Metody numeryczne

Równania różniczkowe zwyczajne, część I

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Równania różniczkowe zwyczajne

1. Zagadnienia początkowe
   - Metoda Eulera
   - Metody Rungego–Kutty
   - Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne

Równania różniczkowe zwyczajne

Trzy rodzaje zadań:

1. zagadnienia początkowe
2. zagadnienia brzegowe
3. zagadnienia własne

Zagadnienia początkowe (1)

Niech

$$y = (y_1, \ldots, y_n), \;\; g(y,t) = [g_1(y,t), \ldots, g_n(y,t)]$$

Szukamy rozwiązań układu równań

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = g(y,t), \;\; y(t_0) = y_0$$

Zagadnienia początkowe (2)

Twierdzenie 1 *Niech funkcja $g(y,t)$ będzie zdefiniowana i ciągła w pewnym pasie $S := \{(t,y) : \ a \le t \le b, \ y \in \mathbb{R}^n\}$, gdzie a i b są skończone. Niech istnieje stała L taka, że*

$$\|g(y_1,t) - g(y_2,t)\| \le L\|y_1 - y_2\|$$

dla każdego $t \in \langle a,b\rangle$ i każdego $y_1, \ y_2 \in \mathbb{R}^n$ (warunek Lipschitza). Wówczas dla każdego $t_0 \in \langle a,b\rangle$ i dla każdego $y_0 \in \mathbb{R}^n$ istnieje dokładnie jedna funkcja $y(t)$ taka, że

1. *$y(t)$ jest ciągła i różniczkowalna w sposób ciągły dla $t \in \langle a,b\rangle$;*
2. *$y'(t) = g(y(t),t)$ dla $t \in \langle a,b\rangle$;*
3. *$y(t_0) = y_0$.*

Równania wyższych rzędów

Przykład Równanie Newtona jednowymiarowego oscylatora harmonicznego:

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -kx$$

Niech

$$\eta_1 = x, \quad \eta_2 = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$

Wówczas

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\eta_1}{\mathrm{d}t} &= \eta_2 \\ \frac{\mathrm{d}\eta_2}{\mathrm{d}t} &= -\frac{k}{m}\eta_1 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ równania wyższych możemy sprowadzić do układu równań pierwszego rzędu

Metoda Eulera (1)

Przybliżamy pochodną w równaniu różniczkowym wzorem dwupunktowym,

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} \approx \frac{y_{n+1} - y_n}{t_{n+1} - t_n} \approx g(y_n, t_n)$$

Wówczas

$$y_{n+1} = y_n + \tau g(t_n, y_n), \;\; n \geq 1, \;\; \tau = t_{n+1} - t_n$$

Własności:

- prostota
- mała dokładność
- mała stabilność numeryczna

Metoda Eulera (2)

$$Y(t) \in \mathbb{C}^2(\langle t_0, b\rangle) \quad - \quad \text{rozwiązanie dokładne}$$

$$\epsilon_n = Y_n - y_n \quad - \quad \text{błąd rozwiązania}$$

$$\begin{aligned} Y_{n+1} &= Y_n + \tau g(t_n, Y_n) + T_n \\ T_n &= \frac{1}{2} h^2 Y''(\xi_n), \;\; \xi_n \in (t_n, t_{n+1}) \end{aligned}$$

Zachodzi

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n + \tau[g(t_n, Y_n) - g(t_n, y_n)] + T_n$$

Metoda Eulera (3)

Funkcja g musi spełniać warunek Lipschitza

$$\Rightarrow \quad |\epsilon_{n+1}| \leq (1+\tau L)|\epsilon_n| + |T_n|$$

T_n szacujemy w następujący sposób:

$$|T_n| \leq \frac{1}{2}\tau^2 M_2 = T, \quad M_2 = \max_{\langle t_0, b\rangle} |Y''(t)|$$

Stąd

$$|\epsilon_{n+1}| \leq (1+\tau L)|\epsilon_n| + T$$

Zapiszmy ostatnią nierówność w postaci

$$|\epsilon_{n+1}| \leq a|\epsilon_n| + b, \quad a \geq 1$$

Metoda Eulera (4)

