Metody komputerowe w równaniach różniczkowych

część 1: Równania różniczkowe zwyczajne

dr inż. Łukasz Błaszczyk

Wydział Matematyki i Nauk Informacyjnych
Politechnika Warszawska

rok akademicki 2018/2019 (semestr zimowy)

Co już wiemy?

Na *Równaniach różniczkowych zwyczajnych*:

- metody badania istnienia i jednoznaczności,
- metody rozwiązywania niektórych typów równań,
- zachowanie się rozwiązań w zależności od parametrów.

Po co nam są metody numeryczne?

Większości równań zwyczajnych **nie da się** rozwiązać analitycznie, tzn. nie da się zapisać rozwiązania za pomocą znanych funkcji.

Motywacja podjęcia się tematu

Przykład 1.

Równanie

$$x'(t) = \sin(t) - x(t), \qquad t \in \mathbb{R},$$

ma rozwiązanie ogólne

$$x(t) = A\mathrm{e}^{-t} + \frac{1}{2}\sin(t) - \frac{1}{2}\cos(t), \qquad A \in \mathbb{R}.$$

Motywacja podjęcia się tematu

Przykład 2.

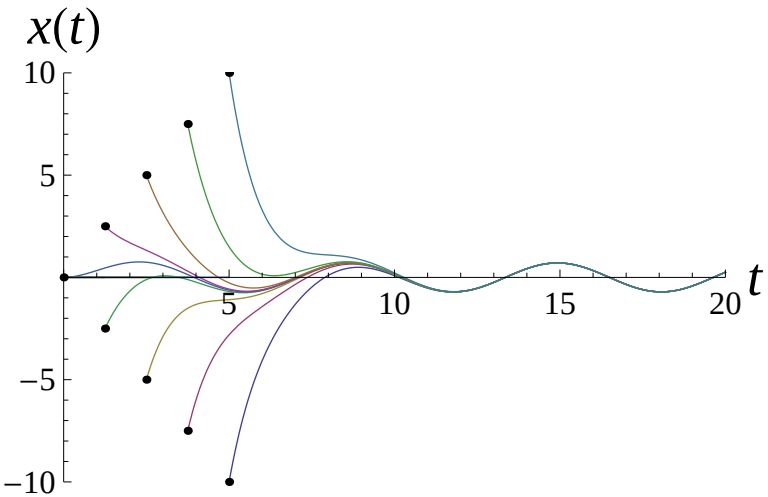
Z drugiej strony (bardzo podobne) równanie

$$x'(t) = \sin(t) - \frac{1}{10}x^3(t), \qquad t \in \mathbb{R},$$

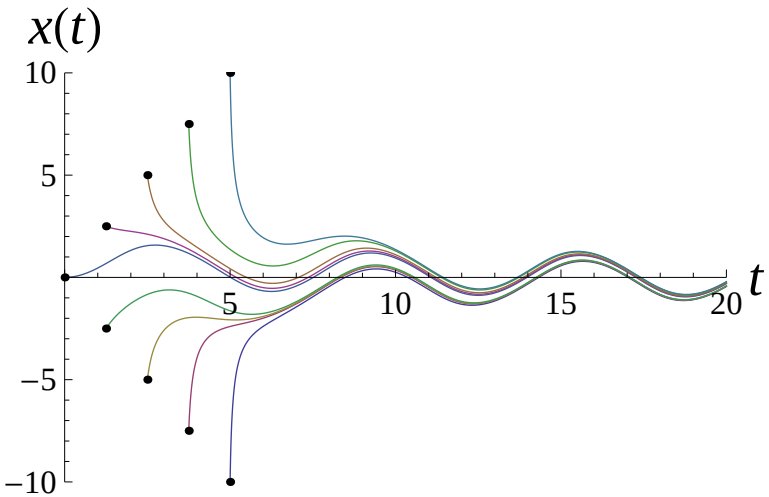
ma rozwiązania, których nie da się zapisać za pomocą znanych formuł.

Co więcej: rozwiązania obu równań dla tych samych warunków początkowych zachowują się bardzo podobnie.

Motywacja podjęcia się tematu



$$x'(t) = \sin(t) - x(t)$$



$$x'(t) = \sin(t) - \frac{1}{10}x^3(t)$$

Co już wiemy?

Na *Równaniach różniczkowych zwyczajnych*:

- metody badania istnienia i jednoznaczności,
- metody rozwiązywania niektórych typów równań,
- zachowanie się rozwiązań w zależności od parametrów.

Pytanie prowokacyjne: Skoro metody numeryczne radzą sobie z większą klasą problemów, to po co zajmować się wymienionymi wcześniej zagadnieniami teoretycznymi?

Większości równań zwyczajnych **nie da się** rozwiązać analitycznie, więc musimy mieć narzędzia sprawdzające, czy znalezione numeryczne przybliżenie ma sens (czy problem ma w ogóle rozwiązanie).

Co już wiemy?

Na *Równaniach różniczkowych zwyczajnych*:

- metody badania istnienia i jednoznaczności,
- metody rozwiązywania niektórych typów równań,
- zachowanie się rozwiązań w zależności od parametrów.

Pytanie prowokacyjne: Skoro metody numeryczne radzą sobie z większą klasą problemów, to po co zajmować się wymienionymi wcześniej zagadnieniami teoretycznymi?

Niektóre zagadnienia mają **nieskończenie wiele rozwiązań**, skąd zatem mieć pewność, że metoda numeryczna przybliża to *właściwe*?

Motywacja podjęcia się tematu

Przykład 3.

Zagadnienie

$$x'(t) = 3x^{2/3}(t), \qquad t \in \mathbb{R}_+, \qquad x(0) = 0,$$

ma nieskończenie wiele rozwiązań:

$$x(t) = \begin{cases} (t - t_0)^3, & \text{gdy } t \geqslant t_0, \\ 0, & \text{gdy } t < t_0, \end{cases} \qquad t_0 \geqslant 0,$$

a także $x(t) = 0$. Metoda numeryczna da tylko jedno z nich...

Czym się zajmiemy?

Rozważamy równania różniczkowe zwyczajne **pierwszego rzędu**:

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)), \qquad t > t_0,$$

gdzie $\mathbf{x}$ może być funkcją wektorową lub skalarną.

Uwaga (notacja).

W przypadku skalarnym będziemy pisać $x'(t) = f(t, x(t))$.

Uwaga (przypomnienie).

Każde równanie różniczkowe zwyczajne da się sprowadzić do układu równań różniczkowych zwyczajnych pierwszego rzędu.

Czym się zajmiemy?

Technikami omawianymi na tym przedmiocie **nie da się** przybliżać rozwiązań ogólnych. Do równania różniczkowego zawsze będziemy dodawać **warunek początkowy**:

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0.$$

Zakładamy ponadto, że rozwiązania szukamy w **skończonym** przedziale czasu:

$$t_0 \leqslant t \leqslant t_K, \qquad t_0 < t_K < +\infty$$

(nawet jeśli rozwiązanie istnieje dla wszystkich $t > t_0$).

Omawiane metody

Zajmiemy się dwiema klasami metod:

- *liniowymi metodami wielokrokowymi*,
- *metodami Runge-Kutty*.

Każda z tych metod jest uogólnieniem *metody Eulera*.

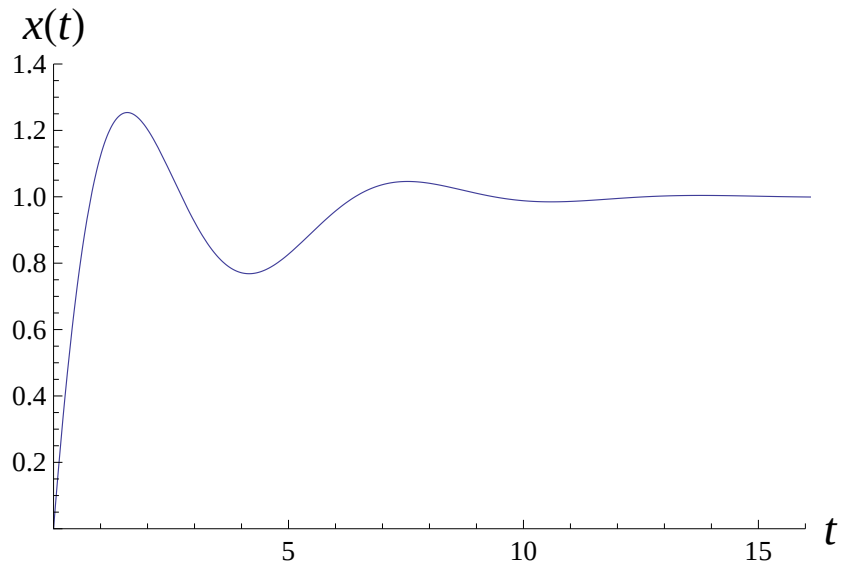
Uwaga.

Nie przybliżamy krzywej $t \mapsto \mathbf{x}(t)$, ale (*zazwyczaj*) ciąg wartości

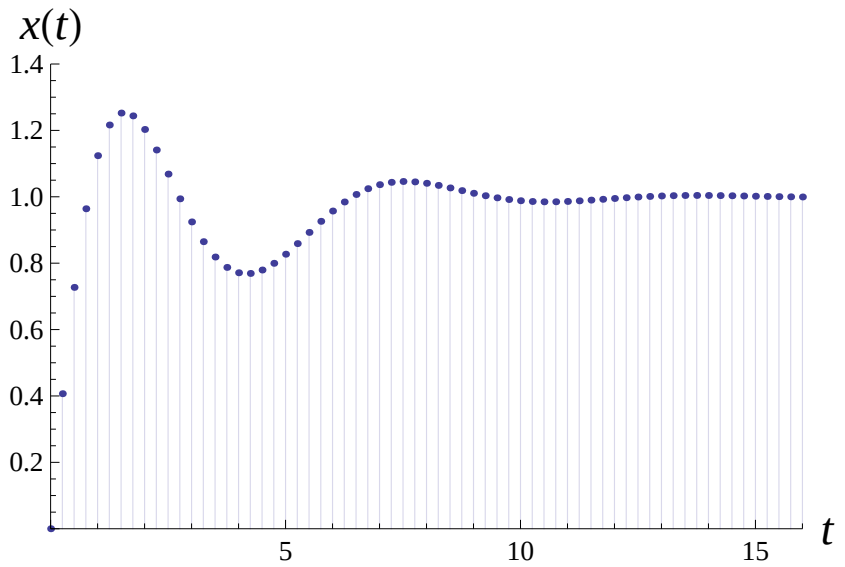
$$\mathbf{x}(t_0),\ \mathbf{x}(t_0+h),\ \mathbf{x}(t_0+2h),\ \ldots,\ \mathbf{x}(t_0+nh),\ \ldots,$$

gdzie $h > 0$ jest tzw. **wielkością siatki** lub **długością kroku**.

Omawiane metody



NIE



TAK

Omawiane metody

Uwaga (dlaczego *zazwyczaj*?) #1.

W ogólności można rozważać siatki nierównomierne, tzn.

$$t_0 < t_1 < t_2 < \ldots < t_n < \ldots,$$

a wówczas długość kroku będzie się zmieniać w czasie:

$$h_n := t_n - t_{n-1}, \quad n = 1, 2, \ldots.$$

Będziemy zajmować się głównie metodami **stałokrokowymi**, dla których $h_n =: h = \text{const}$.

Omawiane metody

Uwaga (dlaczego *zazwyczaj*?) #2.

Niektóre twierdzenia (o oszacowaniach błędu przybliżenia) będą wymuszały stworzenie pewnych krzywych, które przechodzą przez punkty naszego przybliżenia.

W najprostszym przypadku będą to po prostu łamane łączące punkty przybliżenia.

Omawiane metody

Pytanie.

Wydaje się (i słusznie), że metody stałokrokowe łatwiej będzie zaimplementować.

Do czego w takim razie mogą przydać się metody ze zmienną długością kroku?

Konkretne przykłady na laboratorium (na ostatnich zajęciach z RRZ).

Notacja – przypomnienie z Algebry liniowej

Przypomnijmy **normy** wektorowe i macierzowe :

dla wektorów $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_N)^T \in \mathbb{R}^n$ definiujemy:

$$\|\mathbf{x}\|_p = \begin{cases} \left(\sum_{i=1}^{N} |x_i|^p \right)^{1/p}, & \text{dla } p \in [1, \infty), \\ \max_{i=1,\ldots,N} |x_i|, & \text{dla } p = \infty \end{cases}$$

(dla dowolnego $p \in [1, \infty]$ jest to norma, nazywana też **normą** ℓ_p).

Większość przedstawionych wyników jest prawdziwa dla dowolnej normy ℓ_p, dlatego będziemy wówczas pisać po prostu $\|\cdot\|$.

Notacja – przypomnienie z Algebry liniowej

Przypomnijmy **normy** wektorowe i macierzowe :

dla macierzy $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ definiujemy:

$$\|\mathbf{A}\|_{p \to q} = \sup_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_q}{\|\mathbf{x}\|_p} = \sup_{\|\mathbf{x}\|_p = 1} \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_q$$

(jest to najmniejsza liczba taka, że $\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_q \leqslant \|\mathbf{A}\|_{p \to q} \cdot \|\mathbf{x}\|_p$).

Tak jak wcześniej, jeśli wyniki będą prawdziwe dla dowolnych p i q, to będziemy pisać po prostu $\|\mathbf{A}\|$.

Dla $p = q = 2$ mamy $\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\text{największa wartość własna } \mathbf{A}^T\mathbf{A}}$.

Notacja – przypomnienie z Analizy 1

Przypomnijmy tzw. **notację Landaua** (czyli *notację dużego* $\mathcal{O}$):

mówimy, że $z = \mathcal{O}(h^p)$ (*jest co najwyżej rzędu* $\mathcal{O}(h^p)$) dla pewnego $p \in \mathbb{Z}_+$, jeśli istnieją dodatnie stałe h_0 i C takie, że

$$|z| \leqslant Ch^p \quad \text{dla} \quad 0 < h < h_0$$

(w przypadku wielowymiarowym zamiast $|\cdot|$ należy wpisać $\|\cdot\|$).

Wynika stąd, że $z \to 0$, gdy $h \to 0$ i **rząd zbieżności** jest równy p. Wprowadzamy tę notację, jeśli bardziej interesuje nas informacja o p, a nie o C. Będziemy czasem mówić, że z jest p-tego rzędu.

Wzór Taylora – przypomnienie z Analizy 1

Notacja dużego $\mathcal{O}$ pojawiła się w kontekście *wzoru Taylora*.

Przykład 4 (wniosek ze wzoru Taylora).

