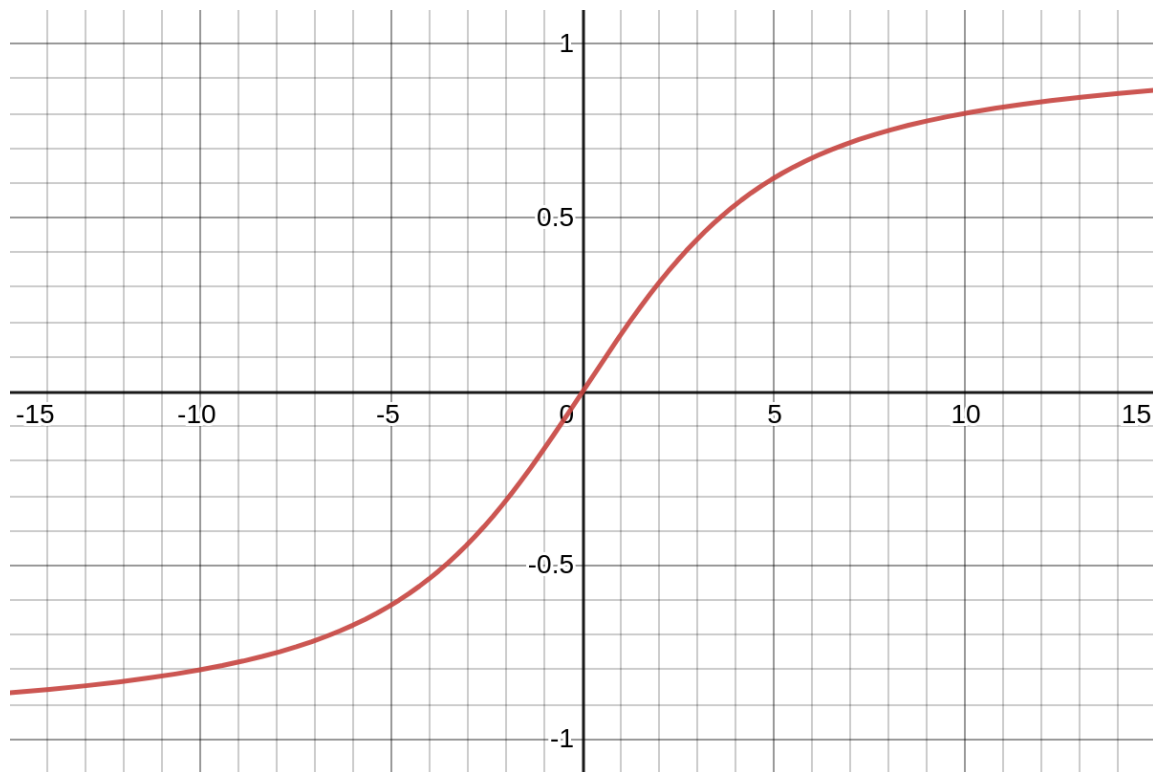
Доказательство. Так как $f(z) = e^z$ регулярна \mathbb{C} и имеет вещественные коэффициенты в разложении в ряд Тейлора, матрица

$$M = \frac{1}{2} E \text{diag}(1 - \varphi(\Delta t \lambda_i)) E^{-1} = E \text{diag} \left(\frac{1}{\Delta t \lambda_i} - \frac{1}{e^{\Delta t \lambda_i} - 1} \right) E^{-1} = F^{-1} - [E \text{diag}(f(\Delta t \lambda_i)) E^{-1} - \mathbb{I}]^{-1}$$