Mamy

$$\begin{aligned} |\epsilon_1| &= a|\epsilon_0| + b, \\ |\epsilon_2| &= a^2|\epsilon_0| + b(1+a), \end{aligned}$$

i ogólnie

$$|\epsilon_n| \leq b\frac{a^n - 1}{a - 1} + a^n|\epsilon_0|$$

Stąd

$$|\epsilon_n| \leq T\frac{(1+\tau L)^n - 1}{\tau L} + (1+\tau L)^n|\epsilon_0|$$

Metoda Eulera (5)

Dla $u > 0$ zachodzi $1 + u < e^u$,więc

$$|\epsilon_n| \leq \frac{T}{\tau L}\left(e^{L(t_n - t_0)} - 1\right) + e^{L(t_n - t_0)}|\epsilon_0|$$

Jeśli $\epsilon_0 = 0$ i $T = \frac{1}{2}\tau^2 M_2$, to ostatecznie

$$|\epsilon_n| \leq \frac{1}{2}\frac{M_2}{L}\tau\left(e^{L(t_n - t_0)} - 1\right)$$

$\Rightarrow$ metoda jest rzędu $O(\tau)$

$\Rightarrow$ dla uzyskania sensownej dokładności trzeba wybierać bardzo małą długość kroku τ

Metoda Eulera (6)

Przykład Rozważmy następujące zagadnienie początkowe:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = y, \quad y(0) = 1$$

Rozwiązanie dokładne:

$$y(x) = e^x$$

Metoda Eulera daje wzór

$$y_{n+1} = y_n + hy_n, \quad y_0 = 1,$$

gdzie h to długość kroku na osi x

Metoda Eulera (7)

$h = 0,2$				$h = 0,1$			
x_n	y_n	$y(x_n)$	$\epsilon_n = y(x_n) - y_n$	x_n	y_n	$y(x_n)$	ϵ_n
0,0	1,0000	1,0000	0,0000	0,0	1,0000	1,0000	0,0000
				0,1	1,1000	1,1052	0,0052
0,2	1,2000	1,2214	0,0214	0,2	1,2100	1,2214	0,0114
				0,3	1,3310	1,3499	0,0189
0,4	1,4400	1,4918	0,0518	0,4	1,4641	1,4918	0,0277
				0,5	1,6105	1,6487	0,0382
0,6	1,7280	1,8221	0,0941	0,6	1,7716	1,8221	0,0506
				0,7	1,9487	2,0138	0,0650
0,8	2,0736	2,2255	0,1519	0,8	2,1436	2,2255	0,0820
				0,9	2,3579	2,4596	0,1017
1,0	2,4883	2,7183	0,2300	1,0	2,5937	2,7183	0,1245

Metoda Eulera (8)