Stosując wzór Maclaurina do funkcji $f(h) = \mathrm{e}^h$ otrzymamy

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^h &= 1 + \mathcal{O}(h) \\ &= 1 + h + \mathcal{O}(h^2) \\ &= 1 + h + \frac{1}{2!}h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ &= \dots \end{aligned}$$

Założenia na resztę wykładu

Notację dużego $\mathcal{O}$ stosujemy, żeby porównywać tempo zbieżności – wyrazy rzędu $\mathcal{O}(h^3)$ zbiegają szybciej do zera niż rzędu $\mathcal{O}(h^2)$.

Założenie.

Rozwiązanie RRZ (czyli $t \mapsto \mathbf{x}(t)$) jest odpowiednio gładkie, tzn. ma tak wiele ciągłych pochodnych na (t_0, t_K) jak potrzebujemy.

Dzięki czemu będziemy mogli skorzystać ze wzoru Taylora tak wysokiego rzędu jak chcemy.

Wzór Taylora (znowu)

Rozpoczniemy od przypadku skalarnego i rozwinięcia rozwiązania x wyjściowego równania ze wzoru Taylora wokół punktu t:

$$x(t+h) = x(t) + h \cdot x'(t) + R_1(h;t),$$

gdzie resztę R_1 będziemy nazywać **lokalnym błędem obcięcia** (ang. *local truncation error* – LTE).

Jeśli x jest 2-krotnie różniczkowalna na (t_0, t_K), to możemy zapisać

$$R_1(h;t) = \frac{1}{2!}h^2 x''(\xi), \quad \xi \in (t, t+h).$$

Wzór Taylora (znowu)

Załóżmy, że $\exists_{M>0} \forall_{\xi \in (t_0,t_1)} \ |x''(\xi)| \leqslant M$, wówczas:

$$|R_1(h;t)| \leqslant \frac{1}{2} M h^2,$$

czyli $R_1(h;t) = \mathcal{O}(h^2)$.

Inne uzasadnienie:
Wiemy z Tw. o wzorze Taylora (z resztą w postaci Peano), że jeśli x ma pochodne $x', \ldots, x^{(m-1)}$ wokół t oraz istnieje $x^{(m)}(t)$, to

$$x(t+h) = \sum_{k=1}^{m} \frac{x^{(k)}(t)}{k!} h^k + o(h^m),$$

a stąd automatycznie (biorąc $m = 1$) otrzymujemy to, co wcześniej.

Wyprowadzenie metody Eulera

Mamy zatem

$$x(t+h) = x(t) + hx'(t) + \mathcal{O}(h^2),$$

co po wstawieniu równania $x'(t) = f(t, x(t))$ daje

$$x(t+h) = x(t) + hf(t, x(t)) + \mathcal{O}(h^2).$$

Wprowadźmy punkty siatki $t = t_n$, gdzie $t_n = t_0 + nh$, $n = 1, \ldots, N$, a $N = \lfloor \frac{t_K - t_0}{h} \rfloor$ jest liczbą kroków o długości h potrzebnych by dotrzeć (ale nie przekroczyć) do czasu $t = t_K$.

Wyprowadzenie metody Eulera

Stąd dla $t = t_n$ $(n < N)$ mamy

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hf(t_n, x(t_n)) + \mathcal{O}(h^2), \quad n = 0, \ldots, N-1,$$

oraz $x(t_0) = x_0$.

Dla odpowiednio małego h ostatni wyraz może być dowolnie mały, a pomijając go otrzymujemy **metodę Eulera**:

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n), \quad n = 0, \ldots, N-1,$$

gdzie x_n jest przybliżeniem numerycznym wartości $x(t_n)$.

Interpretacja geometryczna

Metoda Eulera (w przypadku wielowymiarowym):

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{x}_n), \quad n = 0, \ldots, N-1,$$

Co opisuje (dla ustalonego punktu $(t_n, \mathbf{x}_n)$) powyższe równanie?

Mając dany punkt $(t_n, \mathbf{x}_n)$ prowadzimy z niego odcinek *styczny do rozwiązania* przechodzącego przez ten punkt:

$$\tau \mapsto (t_n + \tau,\ \mathbf{x}_n + \tau\mathbf{f}(t_n, \mathbf{x}_n)), \quad \tau \in (0, h).$$

Interpretacja geometryczna

Przykład 5.

Rozważamy równanie

$$x'(t) = (1 - 2t)x(t), \quad t > 0,$$

z warunkiem $x(0) = 1$, a rozwiązania szukamy dla $0 \leqslant t \leqslant 3$.

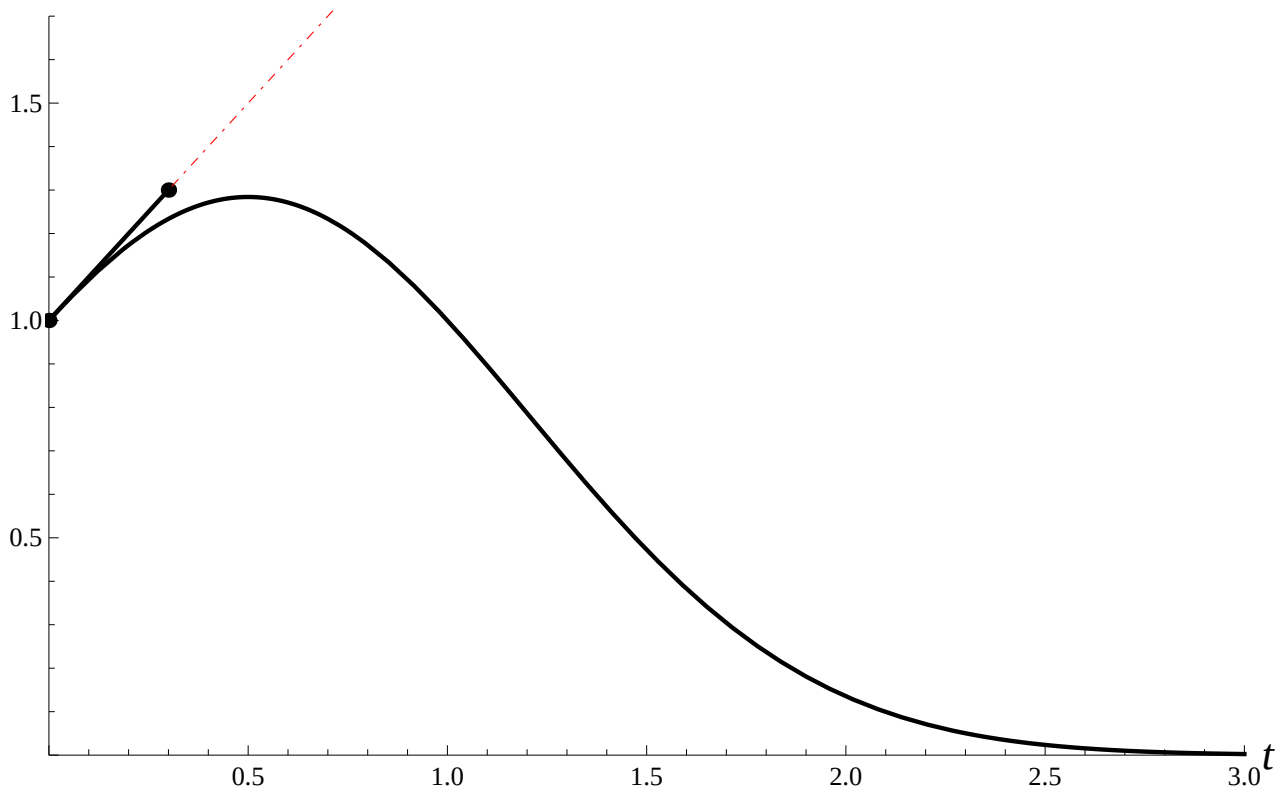
Zagadnienie to ma znane rozwiązanie:

$$x(t) = \exp\left(\frac{1}{4} - \left(\frac{1}{2} - t\right)^2\right),$$

co pozwala nam ocenić poziom dokładności przybliżenia.

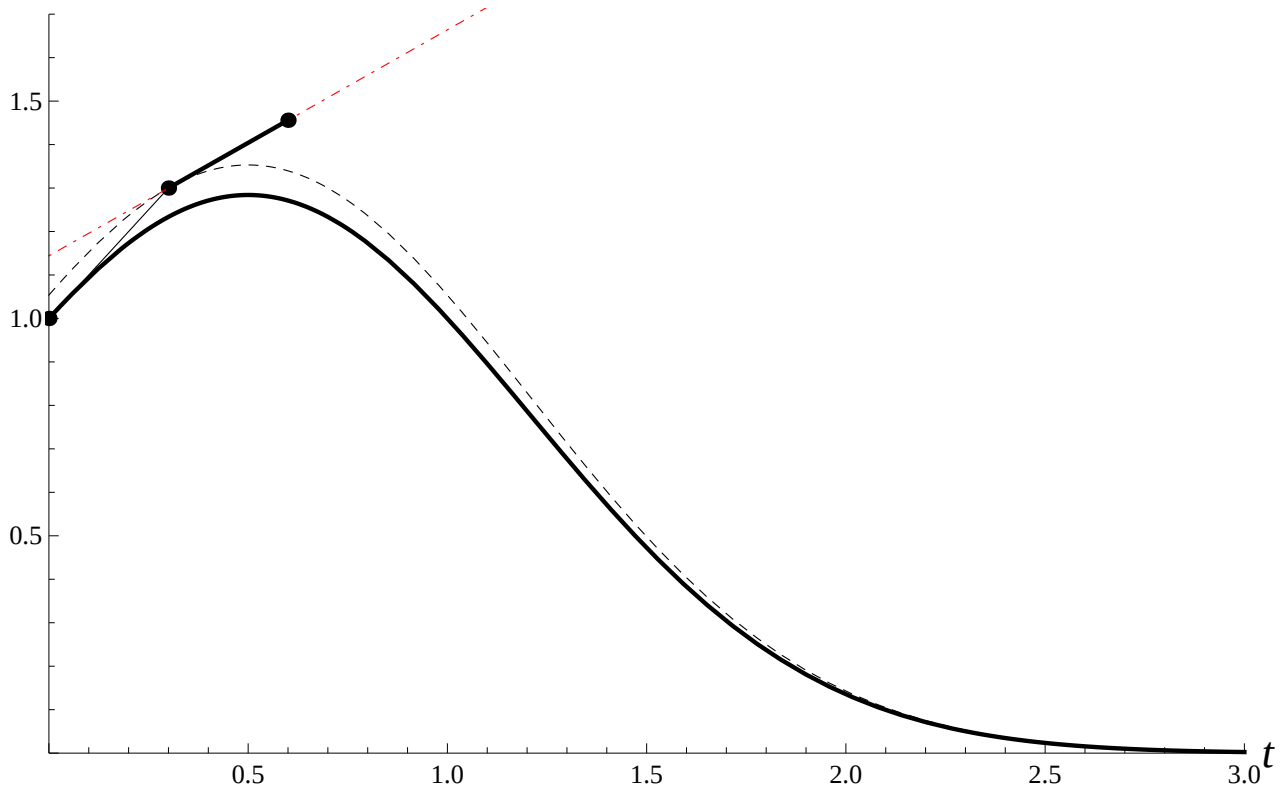
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



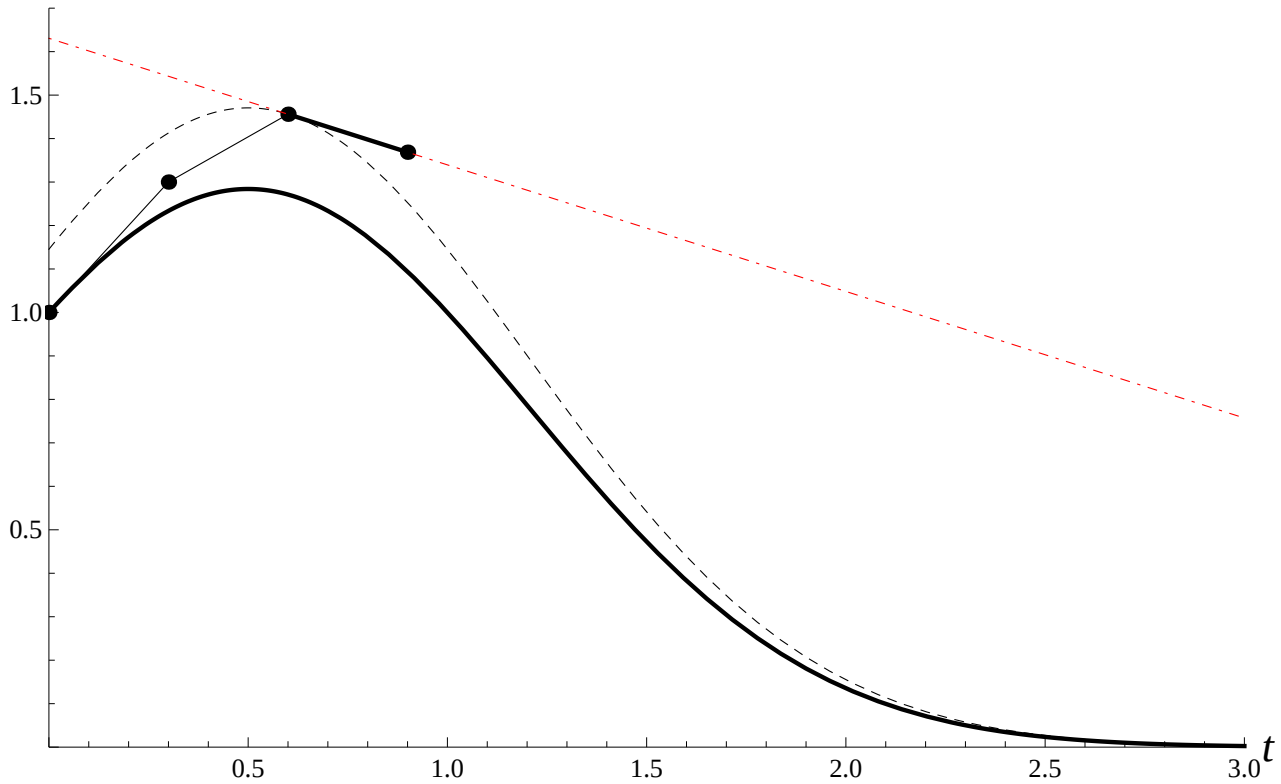
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