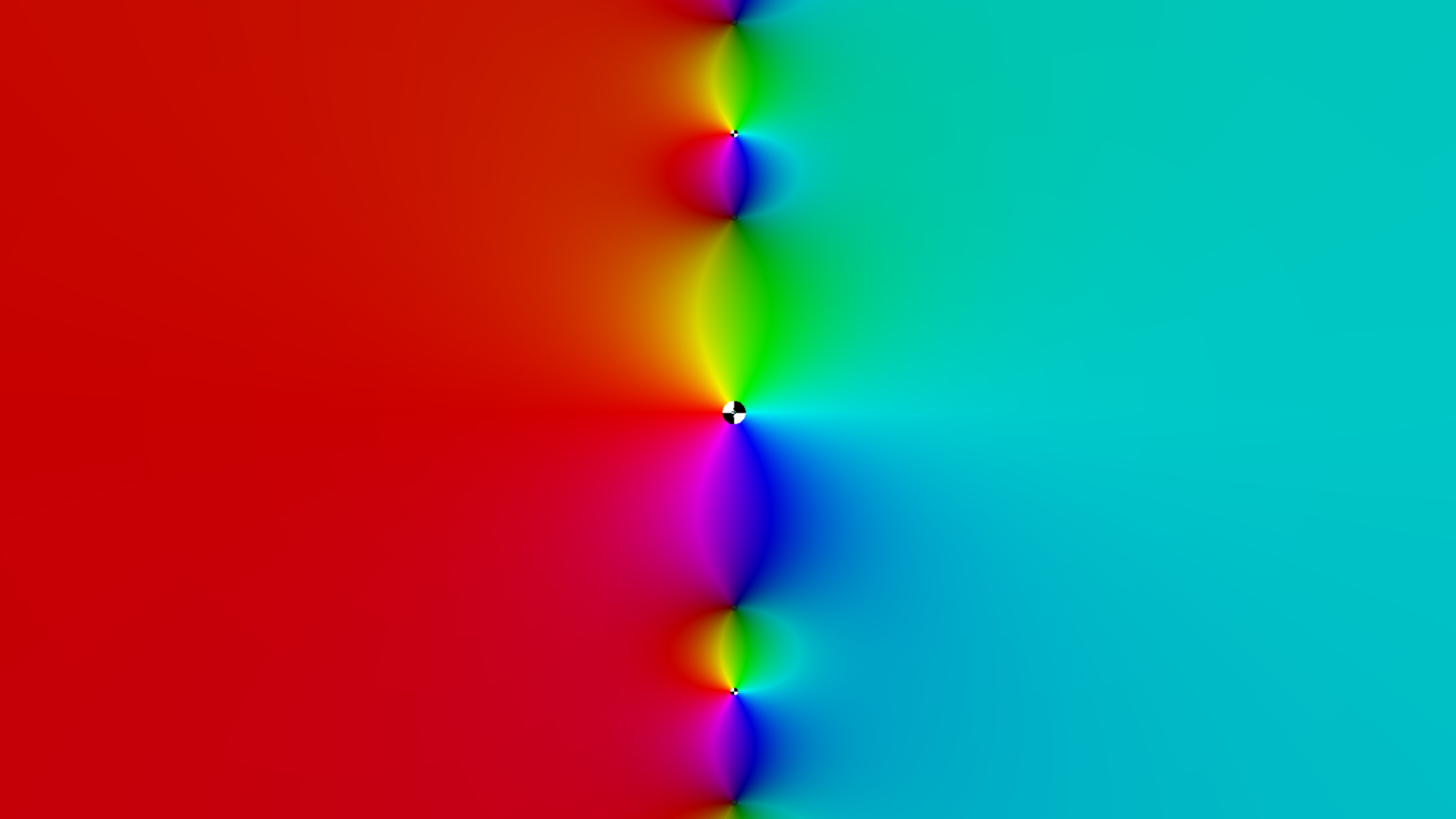
вещественная.