Przykład

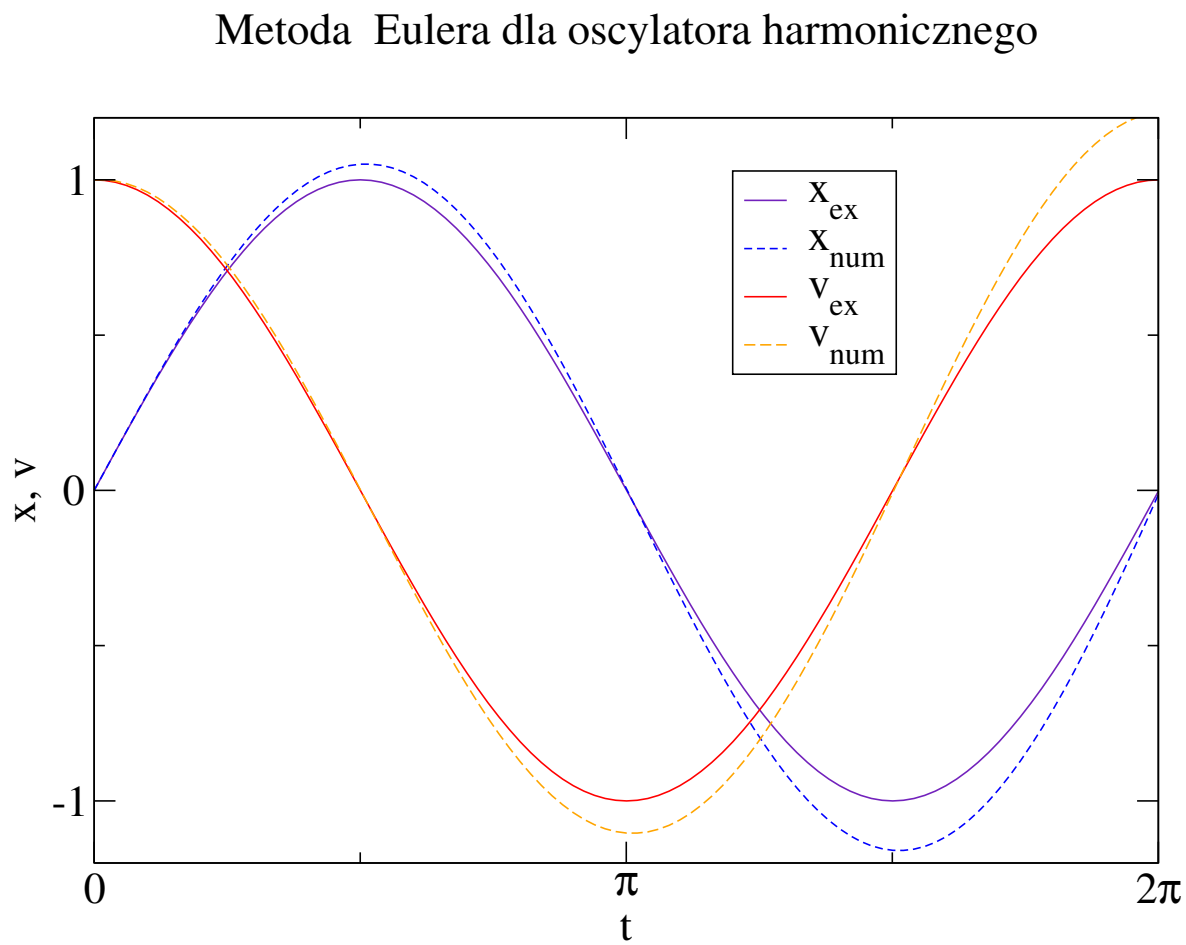
Jednowymiarowy oscylator harmoniczny

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -x$$

z warunkami początkowymi

$$x_0 = 0, \quad v_0 = 1$$

Metoda Eulera (9)



Metoda Eulera (10)

Załóżmy, że zmienna y_n w czasie t_n obarczona jest błędem ϵ_n,

$$y_{n+1} + \epsilon_{n+1} = y_n + \epsilon_n + g((y_n + \epsilon_n), t_n)\tau$$

Rozwijamy $g(y_n + \epsilon_n, t_n)$ w szereg Taylora wokół y_n,

$$g(y_n + \epsilon_n, t_n) = g(y_n, t_n) + \left.\frac{\partial g}{\partial y}\right|_{y=y_n} \epsilon_n + O(\epsilon_n^2)$$

Stąd:

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n + \left.\frac{\partial g}{\partial y}\right|_{y=y_n} \tau\epsilon_n + O(\epsilon_n^2).$$

Metoda Eulera (11)

Współczynnik wzmocnienia w schemacie Eulera ma postać

$$\eta = 1 + \left.\frac{\partial g}{\partial y}\right|_{y=y_n} \tau$$

Trzy różne klasy zagadnień:

1. równania typu “rozpadu”, kiedy $\partial g/\partial y < 0$,
2. równania typu “wzrostu”, gdzie $\partial g/\partial y > 0$,
3. równania typu oscylacyjnego, gdy y jest wielkością zespoloną, a $\partial g/\partial y$ jest urojone.