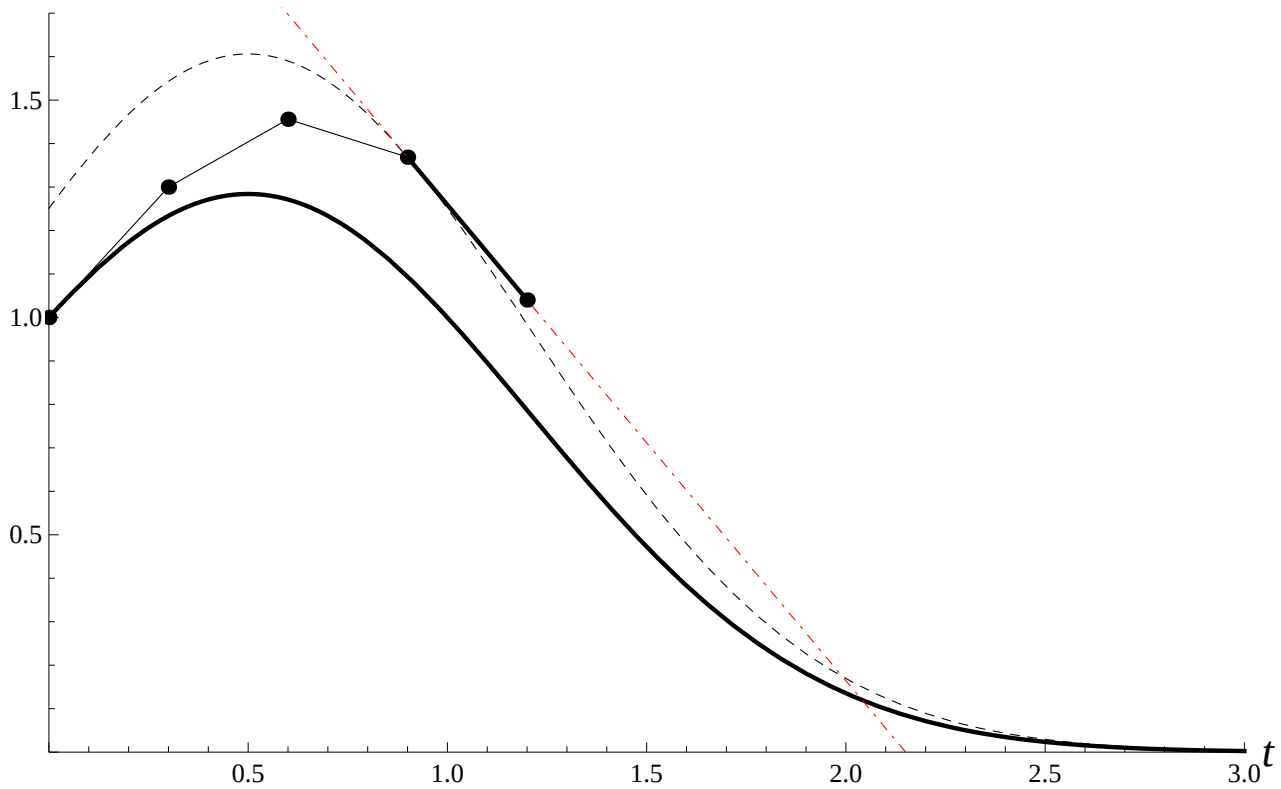
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



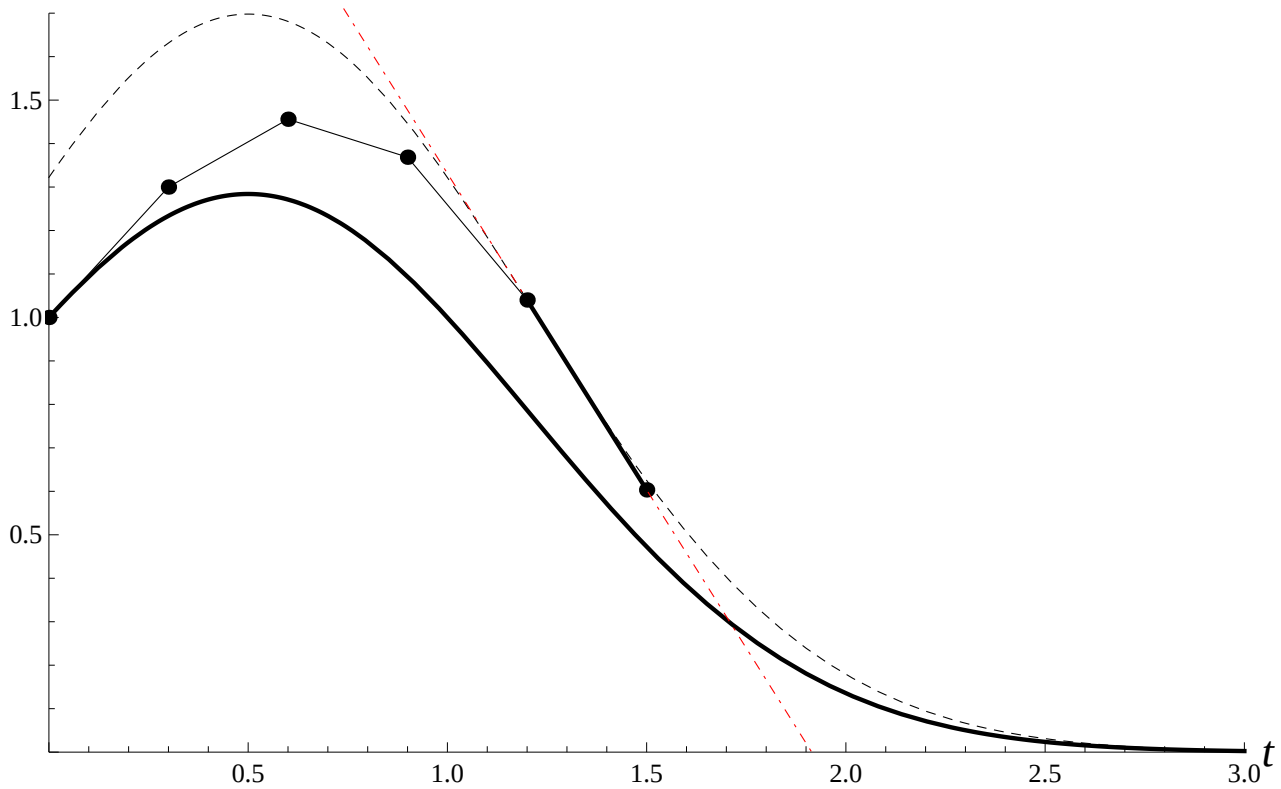
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



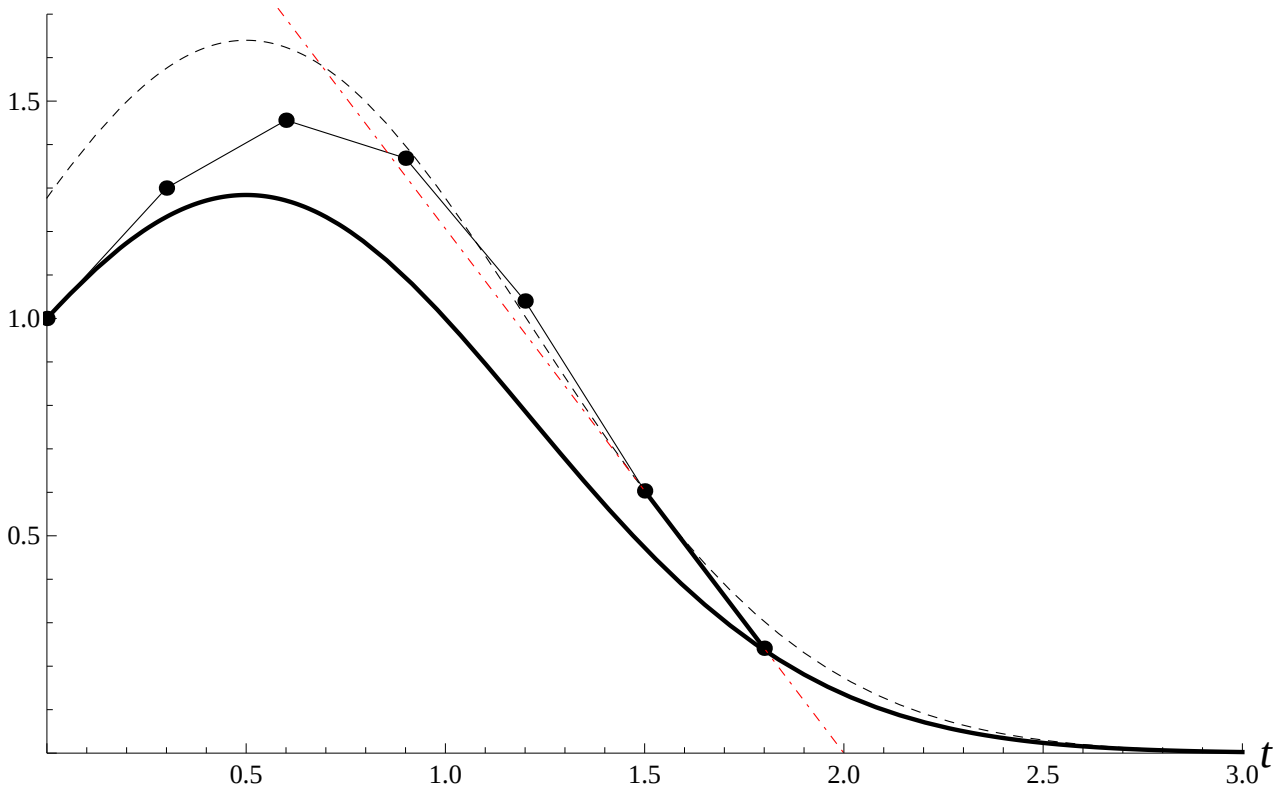
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



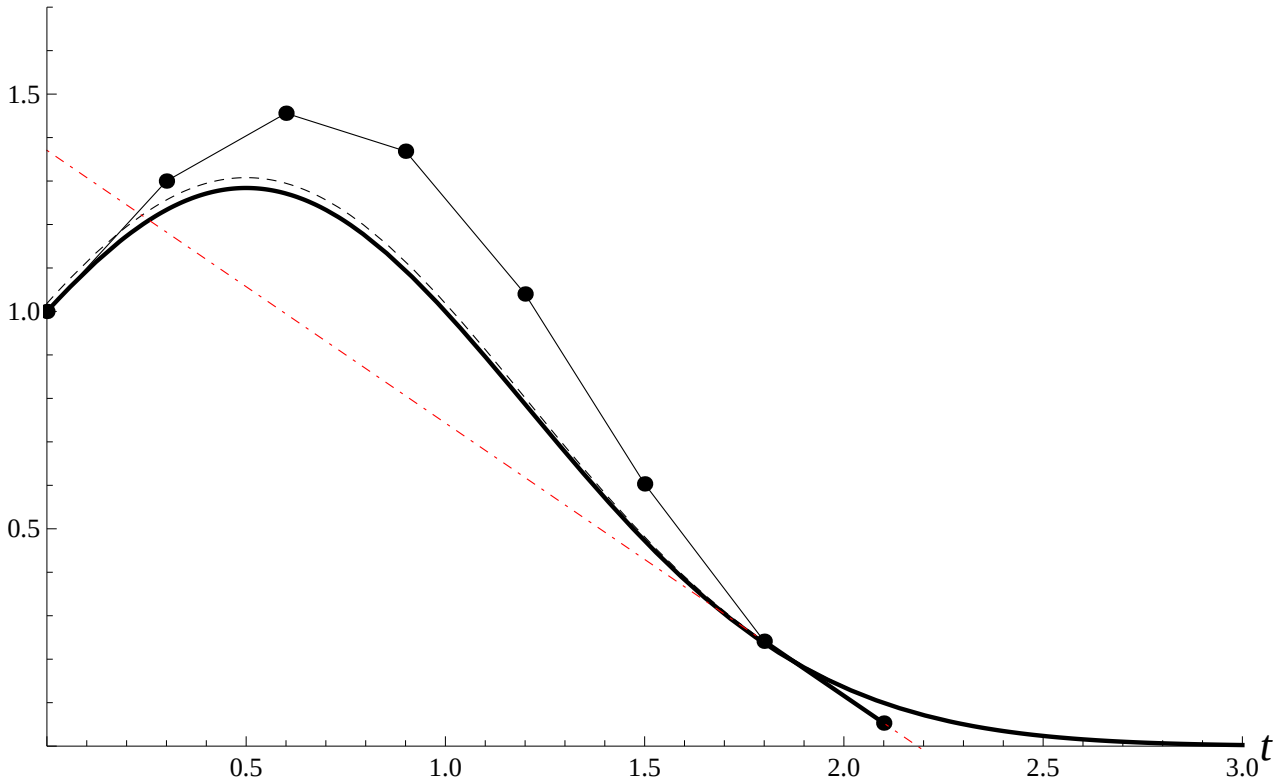
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



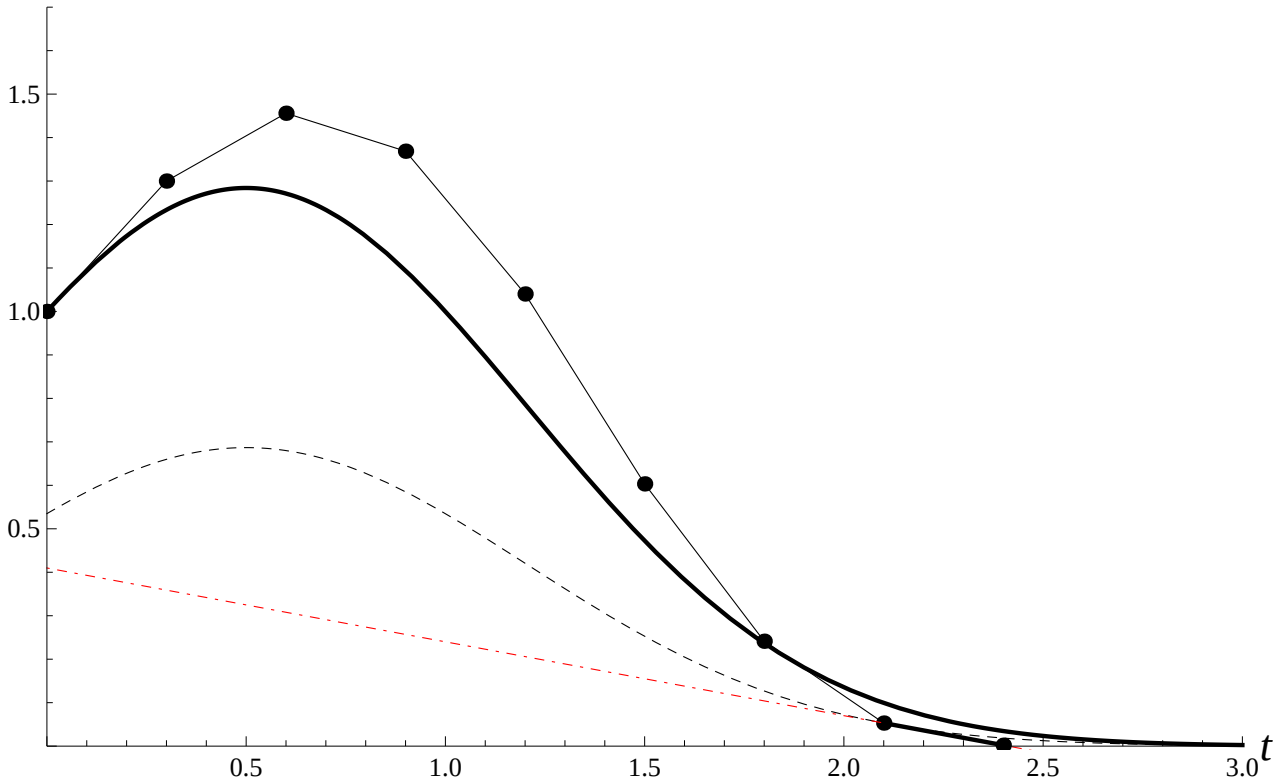
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