□

Обобщённая функция знака

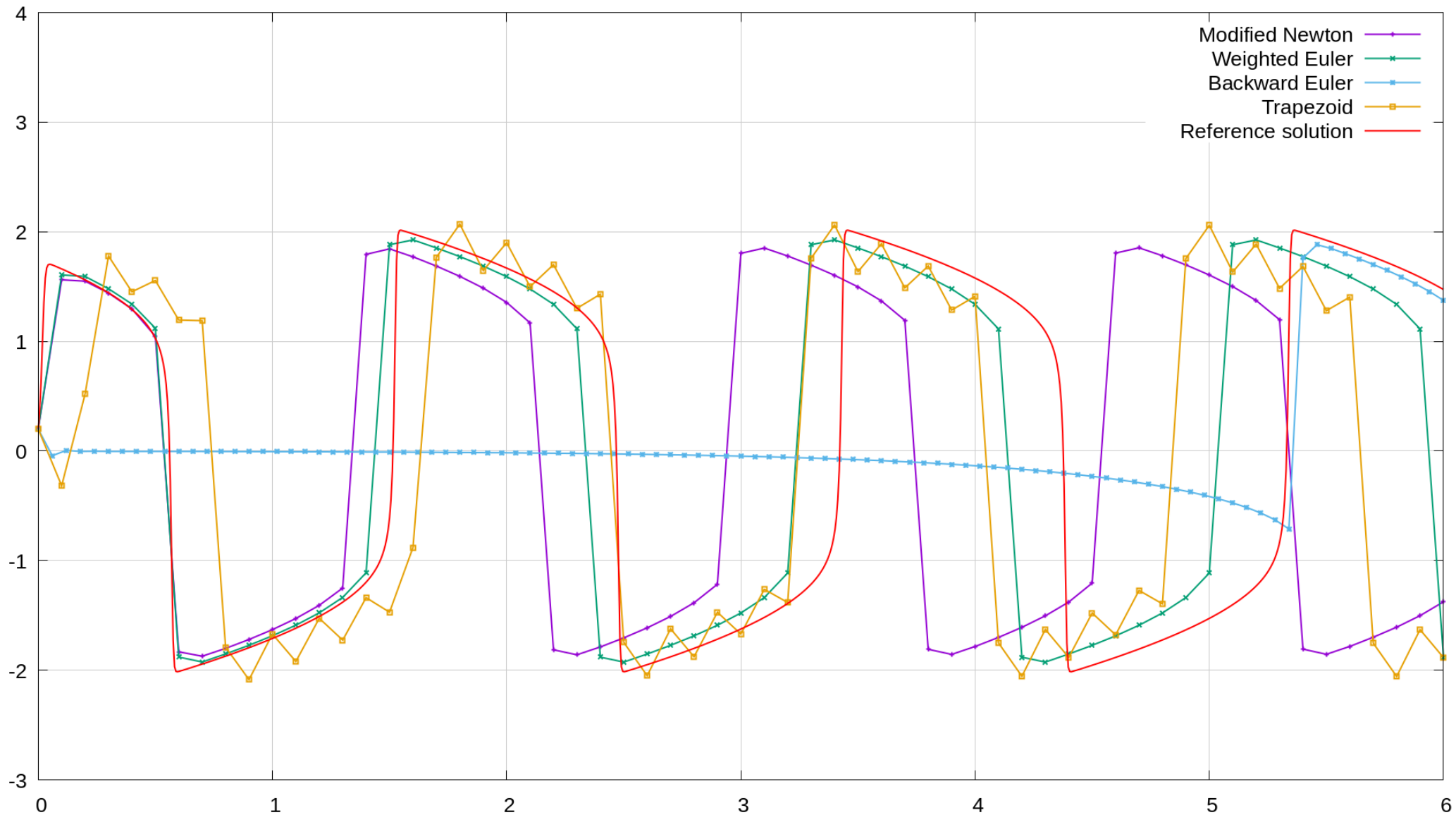