Metoda Eulera (12)

Metoda jest stabilna numerycznie, kiedy błąd nie rośnie wraz z liczbą kroków n

$$\Rightarrow \quad |\eta| \leq 1$$

Stąd dla pierwszej klasy równań otrzymamy warunek

$$-\left.\frac{\partial g}{\partial y}\right|_{y=y_n} \tau \leq 2$$

$\Rightarrow$ dopuszczalna wielkość kroku, dla której metoda jest stabilna, wynosi

$$\tau \leq -\frac{2}{\partial g/\partial y|_{y=y_n}}$$

Metoda Eulera (13)

Przykład

Rozważmy równanie

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = -y, \;\; y(0) = 1$$

Rozwiązanie analityczne:

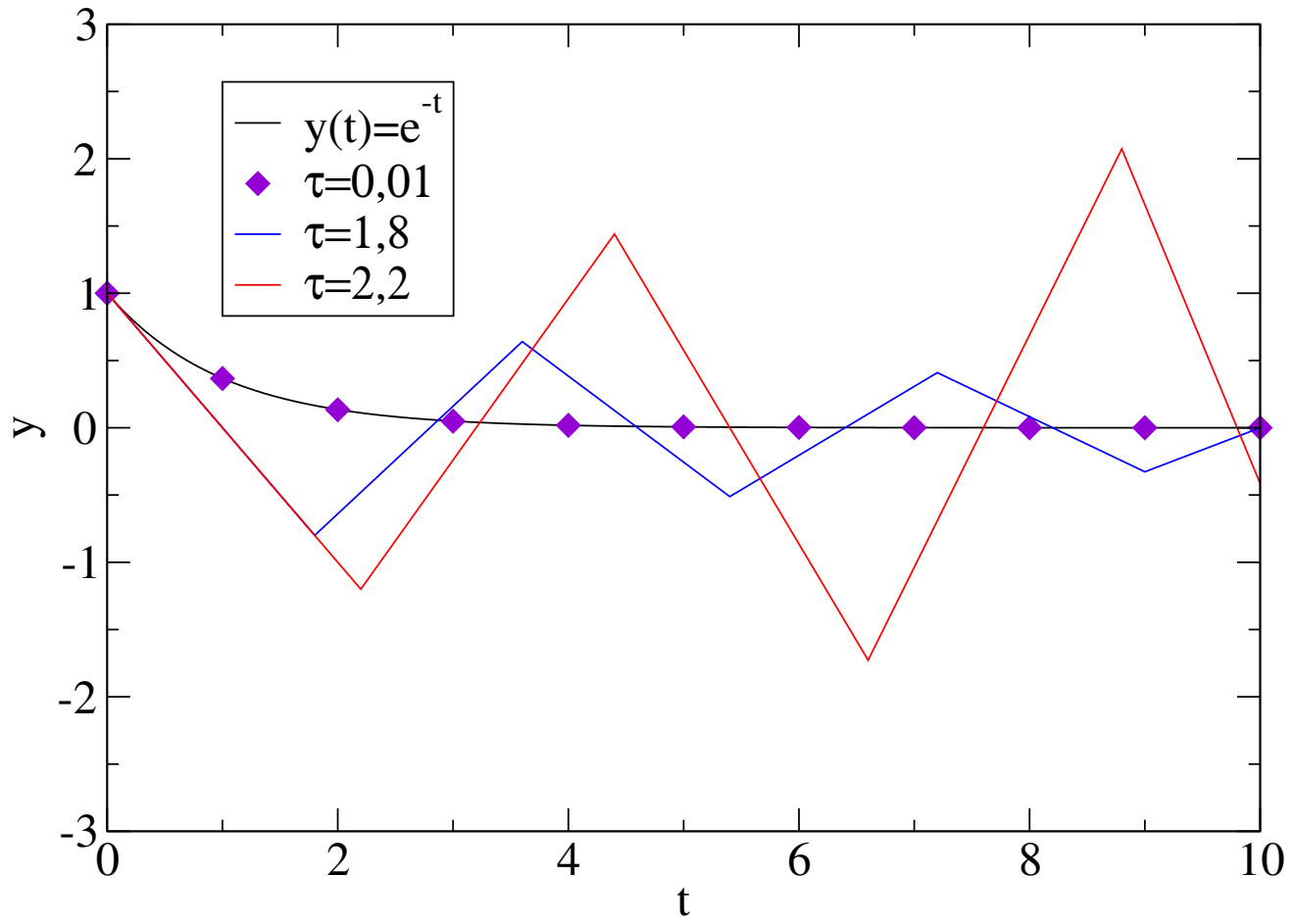
$$y(t) = e^{-t}$$

Chcemy rozwiązać zagadnienie początkowe metodą Eulera.