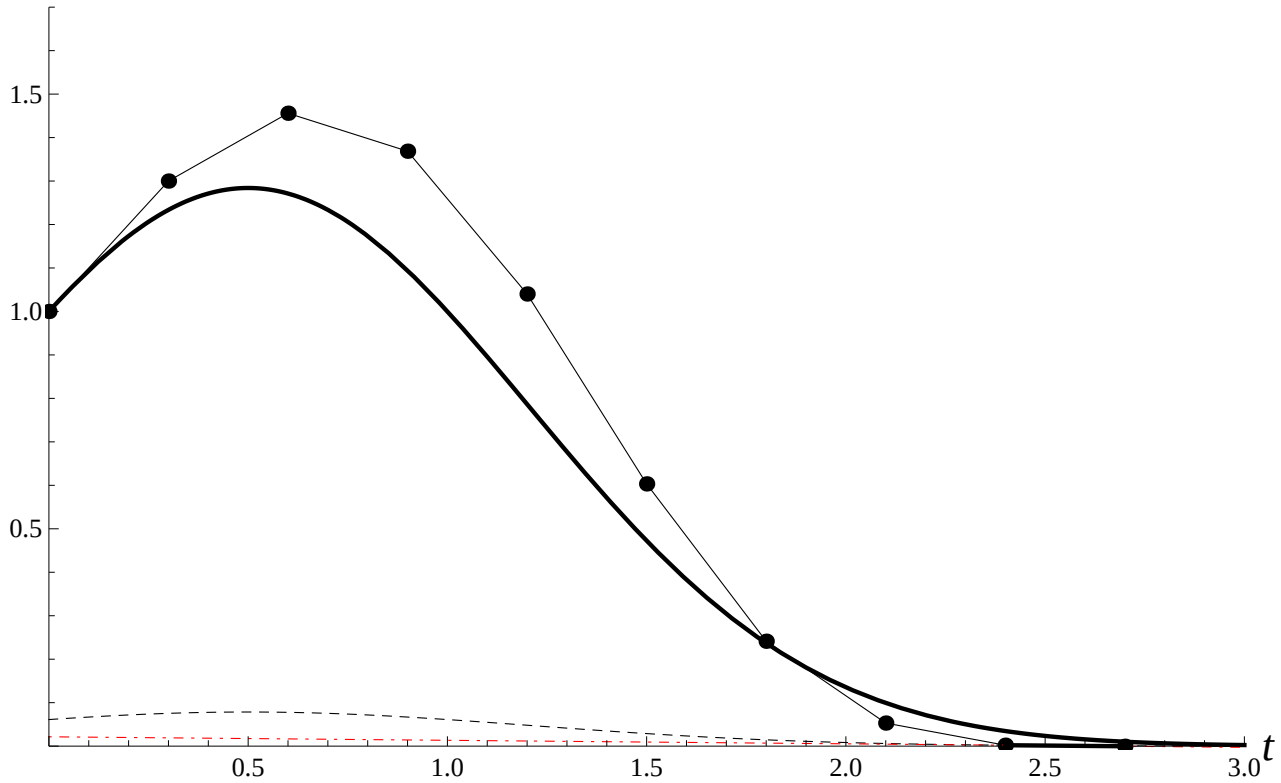
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



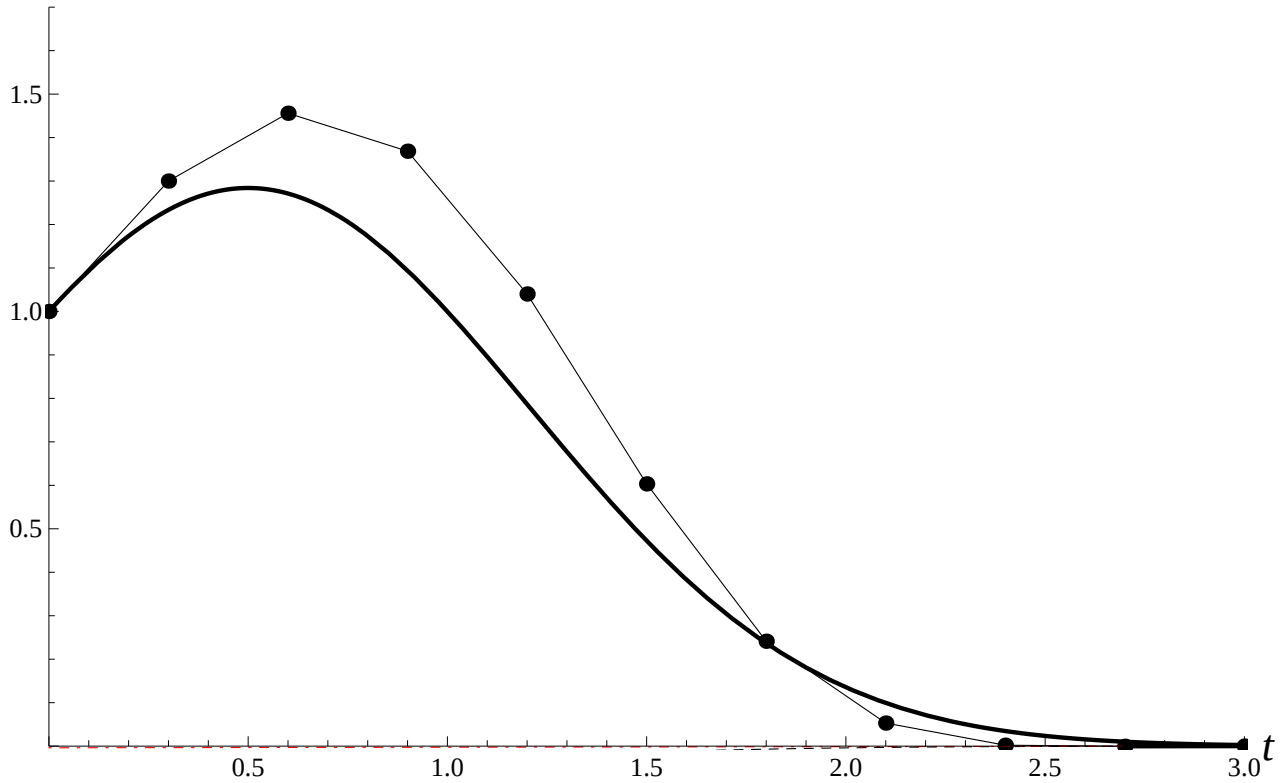
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



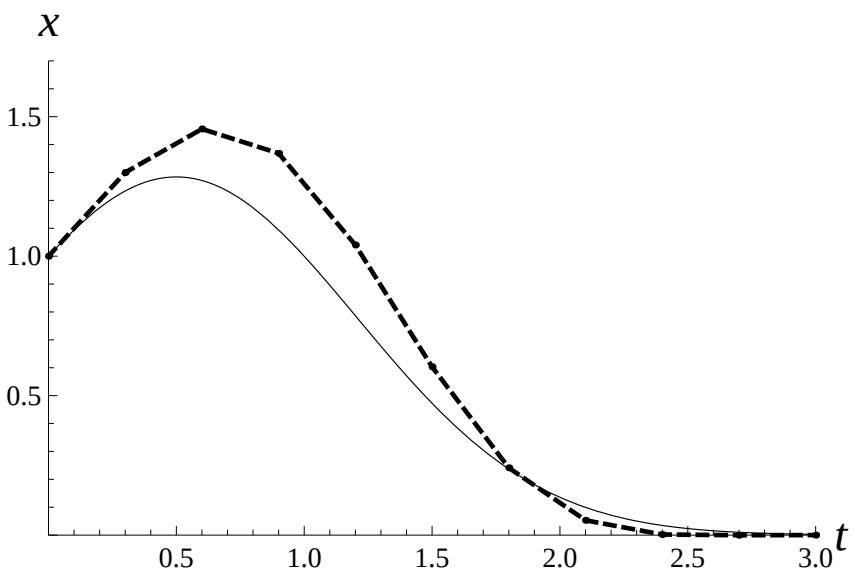
Interpretacja geometryczna

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



Zbieżność?

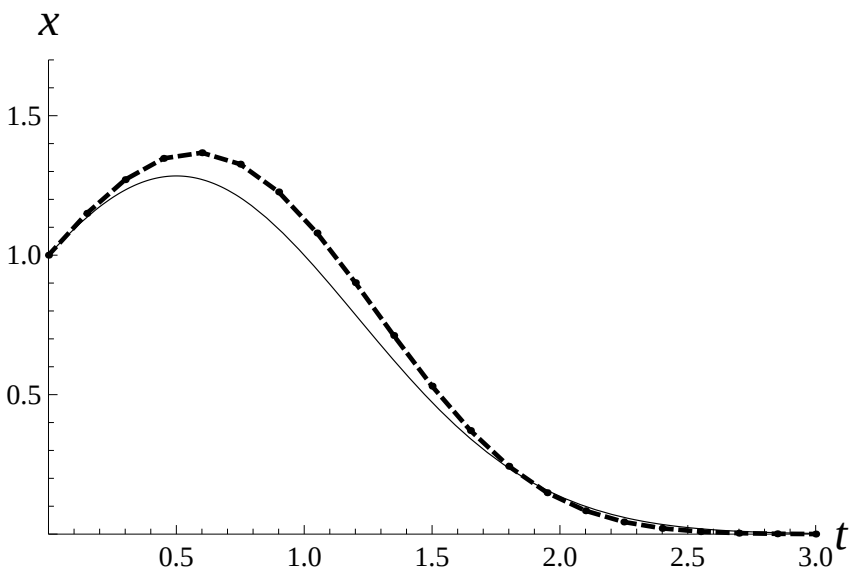
Otrzymane przybliżenie jest dość zgrubne.



Dla przypomnienia: $h = 0{,}3$.

Zbieżność?

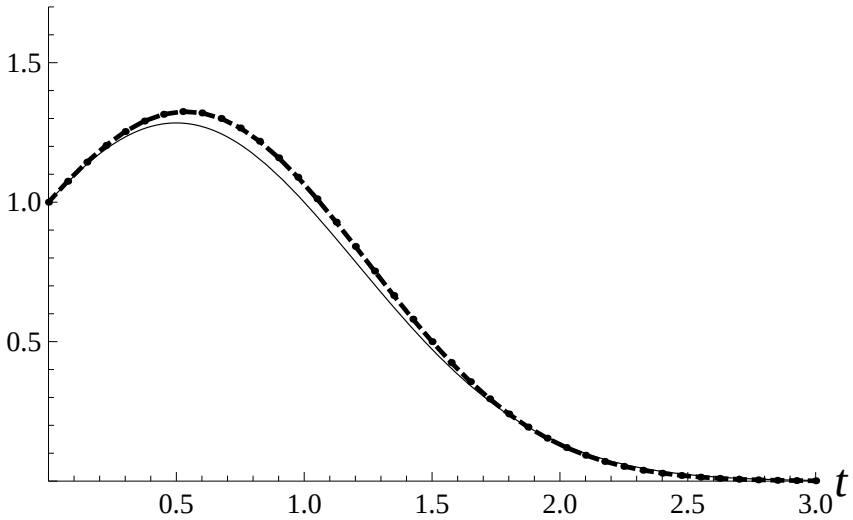
Co się stanie, jeśli zmniejszymy długość kroku siatki?



Teraz: $h = 0{,}15$.

Zbieżność?

Co się stanie, jeśli zmniejszymy długość kroku siatki?



Teraz: $h = 0{,}075$.

Błąd globalny rozwiązania i rząd zbieżności

Warto zwrócić uwagę jak zmienia się błąd rozwiązania (**błąd globalny**: $e_n = |x(t_n) - x_n|$) w pewnych charakterystycznych punktach dla wszystkich tych przybliżeń.

h	x_n $(t_n = 0{,}9)$	błąd glob.	x_n $(t_n = 1{,}5)$	błąd glob.
$0{,}3$	$x_3 \approx 1{,}367$	$e_3 \approx 0{,}274$	$x_5 \approx 0{,}603$	$e_5 \approx 0{,}131$
$0{,}15$	$x_6 \approx 1{,}227$	$e_6 \approx 0{,}133$	$x_{10} \approx 0{,}531$	$e_{10} \approx 0{,}058$
$0{,}075$	$x_{12} \approx 1{,}159$	$e_{12} \approx 0{,}065$	$x_{20} \approx 0{,}500$	$e_{20} \approx 0{,}028$
	$x(0{,}9) \approx 1{,}094$	(dokładne)	$x(1{,}5) \approx 0{,}472$	(dokładne)

Czy daje się zauważyć jakąś zależność?

Błąd globalny rozwiązania i rząd zbieżności

Wyprowadzając metodę Eulera otrzymaliśmy:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hf(t_n, x(t_n)) + \mathcal{O}(h^2), \quad n = 0, \ldots, N-1$$

(w przypadku skalarnym).

Zmniejszając krok siatki *dwukrotnie* błąd globalny również zmniejsza się (co do modułu) *dwukrotnie* (około). Sugeruje to, że błąd globalny tej metody jest proporcjonalny do h (a sama metoda jest zbieżna).

Spróbujemy to sformalizować.

Sformalizowanie dotychczasowych rozważań

Definicja 1.

Rozw. numeryczne $\mathbf{x}_n$ **zbiega** do rozwiązania $\mathbf{x}$ zag. początkowego

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)), \quad t > 0, \qquad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0,$$

w punkcie $t = t^*$, jeśli $\mathbf{e}_n = \mathbf{x}(t_n) - \mathbf{x}_n$ w punkcie $t_n = t^*$ spełnia

$$\|\mathbf{e}_n\| \xrightarrow{h \to 0} 0$$

(czyli dla $n \to \infty$ i $nh = t_n = t^*$).

Zbieżność jest rzędu p, jeśli $\mathbf{e}_n = \mathcal{O}(h^p)$ dla pewnego $p \in \mathbb{Z}_+$ (przyjmujemy, że rzędem metody jest największe takie p).