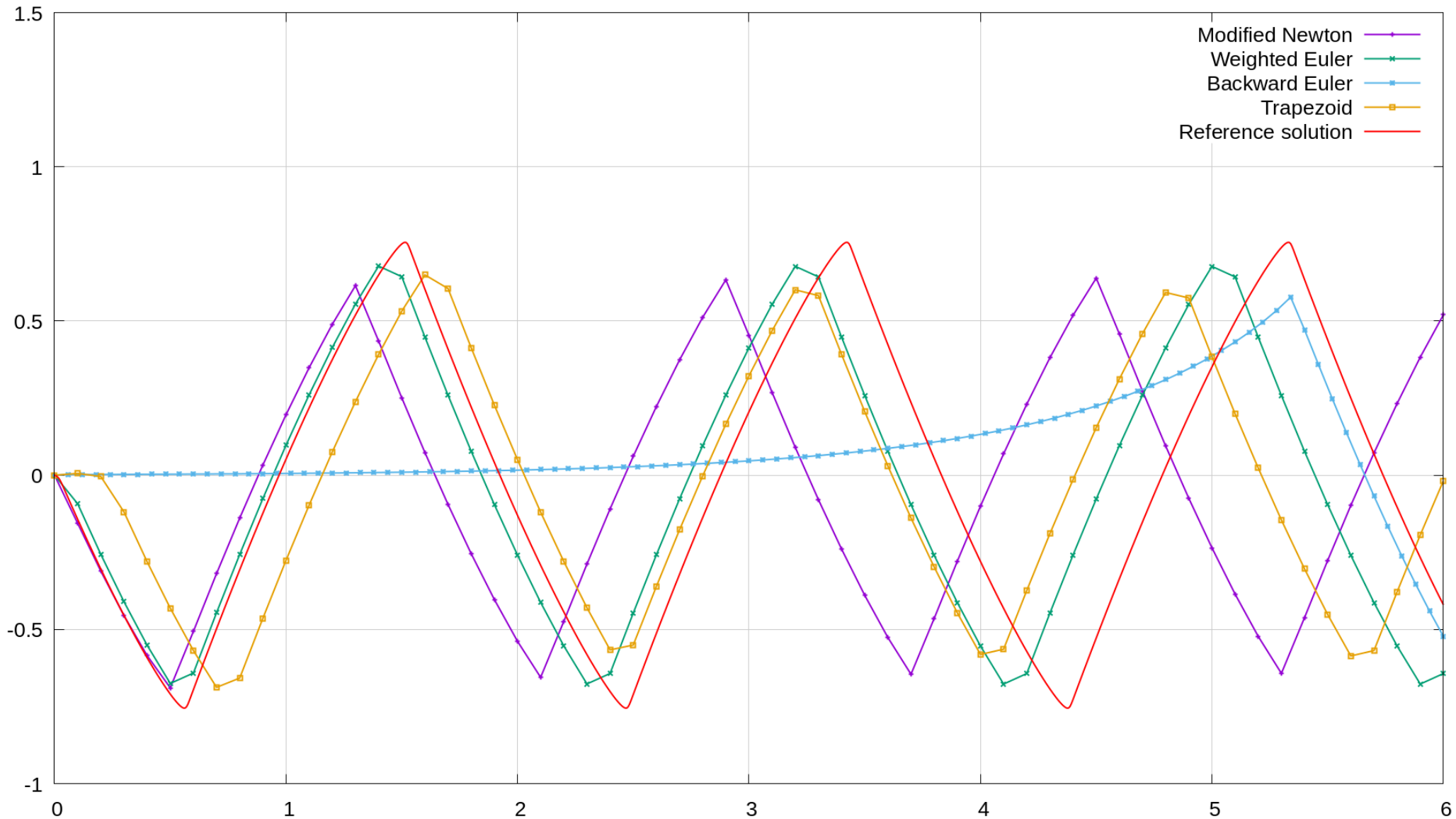
(вещественная ось)