Dopuszczalna długość kroku:

$$\tau \leq 2$$

Metoda Eulera (14)



Metody Rungego–Kutty (1)

Rozważmy równanie

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = g(y,t)$$

Formalnie możemy rozwinąć funkcję $y(t+\tau)$ w otoczeniu wartości t w szereg Taylora,

$$\begin{aligned} y(t+\tau) &= y + \tau y' + \frac{\tau^2}{2} y'' + \frac{\tau^3}{3!} y^{(3)} + \ldots \\ &= y + \tau g + \frac{\tau^2}{2}(g_t + g g_y) + \\ &\quad \frac{\tau^3}{6}(g_{tt} + 2 g g_{ty} + g^2 g_{yy} + g g_y^2 + g_t g_y) + \ldots \end{aligned}$$

przy czym

$$g_t = \frac{\partial g}{\partial t}, \quad g_y = \frac{\partial g}{\partial y} \quad \text{itd.}$$

Metody Rungego–Kutty (2)

Z drugiej strony chcemy, aby formalne rozwiązanie zagadnienia początkowego dało się zapisać w postaci

$$y(t+\tau) = y(t) + \alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 + \ldots + \alpha_n k_n,$$

gdzie

$$\begin{aligned}
k_1 &= \tau g(y,t), \\
k_2 &= \tau g(y + \nu_{21} k_1, t + \nu_{21}\tau) \\
k_3 &= \tau g(y + \nu_{31} k_1 + \nu_{32} k_2, t + \nu_{31}\tau + \nu_{32}\tau) \\
&\vdots \\
k_n &= \tau g\left(y + \sum_{l=1}^{n-1} \nu_{nl} k_l, t + \tau \sum_{l=1}^{n-1} \nu_{nl}\right)
\end{aligned}$$

Metody Rungego–Kutty (3)

Urywamy szereg Taylora na wyrazach stopnia drugiego:

$$y(t+\tau) \simeq y + \tau g + \frac{\tau^2}{2}(g_t + g g_y)$$

Podobnie postępujemy z rozwiązaniem formalnym:

$$\begin{aligned} y(t+\tau) &= y(t) + \alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 \\ k_1 &= \tau g(y,t) \\ k_2 &= \tau g(y + \nu_{21} k_1, t + \nu_{21}\tau) \end{aligned}$$

Rozwijamy k_2 w szereg Taylora:

$$k_2 \simeq \tau g + \nu_{21}\tau^2 (g_t + g g_y)$$

Metody Rungego–Kutty (4)

Stąd

$$y(t+\tau) = y + (\alpha_1 + \alpha_2)\tau g + \alpha_2 \tau^2 \nu_{21}(g_t + g g_y)$$

Porównując ostatnie wyrażenie z szeregiem Taylora uzyskamy

$$\begin{aligned} \alpha_1 + \alpha_2 &= 1, \\ \alpha_2 \nu_{21} &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ wybór parametrów nie jest jednoznaczny

$\Rightarrow$ dodatkowy sposób zwiększenia dokładności obliczeń

Metody Rungego–Kutty (5)