Sformalizowanie dotychczasowych rozważań

Mówimy, że metoda rozwiązywania jest zbieżna (rzędu p), jeśli dla dowolnego zagadnienia

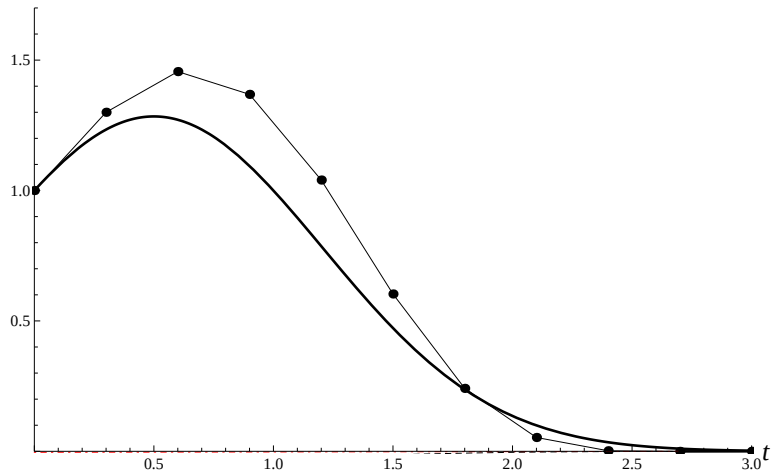
$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)), \quad t > 0, \qquad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0,$$

(spełniającego właściwe założenia) rozwiązanie numeryczne otrzymane tą metodą zbiega (z rzędem p) do rozwiązania zagadnienia.

Rozwiązanie otrzymane metodą Eulera

Zauważmy, że metoda Eulera daje nam tzw. **łamaną Eulera**:

$$\mathbf{x}_h(t) = \mathbf{x}_n + (t - t_n) \cdot \mathbf{f}(t_n, \mathbf{x}_n) \quad \text{dla } t_n \leqslant t \leqslant t_{n+1}, \quad n = 0, \ldots, N-1.$$



Zbieżność metody Eulera

Rozważamy zagadnienie

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)), \quad t > t_0, \qquad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0.$$

Oznaczenia.

$$\mathrm{D}_{\mathbf{x}}\mathbf{f} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_n}\right) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{f}_t = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} = \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \quad \cdots \quad \frac{\partial f_n}{\partial t}\right)^T.$$

Zbieżność metody Eulera

Twierdzenie 1.

Przypuśćmy, że w pewnym otoczeniu rozwiązania $\mathbf{x}$ wyjściowego zagadnienia zachodzi

$$\|\mathbf{f}\| \leqslant A, \quad \|\mathrm{D}_{\mathbf{x}}\mathbf{f}\| \leqslant L, \quad \|\mathbf{f}_t\| \leqslant M,$$

a także niech $\mathbf{x}_h$ będzie łamaną Eulera (uzyskaną z krokiem h). Wówczas dla odpowiednio małych $h > 0$ mamy

$$\|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_h(t)\| \leqslant \frac{M + AL}{L}\left(\mathrm{e}^{L(t-t_0)} - 1\right) \cdot h.$$

Zbieżność metody Eulera

Uwagi.

- Dość mocne założenia na funkcję $\mathbf{f}$ – musi być różniczkowalna.
- Zakładamy, że rozwiązanie $\mathbf{x}$ istnieje (i jest jednoznaczne)...
- ... ale przy tych założeniach na $\mathbf{f}$ to właściwie nie jest założenie, tylko wniosek (np. z Tw. Picarda-Lindelöfa).
- Twierdzenie mówi, że łamana Eulera zbiega jednostajnie do rozwiązania, a sama metoda Eulera jest zbieżna (rzędu 1).
- Jest to na tyle słaby rezultat, że dowód pomijamy (udowodnimy *lepsze* twierdzenie) ...
- ... ale można go znaleźć w książce E. Hairer et al. *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems* (1993).

Dlaczego metoda Eulera jest taka zła?

Przykład 6.

Rozważamy równanie

$$x'(t) - x(t) = -\frac{1}{2}\mathrm{e}^{t/2}\sin(5t) + 5\mathrm{e}^{t/2}\cos(5t), \quad t > 0,$$

z warunkiem $x(0) = 0$, a rozwiązania szukamy dla $0 \leqslant t \leqslant 5$.

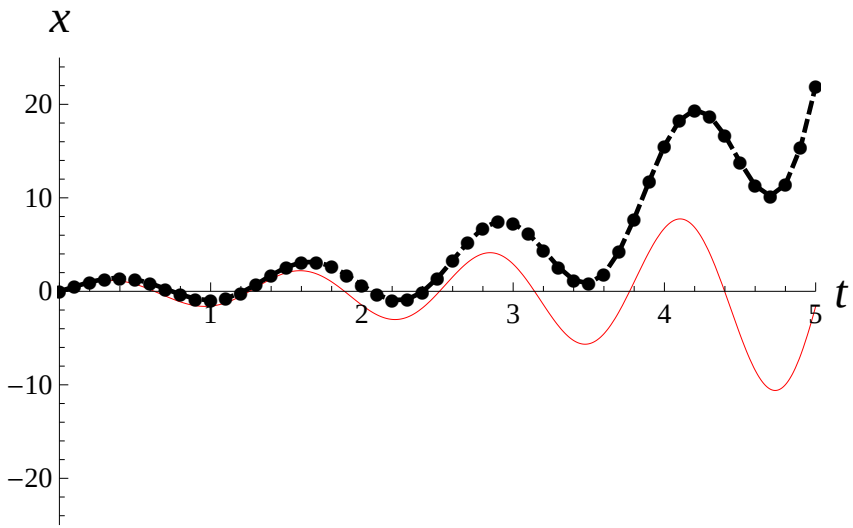
Zagadnienie to ma znane rozwiązanie:

$$x(t) = \mathrm{e}^{t/2}\sin(5t).$$

Przybliżenia szukamy metodą Eulera z krokiem $h = 0{,}1$ (a następnie $h = 0{,}05$ i $h = 0{,}01$).

Dlaczego metoda Eulera jest taka zła?

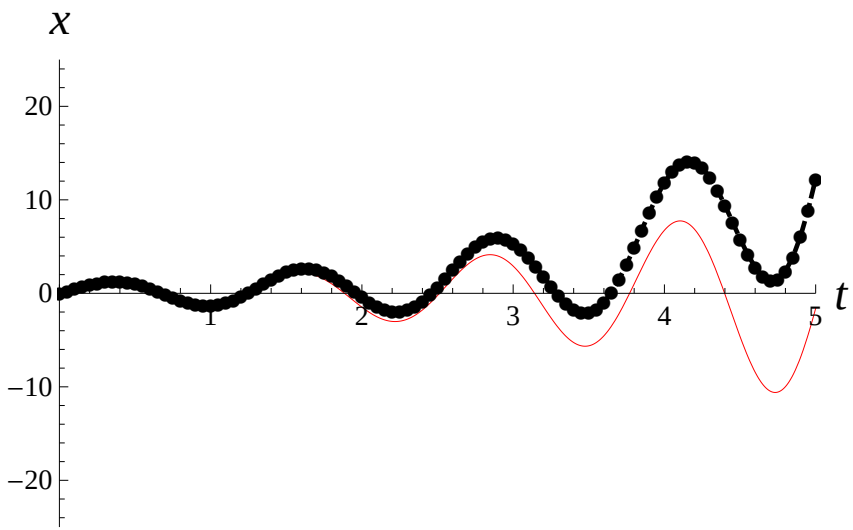
Otrzymane przybliżenie jest zupełnie bezsensowne.



Na początek: $h = 0{,}1$.

Dlaczego metoda Eulera jest taka zła?

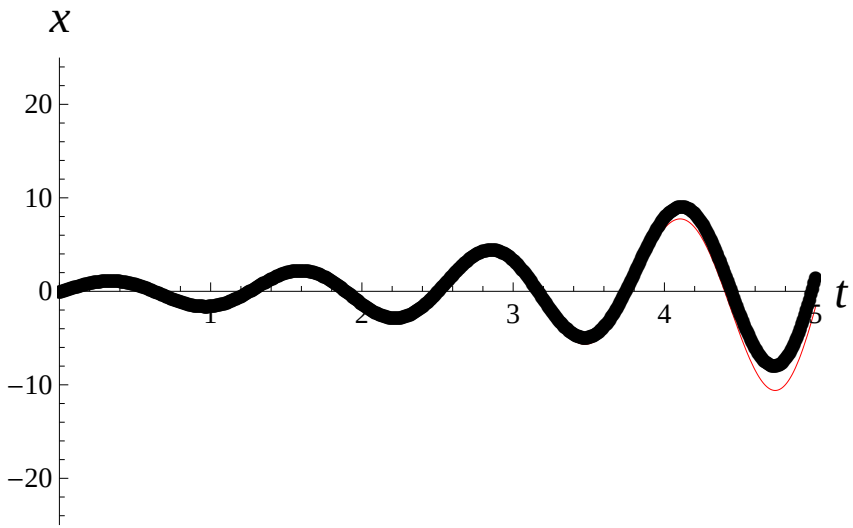
Zmniejszenie kroku siatki nie daje zbyt wiele.



Teraz: $h = 0{,}05$.

Dlaczego metoda Eulera jest taka zła?

Zmniejszenie kroku siatki nie daje zbyt wiele.



Teraz: $h = 0{,}01$.

Dlaczego metoda Eulera jest taka zła?

Uwagi.

- Metoda Eulera daje sensowne wyniki, gdy rozwiązania są wolno zmienne.
- Gdy rozwiązania szybko zmieniają się w czasie, błąd bezwzględny staje się rosnącą funkcją czasu.
- Do tej pory badaliśmy jedynie przykłady, w których znaliśmy rozwiązanie analityczne – zazwyczaj jednak nie mamy takich informacji.

Wykorzystajmy *historię*

Metoda Eulera wykorzystuje informacje o zaledwie jednym wcześniejszym kroku, zapominając o wcześniejszych przybliżeniach.

Wprowadzimy **liniowe metody wielokrokowe**, które pozwolą osiągnąć wyższy rząd zbieżności, wykorzystując dostępną *historię*, tzn. wartości $\mathbf{x}$ i $\mathbf{x}'$ przybliżone we wcześniejszych krokach.

Zaczniemy od prostego przykładu: **2-krokowej metody Adamsa-Bashfortha**.

Wzór Taylora (po raz kolejny)

Zaczniemy ponownie od przypadku skalarnego i ponownie od rozwinięcia rozwiązania x wyjściowego równania ze wzoru Taylora wokół punktu t:

$$x(t+h) = x(t) + h \cdot x'(t) + \frac{1}{2}h^2 \cdot x''(t) + \mathcal{O}(h^3).$$

Pojawia się wyraz z drugą pochodną. Możemy go wyeliminować:

$$\begin{aligned} x'(t-h) &= x'(t) - h \cdot x''(t) + \mathcal{O}(h^2) \\ \Rightarrow \quad h \cdot x''(t) &= x'(t) - x'(t-h) + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned}$$

Wzór Taylora (po raz kolejny)

Stąd (pamiętamy, że $h \cdot x''(t) = x'(t) - x'(t-h) + \mathcal{O}(h^2)$)

$$\begin{aligned} x(t+h) &= x(t) + h \cdot x'(t) + \frac{1}{2} h \cdot h \cdot x''(t) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= x(t) + h \cdot x'(t) + \frac{1}{2} h \cdot (x'(t) - x'(t-h) + \mathcal{O}(h^2)) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= x(t) + \frac{1}{2} h \cdot (3 \cdot x'(t) - x'(t-h)) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= x(t) + \frac{1}{2} h \cdot (3 \cdot f(t, x(t)) - f(t-h, x(t-h))) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

Połóżmy $t = t_n$. Pomijamy resztę, stosujemy notację $f_n = f(t_n, x_n)$ (gdzie x_n to przybliżenie $x(t_n)$) i otrzymujemy nową metodę.

2-krokowa metoda Adamsa-Bashfortha

Otrzymaliśmy **2-krokową metodę Adamsa-Bashfortha** (AB2):

$$x_{n+2} = x_{n+1} + \frac{h}{2}\left(3f_{n+1} - f_n\right), \quad n = 0, \ldots, N-2.$$

Uwaga.

- Potrzebujemy znać wartości przybliżeń w **dwóch** poprzednich krokach.
- Wartość x_1 znajdujemy metodą niższego rzędu (np. metodą Eulera albo metodą Runge-Kutty).

Liniowe metody wielokrokowe

W ogólności **liniowe metody wielokrokowe** zapisujemy w postaci

$$x_{n+k} + \alpha_{k-1} x_{n+k-1} + \ldots + \alpha_0 x_n = h \cdot (\beta_k f_{n+k} + \beta_{k-1} f_{n+k-1} + \ldots + \beta_0 f_n) .$$

Metody jawne i niejawne.

Jeśli $\beta_k \neq 0$, to do obliczenia przybliżenia x_{n+k} potrzeba znać $f_{n+k} = f(t_{n+k}, x_{n+k})$ – trzeba rozwiązań (często nieliniowe) równanie. Takie metody nazywamy **niejawnymi** (ang. *implicit*).

Jeśli $\beta_k = 0$, to metoda jest **jawna** (ang. *explicit*) – np. metoda Eulera, czy metoda AB2.

Jawne metody Adamsa

2-krokowa metoda Adamsa-Bashfortha jest szczególnym przypadkiem **jawnych metod Adamsa**, które wyprowadza się z postaci całkowej

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, x(t))\,\mathrm{d}t,$$

gdzie nieznane rozwiązanie $x(t)$ na przedziale $[t_n, t_{n+1}]$ przybliża się stosując **wzór interpolacyjny Newtona**[*]:

$$\tilde{f}(t) = \tilde{f}(t_n + sh) = \sum_{j=0}^{k-1} (-1)^j \binom{-s}{j} \nabla^j f_n,$$

gdzie $\nabla^0 f_n = f_n$, $\nabla^{j+1} f_n = \nabla^j f_n - \nabla^j f_{n-1}$.

[*] D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*, WNT 2006.

Wzór interpolacyjny Newtona

Przykład 5 (jeszcze raz).