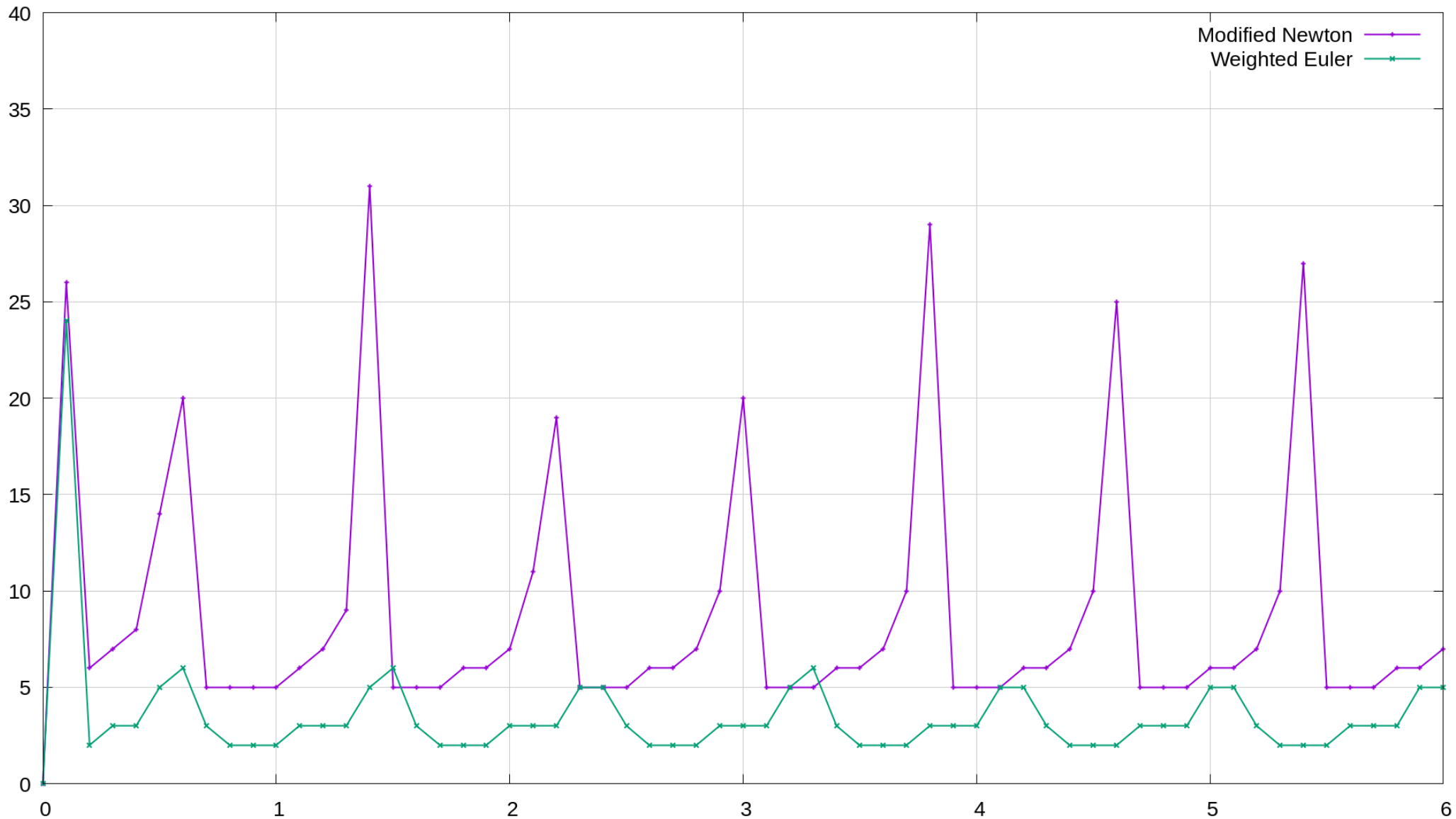


Численные эксперименты

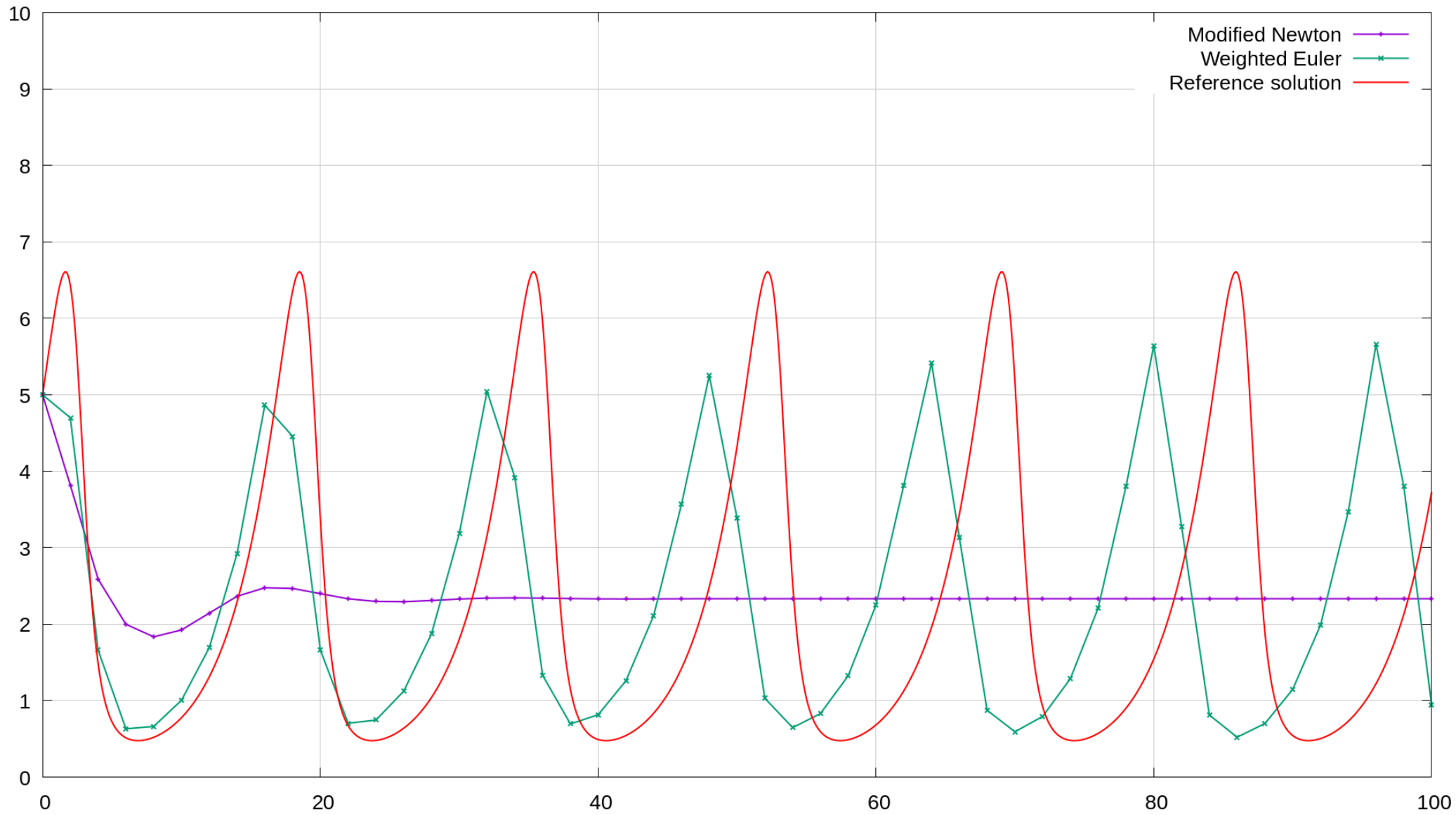
Система Ван дер Поля

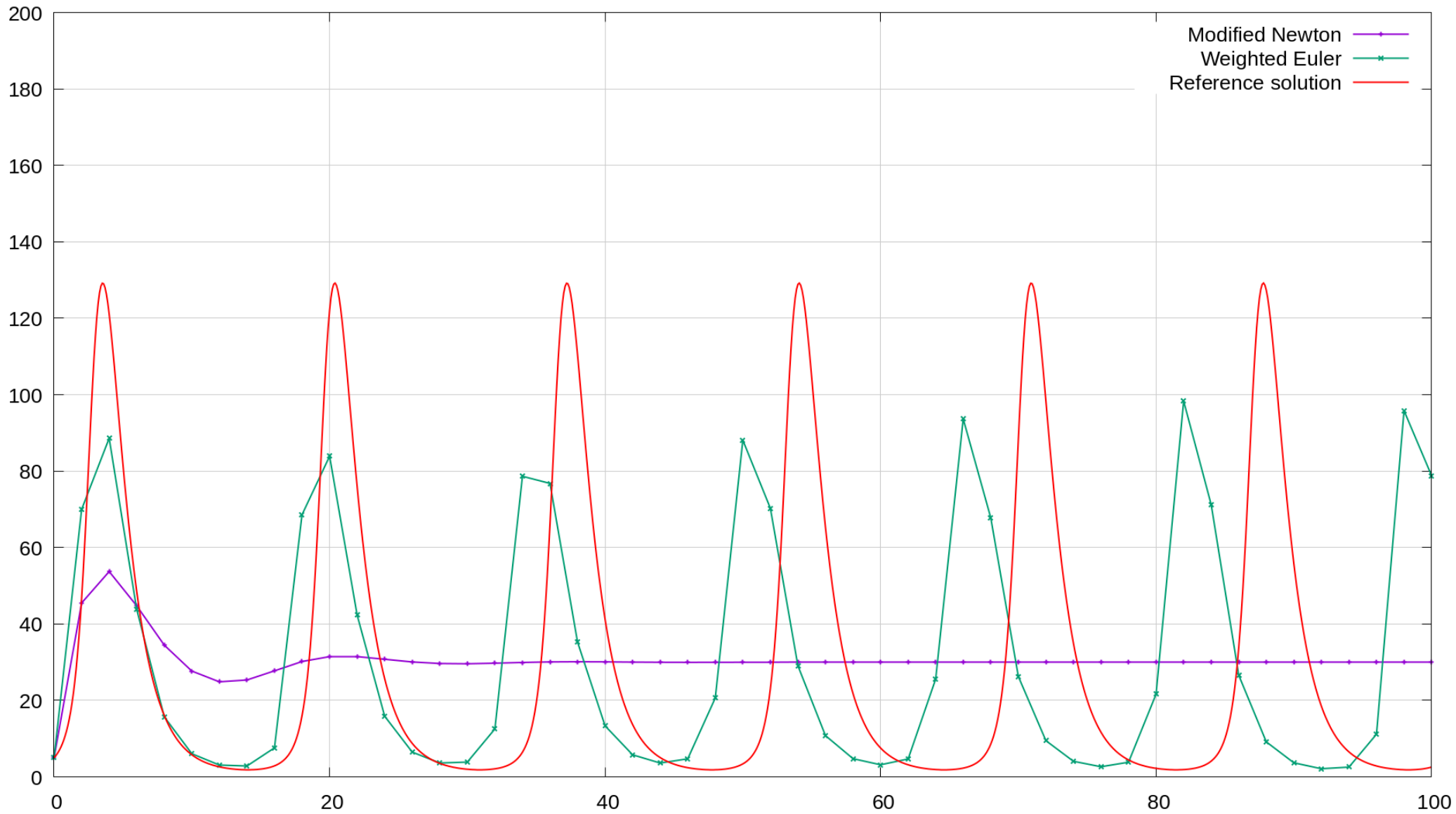


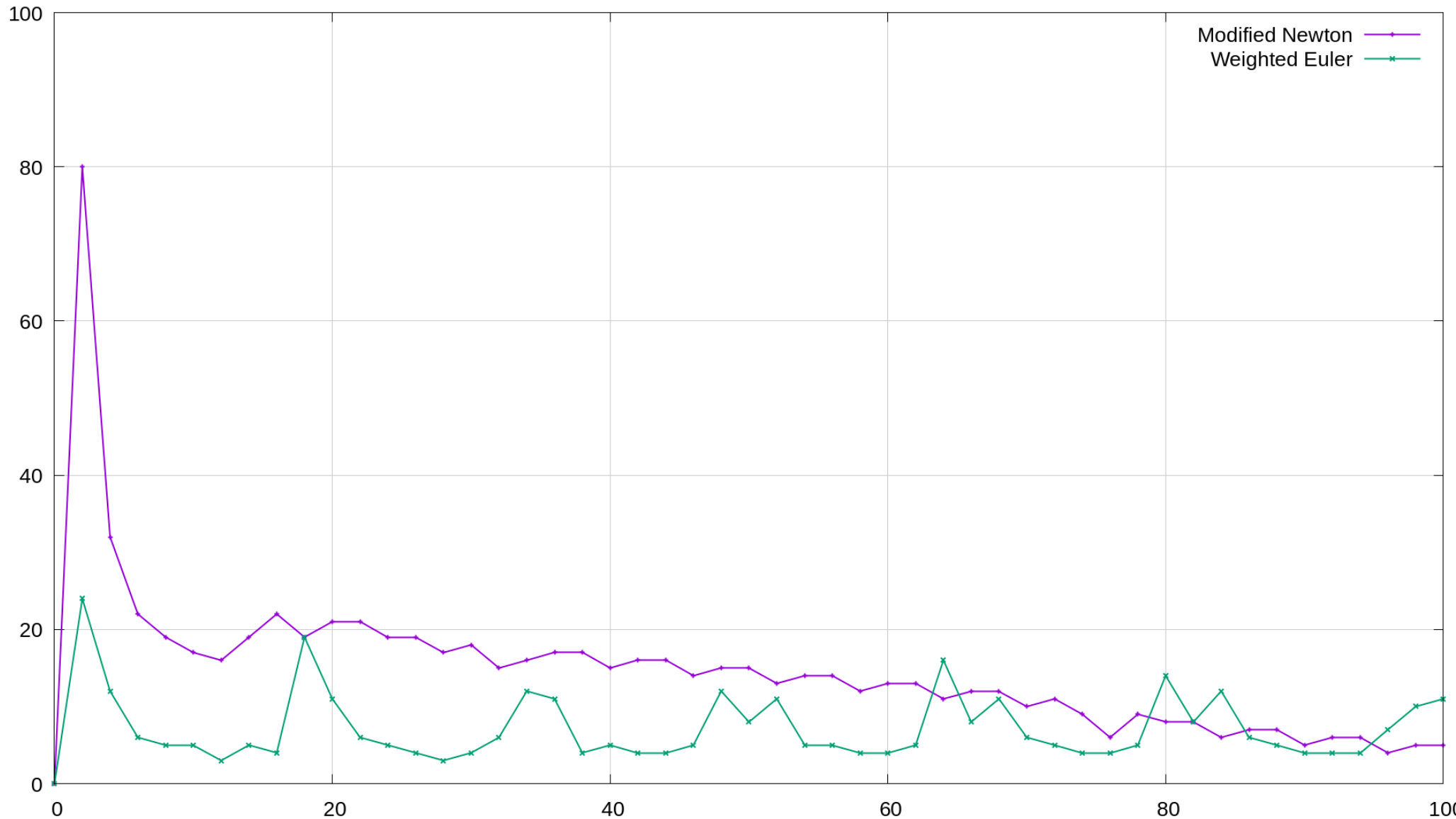




Система Лотки — Вольтерры







Каскад свёртывания крови

$$\mathcal{E}_x = \sqrt{T \int_{t \in [0, T]} (x(t) - x_{ref}(t))^2 dt} / \int_{t \in [0, T]} |x_{ref}(t)| dt .$$