Klasyczny wzór czwartego rzędu

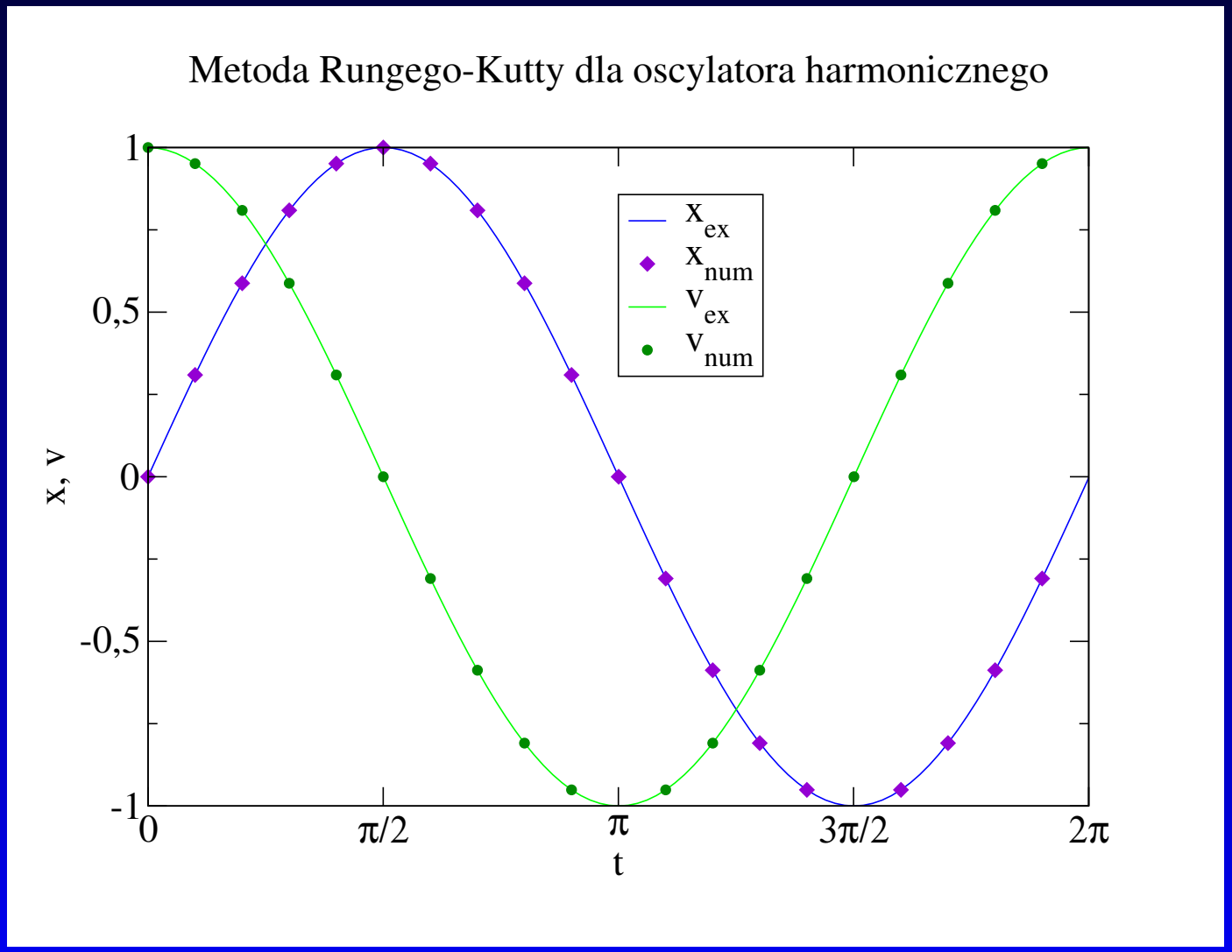
$$
\begin{aligned}
y(t+\tau) &= y(t) + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(\tau^5) \\
k_1 &= \tau g(y,t) \\
k_2 &= \tau g\left(y + \frac{k_1}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right) \\
k_3 &= \tau g\left(y + \frac{k_2}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right) \\
k_4 &= \tau g(y + k_3, t + \tau)
\end{aligned}
$$

Własności

- jeden punkt startowy uruchamia algorytm
- duża dokładność, ale czasami również duży nakład obliczeń

Metody Rungego–Kutty (6)

Przykład $\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -x, \quad x_0 = 0, \quad v_0 = 1$



Zasada Rungego (1)

$Y(t)$ - rozwiązanie dokładne

$y_{n+1}^{(1)}$ - rozwiązanie przybliżone uzyskane w dwóch krokach $\tau/2$

$y_{n+1}^{(2)}$ - rozwiązanie przybliżone uzyskane w jednym kroku τ

Przyjmijmy chwilowo, że y_n nie jest obarczone błędem, tzn. że

$$y_n = Y(t_n)$$

Zasada Rungego (2)