Wróćmy do przykładu z równaniem

$$x'(t) = (1-2t)x(t), \quad t > 0,$$

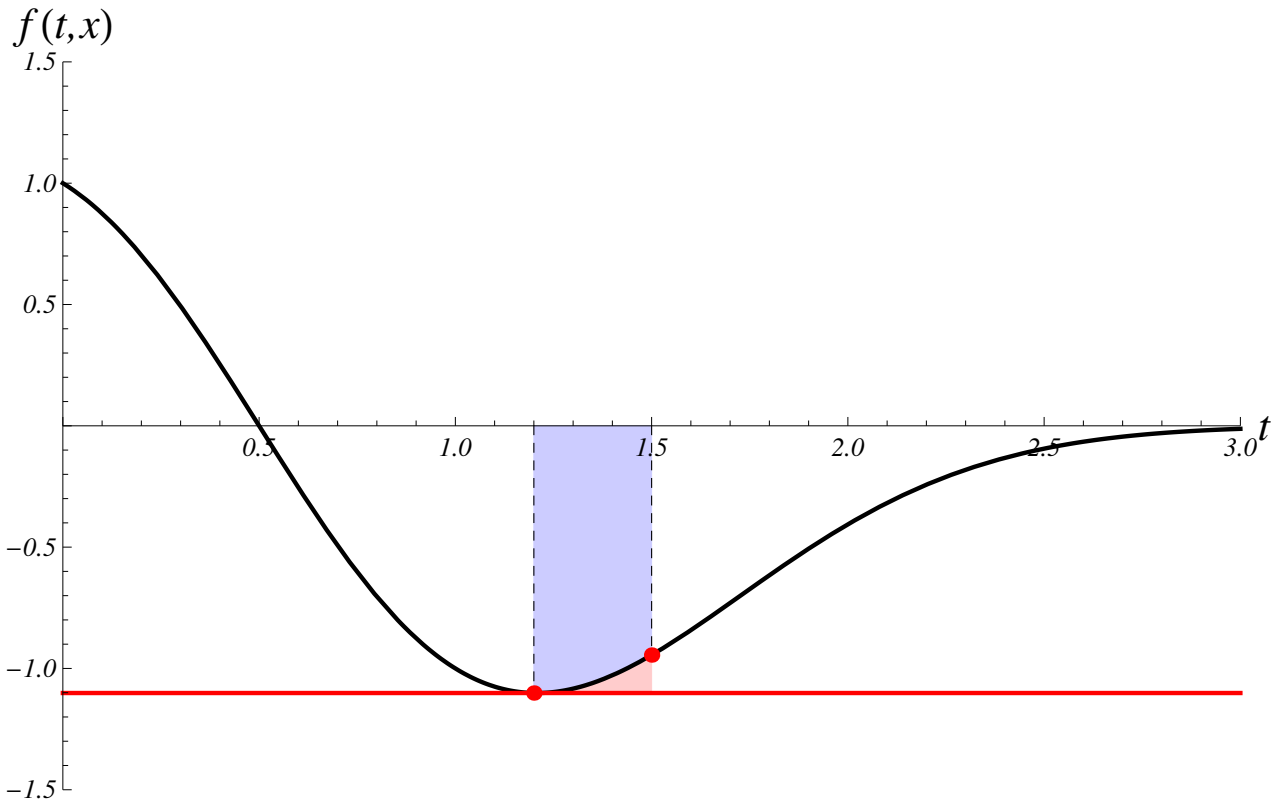
z warunkiem $x(0) = 1$.

Jak będą wyglądały przybliżenia funkcji $f(t,x) = (1-2t)x(t)$*?

* **Uwaga**. Znamy w tym przypadku dokładną postać funkcji x.

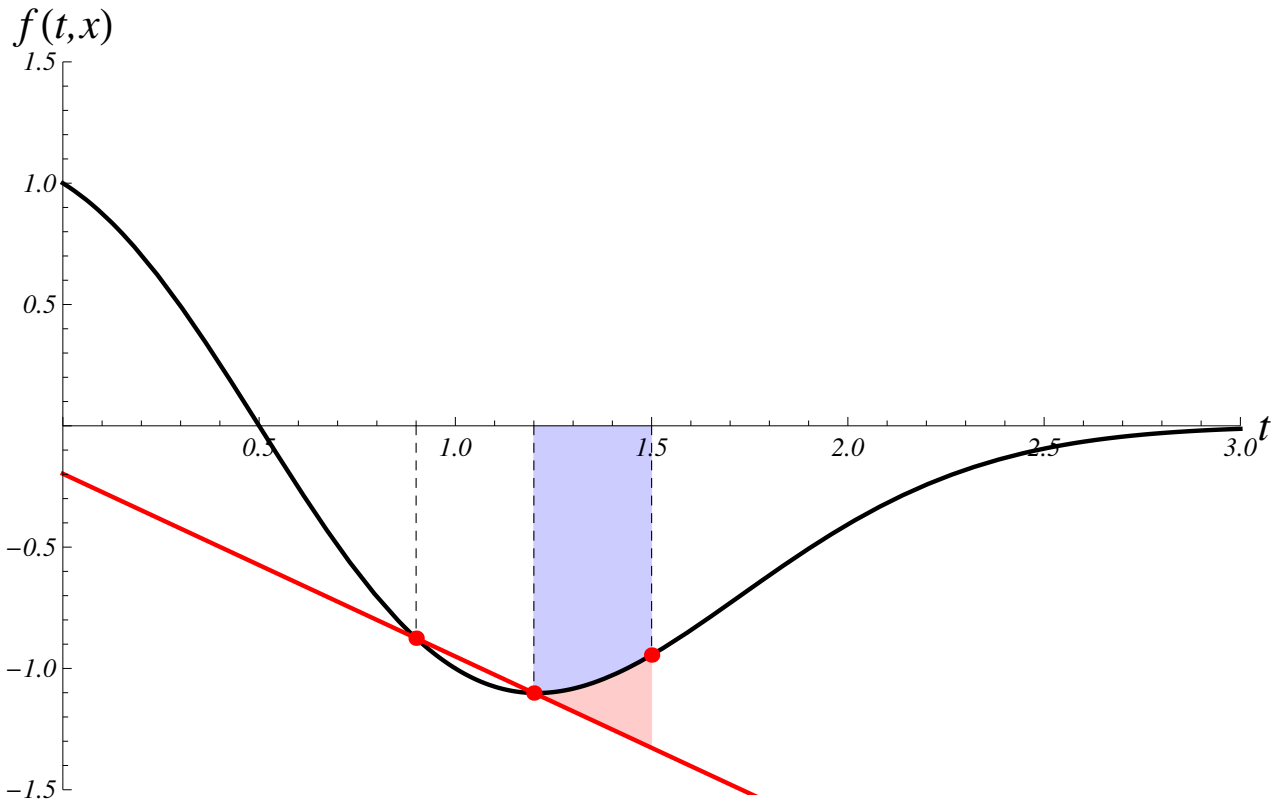
Wzór interpolacyjny Newtona

Szukamy przybliżenia w punkcie $t_5 = 5h$ $(h = 0{,}3)$ na podstawie wartości w punkcie t_4 $(k = 1$, metoda Eulera):



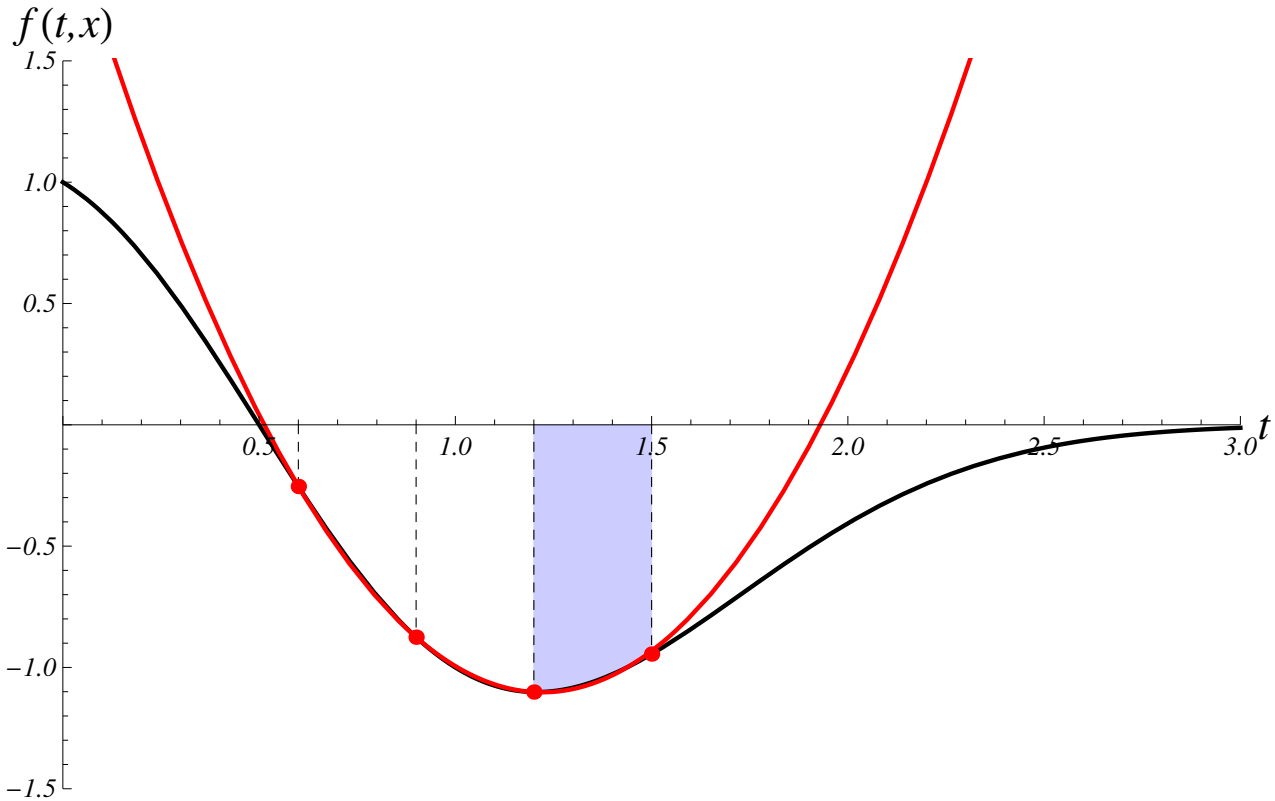
Wzór interpolacyjny Newtona

Szukamy przybliżenia w punkcie $t_5 = 5h$ $(h = 0{,}3)$ na podstawie wartości w punktach t_4 i t_3 $(k = 2$, metoda Adamsa-Bashfortha):



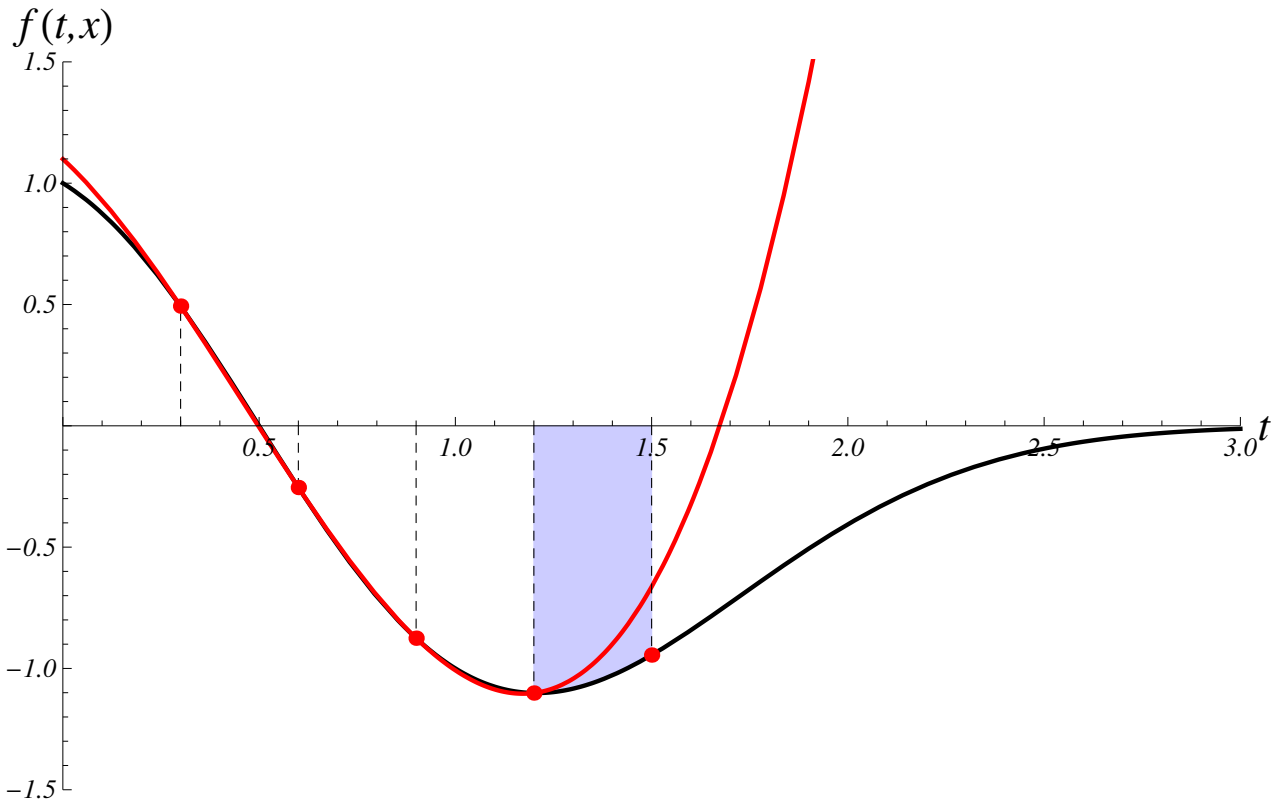
Wzór interpolacyjny Newtona

Szukamy przybliżenia w punkcie $t_5 = 5h$ $(h = 0{,}3)$ na podstawie wartości w punktach t_4, t_3 i t_2 $(k = 3)$:



Wzór interpolacyjny Newtona

Szukamy przybliżenia w punkcie $t_5 = 5h$ $(h = 0{,}3)$ na podstawie wartości w punktach t_4, t_3, t_2 i t_1 $(k = 4)$:



Jawne metody Adamsa

Specjalne przypadki jawnych metod Adamsa wyrażają się wzorami:

$$
\begin{aligned}
k=1: &\quad x_{n+1} = x_n + hf_n && \text{(metoda Eulera)}\\
k=2: &\quad x_{n+2} = x_{n+1} + h\left(\tfrac{3}{2}f_{n+1} - \tfrac{1}{2}f_n\right) && \text{(metoda AB2)}\\
k=3: &\quad x_{n+3} = x_{n+2} + h\left(\tfrac{23}{12}f_{n+2} - \tfrac{16}{12}f_{n+1} + \tfrac{5}{12}f_n\right)\\
k=4: &\quad x_{n+4} = x_{n+3} + h\left(\tfrac{55}{24}f_{n+3} - \tfrac{59}{24}f_{n+2} + \tfrac{37}{24}f_{n+1} - \tfrac{9}{24}f_n\right)
\end{aligned}
$$

Inny rodzaj (jawnych) metod wielokrokowych: Nyströma.
Co z metodami niejawnymi?

Wprowadzenie do formalizmu

Liniowa metoda wielokrokowa:

$$\alpha_k x_{n+k} + \alpha_{k-1} x_{n+k-1} + \ldots + \alpha_0 x_n = h \cdot (\beta_k f_{n+k} + \beta_{k-1} f_{n+k-1} + \ldots + \beta_0 f_n)\,. \qquad (\star)$$

Definicja 2.

