Metody numeryczne II

Równania różniczkowe zwyczajne, część I

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Konsultacje

poniedziałek	$16^{00} - 18^{00}$
pokój	514

Plan wykładu

1. Równania różniczkowe zwyczajne
2. Równania różniczkowe cząstkowe
3. Równania całkowe
4. Analiza widmowa
5. Poszukiwanie minimów i maksimów funkcji

Literatura

1. Å. Björck, G. Dahlquist, „Metody numeryczne”
2. T. Pang, „Metody obliczeniowe w fizyce”
3. D. Potter, „Metody obliczeniowe fizyki”
4. J. Stoer, „Wstęp do metod numerycznych. T. I”
   J. Stoer, R. Bulirsch, „Wstęp do metod numerycznych. T. II”
5. W. H. Press, S. A. Teutolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, „Numerical Recipes in . . .”

Równania różniczkowe zwyczajne

1. Zagadnienia początkowe
   - Metoda Eulera
   - Metody Rungego–Kutty
   - Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne
2. Zagadnienia brzegowe
3. Zagadnienia własne

Zagadnienia początkowe

Niech

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

Szukamy rozwiązań układu równań

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

Twierdzenie 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

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

$$Y(t) \in \mathbb{C}^2(\langle t_0, b\rangle) \quad \text{-} \quad \text{rozwiązanie dokładne}$$
$$\epsilon_n = Y_n - y_n \quad \text{-} \quad \text{błąd rozwiązania}$$

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

Zachodzi

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

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:

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

Stąd

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

Zapiszmy ostatnią nierówność w postaci

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

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

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

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

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

⇒ metoda jest rzędu $O(\tau)$

⇒ dla uzyskania sensownej dokładności trzeba wybierać bardzo małą długość kroku τ

Przykład Rozważmy następujące zagadnienie początkowe:

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

Rozwiązanie dokładne:

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

Metoda Eulera daje wzór

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

gdzie h to długość kroku na osi x

$h = 0,2$				$h = 0,1$			
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

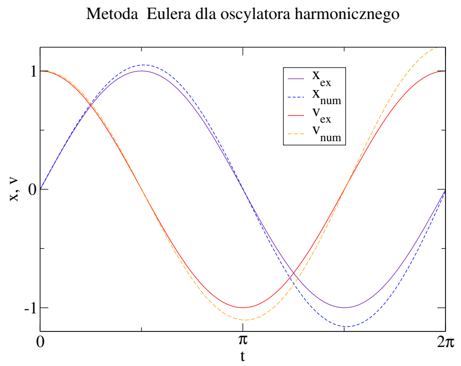
Przykład

Jednowymiarowy oscylator harmoniczny

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

z warunkami początkowymi

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



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:

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

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 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

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

Przykład

Rozważmy równanie

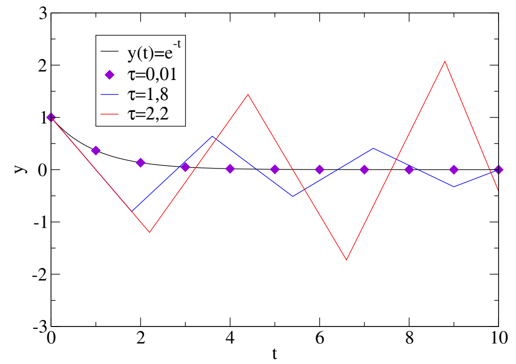
$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = -y, \quad y(0) = 1$$

Rozwiązanie analityczne:

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

Chcemy rozwiązać zagadnienie początkowe metodą Eulera.
Dopuszczalna długość kroku:

$$\tau \leq 2$$



Metody Rungego–Kutty

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,

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

przy czym

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

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

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

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:

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

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

Klasyczny wzór czwartego rzędu

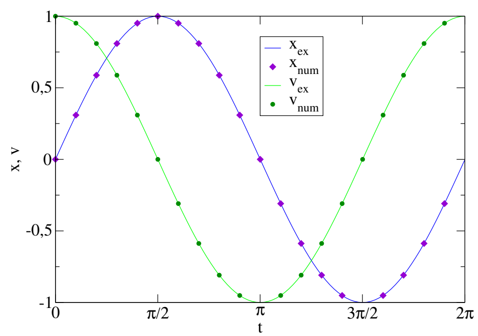
$$\begin{aligned} y(t+\tau) &= y(t) + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(\tau^5) \\ k_1 &= \tau g(y,t) \\ k_2 &= \tau g\left(y + \frac{k_1}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right) \\ k_3 &= \tau g\left(y + \frac{k_2}{2}, t + \frac{\tau}{2}\right) \\ k_4 &= \tau g(y + k_3, t + \tau) \end{aligned}$$

Własności

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

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

Metoda Rungego-Kutty dla oscylatora harmonicznego



Zasada Rungego

$Y(t)$ - 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

$$y_n = Y(t_n)$$

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

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

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

Podobnie

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

Eliminując γ_p z powyższych wzorów otrzymamy

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

Metody ekstrapolacyjno–interpolacyjne

Rozważmy zagadnienie początkowe

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

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

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

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

Ulepszony algorytm Eulera (najprostsza możliwość):

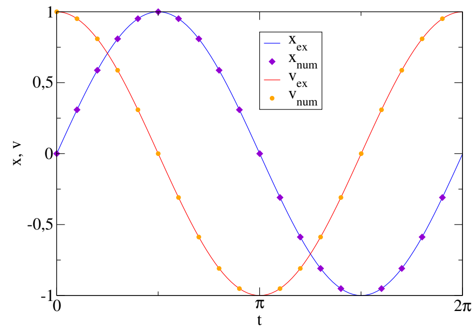
$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n + \tau g(y_n, t_n) \\ y_{n+1}^{(1)} &= y_n + \frac{\tau}{2}\left[g(y_n, t_n) + g(y_{n+1}^{(0)}, t_{n+1})\right] \end{aligned}$$

Własności:

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

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

Metoda predyktor-korektor dla oscylatora harmonicznego



t	$\epsilon = y(t_n) - y_n$	
	Runge–Kutta $O(\tau^4)$	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

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 $O(\tau^3)$