Jeżeli błąd metody przy przejściu od t_n do $t'_n = t_n + \tau/2$ oraz od t'_n do t_{n+1} jest prawie taki sam, to

$$Y_{n+1} - y^{(1)}_{n+1} \simeq 2\gamma_p \left(\frac{\tau}{2}\right)^{p+1},$$

gdzie p to rząd rozpatrywanej metody, a γ_p jest pewną stałą Podobnie

$$Y_{n+1} - y^{(2)}_{n+1} \simeq \gamma_p \tau^{p+1}$$

Eliminując γ_p z powyższych wzorów otrzymamy

$$Y_{n+1} - y^{(1)}_{n+1} \simeq \delta, \delta = \frac{1}{2^p - 1}(y^{(1)}_{n+1} - y^{(2)}_{n+1})$$

Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne (1)

Rozważmy zagadnienie początkowe

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = g(y,t), \;\; y(t_0) = y_0$$

Całkujemy obustronnie po czasie

$$\int_{t_n}^{t_{n+m}} \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t = \int_{t_n}^{t_{n+m}} g(y,t)\mathrm{d}t$$

co prowadzi do

$$y_{n+m} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+m}} g(y,t)\mathrm{d}t$$

Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne (2)

Załóżmy, że $m = 1$. Obliczając całkę za pomocą wzoru trapezów uzyskamy:

$$y_{n+1} \simeq y_n + \frac{\tau}{2}[g(y_n, t_n) + g(y_{n+1}, t_{n+1})], \quad \tau = t_{n+1} - t_n$$

$\Rightarrow$ szukana wielkość y_{n+1} występuje również po prawej stronie równania

$\Rightarrow$ po prawej stronie jako punktu startowego używamy przybliżenia wielkości y_{n+1} za pomocą algorytmu o małym nakładzie obliczeń, a następnie poprawiamy to przybliżenie iteracyjnie

Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne (3)

Ulepszony algorytm Eulera (najprostsza możliwość):