Liniowym operatorem różnicowym $\mathscr{L}_h$ związanym z liniową metodą k-krokową $(\star)$ nazywamy operator przypisujący dowolnej funkcji z klasy $\mathcal{C}^1$ funkcję

$$\mathscr{L}_h z(t) = \sum_{j=0}^{k} \left(\alpha_j z(t+jh) - h\beta_j z'(t+jh)\right).$$

Wprowadzenie do formalizmu

Liniowa metoda wielokrokowa:

$$\alpha_k x_{n+k} + \alpha_{k-1} x_{n+k-1} + \ldots + \alpha_0 x_n = h \cdot (\beta_k f_{n+k} + \beta_{k-1} f_{n+k-1} + \ldots + \beta_0 f_n)\,. \qquad (\star)$$

Definicja 3.

Liniowy operator różnicowy $\mathscr{L}_h$ jest **zgodny rzędu** p, jeśli

$$\mathscr{L}_h z(t) = \mathcal{O}(h^{p+1})$$

dla $p \in \mathbb{Z}_+$ i dla dowolnej funkcji odpowiednio gładkiej z. Metodę nazywamy **zgodną**, jeśli jest zgodna rzędu 1.

Wprowadzenie do formalizmu

Liniowa metoda wielokrokowa:

$$\alpha_k x_{n+k} + \alpha_{k-1} x_{n+k-1} + \ldots + \alpha_0 x_n = h \cdot (\beta_k f_{n+k} + \beta_{k-1} f_{n+k-1} + \ldots + \beta_0 f_n)\,. \qquad (\star)$$

Definicja 4.

Pierwszym oraz **drugim wielomianem charakterystycznym** metody k-krokowej $(\star)$ nazywamy odpowiednio

$$\rho(r) = \alpha_k r^k + \alpha_{k-1} r^{k-1} + \ldots + \alpha_0,$$
$$\sigma(r) = \beta_k r^k + \beta_{k-1} r^{k-1} + \ldots + \beta_0.$$

Zgodność liniowych metod wielokrokowych

Twierdzenie 2.

Liniowa metoda wielokrokowa $(\star)$ jest zgodna rzędu p wtedy i tylko wtedy, gdy

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j = 0 \quad \text{oraz} \quad \sum_{j=0}^{k} \alpha_j j^q = q \sum_{j=0}^{k} \beta_j j^{q-1} \quad \text{dla } q = 1, \ldots, p.$$

Wniosek.

Metoda jest zgodna wtedy i tylko wtedy, gdy

$$\rho(1) = 0 \qquad \text{oraz} \qquad \rho'(1) = \sigma(1).$$

Dowód.

Zbieżność liniowych metod wielokrokowych

Aby móc mówić o zbieżności rozważanych metod, musimy założyć, że zagadnienie

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)), \qquad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0,$$

posiada jednoznaczne rozwiązanie.

Aby to osiągnąć, będziemy zakładać, że spełnione są założenia Twierdzenia Picarda-Lindelöfa (lub Twierdzenia Peano oraz Twierdzenia o jednoznaczności z RRZ).

Będziemy oznaczać przez $\mathbf{x}_h$ funkcję określoną na tym samym przedziale, co $\mathbf{x}$ i taką, że $\mathbf{x}_h(t_n) = \mathbf{x}_n$ we wszystkich punktach siatki (np. łamana łącząca punkty).

Zbieżność liniowych metod wielokrokowych

Definicja 5a.

Liniowa metoda k-krokowa jest **zbieżna**, jeśli dla dowolnych warunków początkowych spełniających wymienione wcześniej założenia zachodzi

$$\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_h(t) \xrightarrow{h \to 0^+} \mathbf{0} \qquad \text{dla wszystkich } t \in [0, T],$$

o ile wartości startowe metody spełniały

$$\mathbf{x}(t_n) - \mathbf{x}_h(t_n) \xrightarrow{h \to 0^+} \mathbf{0} \qquad \text{dla } n = 0, 1, \ldots, k-1.$$

Zbieżność liniowych metod wielokrokowych

Definicja 5b.

Liniowa metoda k-krokowa jest **zbieżna rzędu** p, jeśli dla dowolnych warunków początkowych i dla dowolnej funkcji $\mathbf{f}$ odpowiednio gładkiej istnieją stałe $C, h > 0$ takie, że

$$\|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_h(t)\| \leqslant Ch^p \qquad \text{dla } h \leqslant h_0,$$

o ile wartości startowe metody spełniały

$$\|\mathbf{x}(t_n) - \mathbf{x}_h(t_n)\| \leqslant Ch^p \qquad \text{dla } h \leqslant h_0 \text{ i } n = 0, 1, \ldots, k-1.$$

Zbieżność liniowych metod wielokrokowych

Mamy następujący **pierwszy warunek konieczny** zbieżności.

Twierdzenie 3.

Zbieżna liniowa metoda wielokrokowa ($\star$) jest zgodna.

Dowód.

Czy jest to warunek wystarczający?

Zgodność to za mało

Przykład 7.

Rozważmy metodę dwukrokową

$$x_{n+2} + 4x_{n+1} - 5x_n = h(4f_{n+1} + 2f_n).$$

Można łatwo sprawdzić, że jest to metoda zgodna rzędu 3.

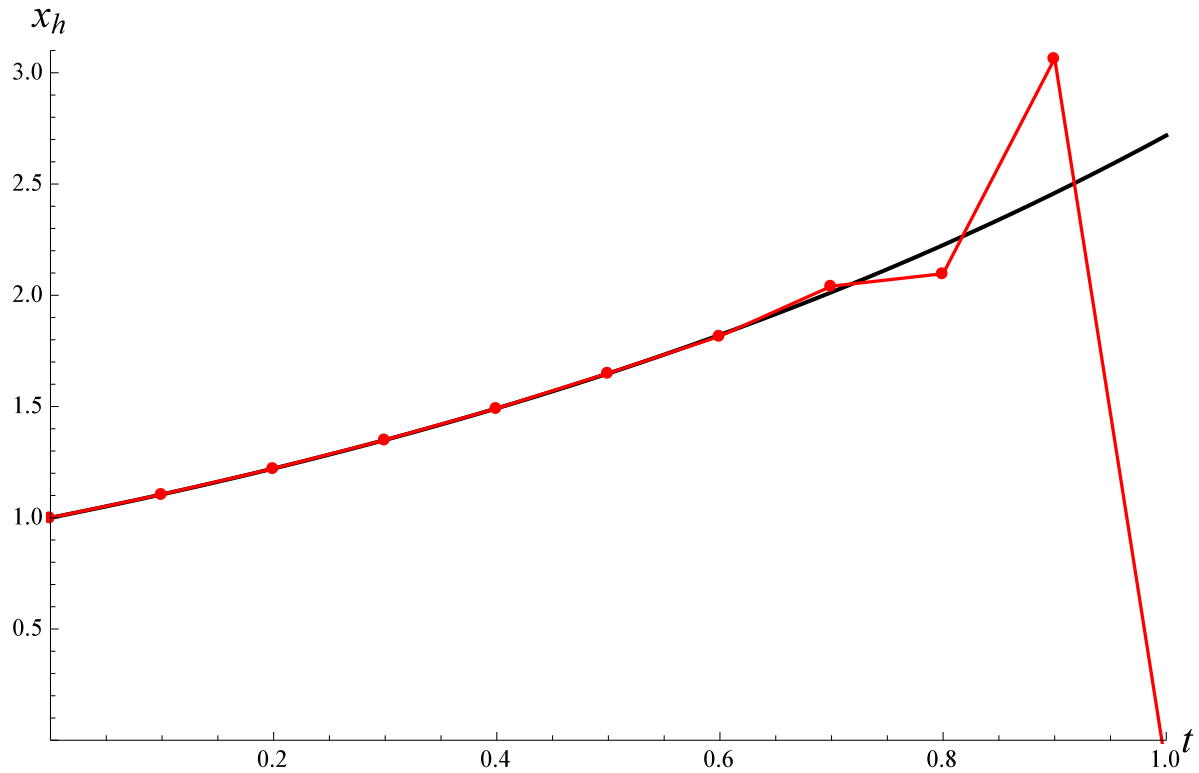
Zastosujmy ją do zagadnienia

$$x'(t) = x(t), \qquad x(0) = 1,$$

które ma znane rozwiązanie $x(t) = \mathrm{e}^t$. Ponieważ metoda jest dwukrokowa, musimy znać x_0 oraz x_1 – przyjmujemy $x_0 = 1$ oraz $x_1 = \mathrm{e}^h$ (czyli prawdziwe wartości).

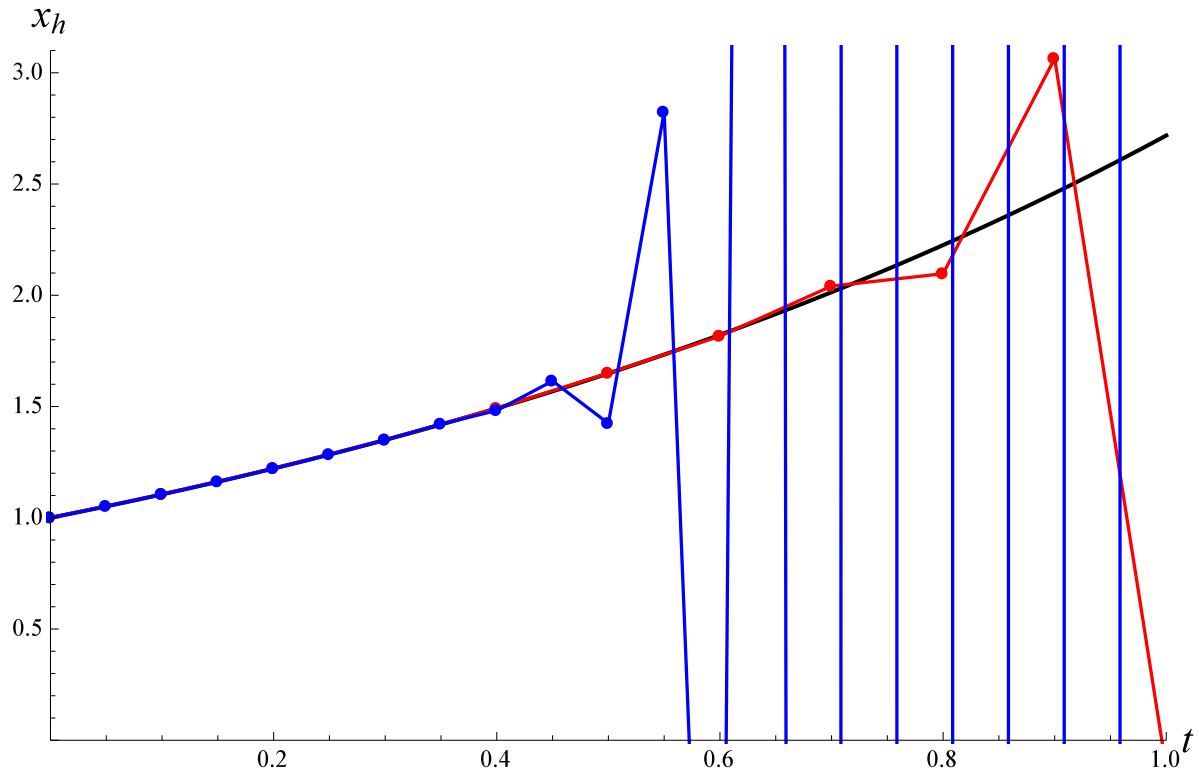
Zgodność to za mało

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}1$:



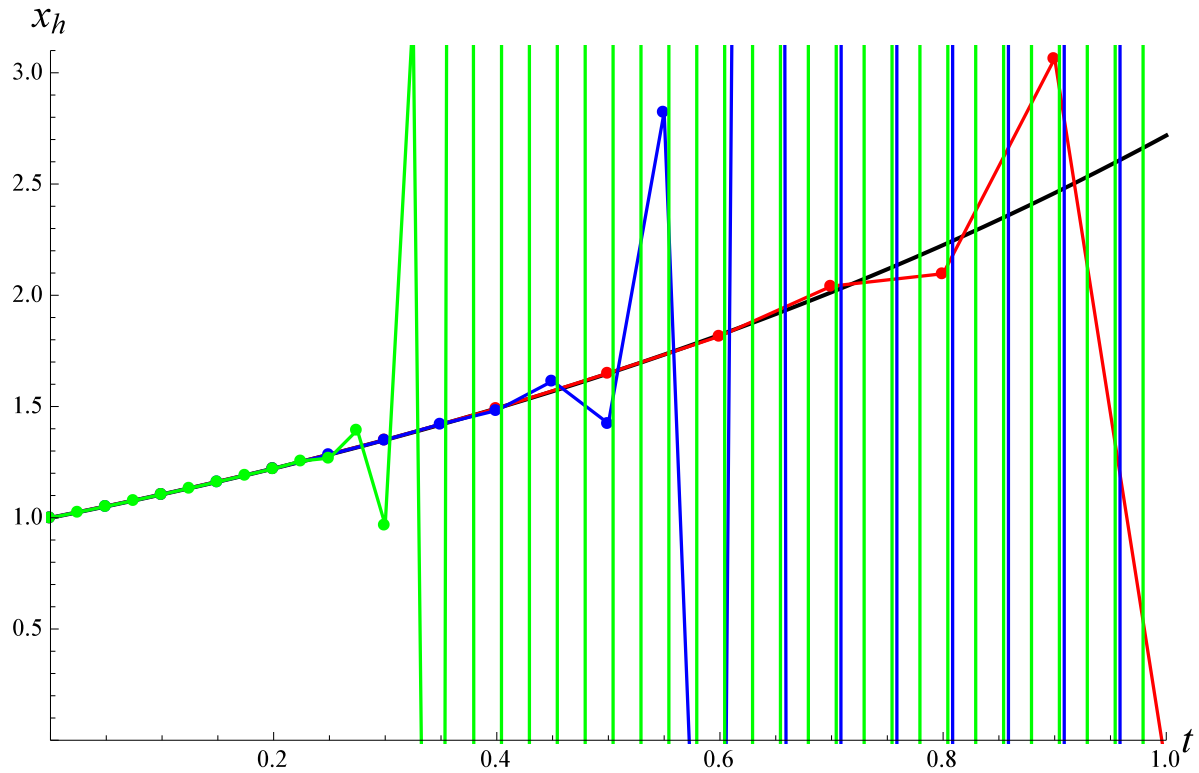
Zgodność to za mało

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}05$:



Zgodność to za mało

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}025$:



Zgodność to za mało

W dalszej części wykażemy, że aby metoda wielokrokowa była zbieżna, to nie wystarczy by była zgodna, potrzebny jest jeszcze dodatkowy warunek, tzn. *stabilność*:

$$\text{zbieżność} = \text{zgodność} + \text{stabilność}.$$

Stabilność liniowych metod wielokrokowych

Liniowa metoda wielokrokowa:

$$\alpha_k x_{n+k} + \alpha_{k-1} x_{n+k-1} + \ldots + \alpha_0 x_n = h \cdot (\beta_k f_{n+k} + \beta_{k-1} f_{n+k-1} + \ldots + \beta_0 f_n)\,. \qquad (\star)$$

Definicja 6.