Метод	Δt	N_{it}^{tot}	N_{it}^{avg}	N_{it}^{min}	N_{it}^{max}	\mathcal{E}	N_{it}^{neg}
Неявный Эйлера,	10^{-2}	10812	1.0812	1	3	$1.7 \cdot 10^{-2}$	0
Неявный Эйлера,	10^{-1}	2032	2.032	2	5	0.17	0
Неявный Эйлера,	1	233	2.33	2	19	0.79	10
Трапеций	10^{-2}	10701	1.0701	1	3	$1.6 \cdot 10^{-3}$	0
Трапеций	10^{-1}	2023	2.023	2	4	$3.8 \cdot 10^{-2}$	0
Модифицированный Ньютона	10^{-2}	22071	2.20	2	7	$1.7 \cdot 10^{-2}$	0
Модифицированный Ньютона	10^{-1}	3740	3.74	3	20	0.17	0
Модифицированный Ньютона	1	768	7.68	4	53	0.79	10
Модифицированный Ньютона	2	502	10.0	5	82	1.14	12
Модифицированный Ньютона	5	240	12.0	9	26	1.19	13
Модифицированный Ньютона	10	164	16.4	11	20	1.17	6
Взвешенный Эйлера	10^{-2}	10716	1.0716	1	3	$1.6 \cdot 10^{-3}$	0
Взвешенный Эйлера	10^{-1}	2052	2.052	2	7	$3.3 \cdot 10^{-2}$	0
Взвешенный Эйлера	$2.5 \cdot 10^{-1}$	861	2.1525	2	15	$8.2 \cdot 10^{-2}$	3

Выводы и дальнейшие направления работ

- Построены два семейства численных методов, основанных на собственном разложении матрицы Якоби системы
- Улучшение в некоторых случаях как устойчивости, так и точности решения жёстких систем
- Подбор других функций знака, а также эксперименты с приближённым собственным разложением
- Внедрение методов как отдельного модуля для решения жёстких систем реакций

Спасибо за внимание