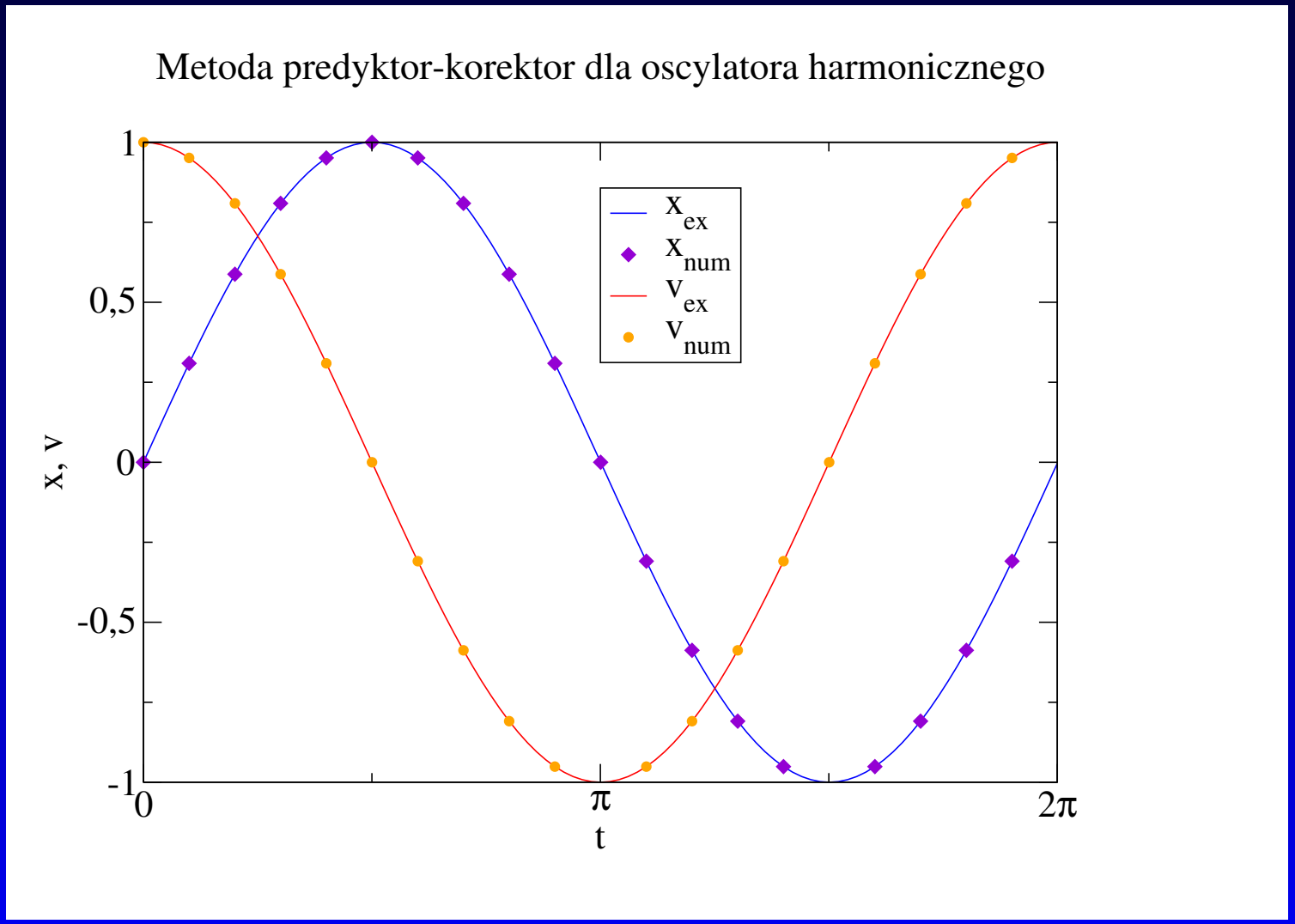
$$
\begin{aligned}
y_{n+1}^{(0)} &= y_n + \tau g(y_n, t_n) \\
y_{n+1}^{(1)} &= y_n + \frac{\tau}{2}\left[g(y_n, t_n) + g(y_{n+1}^{(0)}, t_{n+1})\right]
\end{aligned}
$$

Własności:

- algorytm prosty w implementacji
- dokładność większa niż w metodzie Eulera
- stabilność lepsza niż w metodzie Eulera

Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne (4)

Przykład $\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -x, \quad x_0 = 0, \quad v_0 = 1$



Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne (5)

t	$\epsilon = y(t_n) - y_n$	
	Runge–Kutta	predyktor–korektor
$0,0\pi$	0,00000000	0,00000000
$0,2\pi$	0,00000002	-0,00037400
$0,4\pi$	-0,00000001	-0,00053353
$0,6\pi$	-0,00000010	-0,00037358
$0,8\pi$	-0,00000017	0,00004466
$1,0\pi$	-0,00000018	0,00051731
$1,2\pi$	-0,00000009	0,00079229
$1,4\pi$	0,00000003	0,00069294
$1,6\pi$	0,00000036	0,00021333
$1,8\pi$	0,00000067	-0,00046323
$2,0\pi$	0,00000046	-0,00103459

Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne (6)

Podstawmy predyktor do korektora,

$$y_{n+1}^{(1)} = y_n + \frac{\tau}{2} g(y_n, t_n) + \frac{\tau}{2} g(y_n + \tau g(y_n, t_n), t_n)$$

Ostatni wyraz rozwijamy w szereg Taylora

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(1)} &= y_n + \frac{\tau}{2} g(y_n, t_n) + \\ &\quad \frac{\tau}{2} \left[g(y_n, t_n) + g_t(y_n, t_n)\tau + g_y(y_n, t_n) g(y_n, t_n)\tau + O(\tau^2) \right] \\ &= y_n + g(y_n, t_n)\tau + \frac{\tau^2}{2} \left[g_t(y_n, t_n) + g_y(y_n, t_n) g(y_n, t_n) \right] + O(\tau^3) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ rząd metody jest co najmniej $O(\tau^3)$