Liniowa metoda k-krokowa $(\star)$ jest **0-stabilna** (**D-stabilna** lub **stabilna w sensie Dahlquista**), jeśli wszystkie pierwiastki pierwszego wielomianu charakterystycznego $\rho(r) = \alpha_k r^k + \alpha_{k-1} r^{k-1} + \ldots + \alpha_0$ leżą wewnątrz lub na brzegu koła jednostkowego, a pierwiastki leżące na brzegu są pojedyncze.

Stabilność liniowych metod wielokrokowych

W przypadku jawnych metod Adamsa, tzn.

$$x_{n+1} = x_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j \nabla^j f_n$$

mamy zawsze

$$\rho(r) = r^k - r^{k-1} = r^{k-1}(r-1),$$

a zatem jawne metody Adamsa są 0-stabilne.

Stabilność liniowych metod wielokrokowych

Przykład 7 (jeszcze raz).

Zauważmy, że dla metody

$$x_{n+2} + 4x_{n+1} - 5x_n = h(4f_{n+1} + 2f_n)$$

mamy $\rho(r) = r^2 + 4r - 5 = (r-1)(r+5)$ i $\sigma(r) = 4r + 2$.
Jest to więc metoda zgodna, ale niestabilna.

Zbieżność liniowych metod wielokrokowych

W ogólności, stabilność jest **drugim warunkiem koniecznym** zbieżności.

Twierdzenie 4.

Zbieżna liniowa metoda wielokrokowa ($\star$) jest 0-stabilna.

Dowód.

Stabilność, w połączeniu ze zgodnością metody, stanowi również **warunek wystarczający**.

Zbieżność liniowych metod wielokrokowych

Twierdzenie 5 (Dahlquist, 1956).

Jeśli liniowa metoda wielokrokowa ($\star$) jest 0-stabilna i zgodna rzędu p, to jest zbieżna rzędu p.

Dowód w E. Hairer et al. *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems* (1993).
(*prosty, ale wymaga żmudnych rachunków*)

Jaki jest jednak maksymalny rząd zbieżności dla metody k-krokowej?

Maksymalny rząd zbieżności

Twierdzenie 6 (Pierwsza bariera Dahlquista, 1959).

Rząd p 0-stabilnej liniowej metody k-krokowej spełnia warunki:

1. $p \leqslant k+2$ jeśli k jest parzyste,
2. $p \leqslant k+1$ jeśli k jest nieparzyste,
3. $p \leqslant k$ jeśli $\beta_k/\alpha_k \leqslant 0$ (w szczególności dla metod jawnych).

Dowód w E. Hairer et al. *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems* (1993).

Czy *zbieżna* to już *użyteczna*?

Zgodność i stabilność stanowią minimalne wymagania wobec użytecznej metody całkowania równań zwyczajnych, jednak nie uwzględniają one w ogóle długości kroku siatki.

To znacznie ogranicza użyteczność takich metod.

Zbieżna to jeszcze nie *użyteczna*

Przykład 8.

Rozważmy zagadnienie początkowe

$$x'(t) = -x(t), \quad t > 0,$$

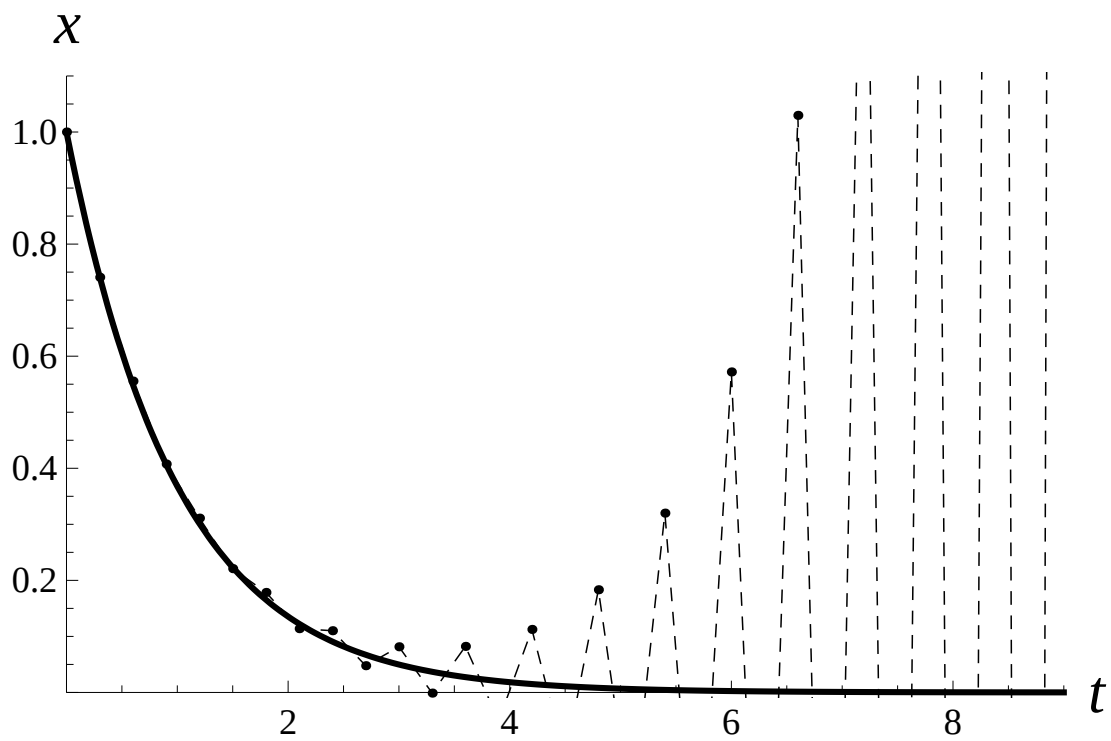
z warunkiem $x(0) = 1$, a także tzw. *metodę punktu środkowego* (ang. *midpoint rule* lub *leapfrog method*):

$$x_{n+2} - x_n = 2hf_{n+1}.$$

Zauważmy, że $\rho(r) = r^2 - 1$ oraz $\sigma(r) = 2r$, zatem metoda jest zgodna rzędu 2 oraz stabilna, a więc zbieżna.

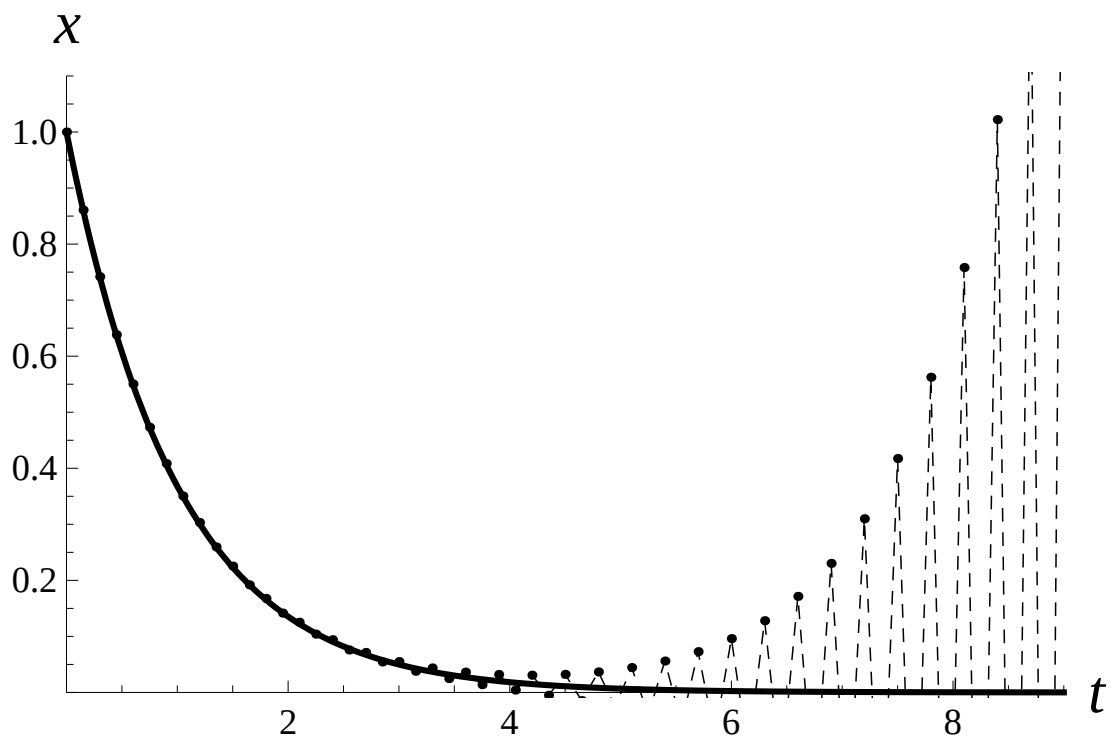
Zbieżna to jeszcze nie *użyteczna*

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}3$:



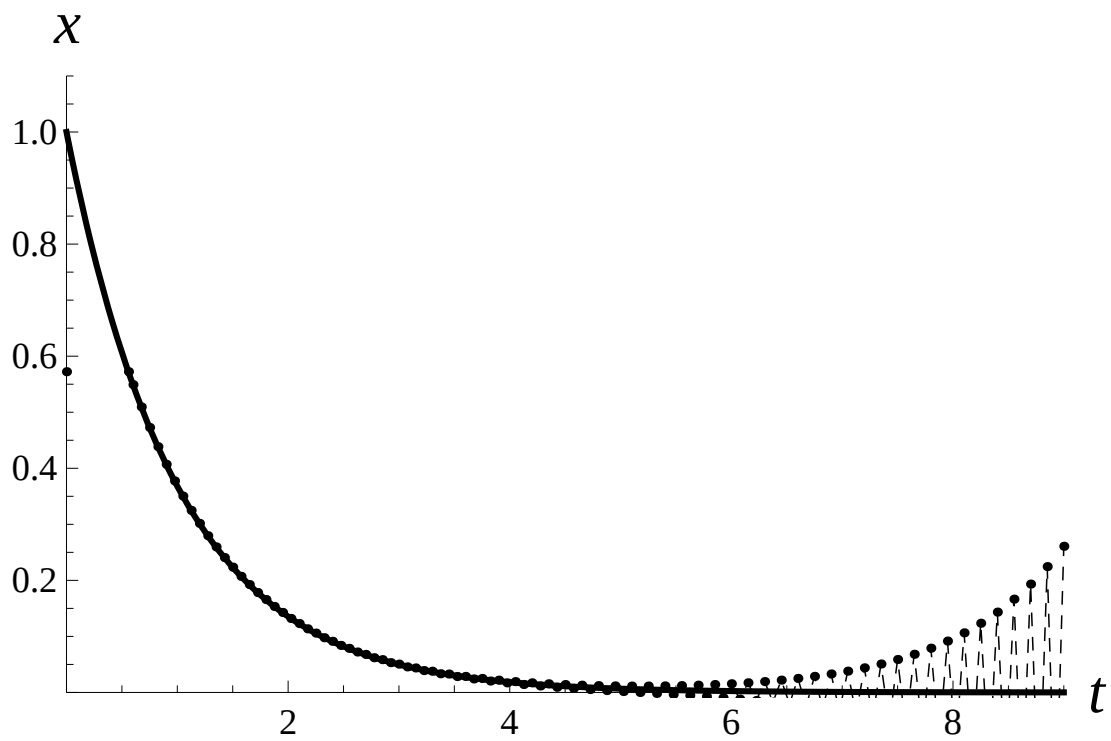
Zbieżna to jeszcze nie *użyteczna*

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}15$:



Zbieżna to jeszcze nie *użyteczna*

Numeryczne przybliżanie rozwiązania dla $h = 0{,}075$:



Zbieżna to jeszcze nie *użyteczna*

1. Pojęcie zbieżności (a także zgodności i stabilności) są pojęciami granicznymi.
2. 0-stabilność oznacza, że przy przejściu do granicy z długością kroku rozwiązanie jest stabilne...
3. ... ale w praktyce nie da się "przejść do granicy" z długością kroku.
4. Wprowadza się dodatkowe wymaganie – **A-stabilność** (lub **absolutną stabilność**) metody...
5. ... ale o tym już przy innej okazji :-)

I znów metoda Eulera...

Wróćmy jeszcze do metody, od której zaczęliśmy – metody Eulera (w przypadku skalarnym). Tym razem jednak, zamiast liczyć od razu x_{n+1} na podstawie x_n, wprowadźmy *punkt pośredni*:

$$x_{n+\frac{1}{2}} = x_n + \frac{h}{2} f(t_n, x_n),$$
$$x_{n+1} = x_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} f(t_{n+\frac{1}{2}}, x_{n+\frac{1}{2}}).$$

Spróbujmy zapisać te dwa wyrażenia w jednym wzorze.

... ale w nowym wydaniu

$$x_{n+1} = x_n + h \cdot \left(\underbrace{\frac{1}{2}}_{b_1} \underbrace{f(t_n, x_n)}_{k_1} + \underbrace{\frac{1}{2}}_{b_2} \underbrace{f\left(t_n + \overbrace{\frac{1}{2}}^{a} h, x_n + \overbrace{\frac{1}{2}}^{a} \overbrace{hf(t_n, x_n)}^{k_1}\right)}_{k_2} \right)$$

Nachylenie stycznej do przybliżonego rozwiązania jest **średnią** nachyleń rzeczywistego rozwiązania przechodzącego przez różne punkty (t_n oraz $t_n + ah$).

Dwustopniowa metoda Runge-Kutty

Jawne 2-stopniowe metody Rungego-Kutty możemy zapisać w postaci:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, x_n), \\ k_2 &= f(t_n + ah, x_n + ahk_1), \\ x_{n+1} &= x_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2). \end{aligned}$$

Jak dobrać wartości współczynników a, b_1 i b_2, aby osiągnąć jak najlepszy rząd metody?

Dwustopniowa metoda Runge-Kutty

Skorzystamy (jak zwykle) ze wzoru Taylora, ale zastosujemy go do wyrażenia k_2:

$$f(t+\alpha h, x+\beta h) = f(t,x) + h\big(\alpha f_t(t,x) + \beta f_x(t,x)\big) + \mathcal{O}(h^2).$$

Zauważmy, że u nas $\alpha = a$ oraz $\beta = ak_1$, stąd dla $(t,x) = (t_n, x_n)$:

$$f(t_n + ah, x_n + ahk_1) = f_n + ah(f_t + f f_x)|_{t=t_n,\, x=x_n} + \mathcal{O}(h^2).$$

Dwustopniowa metoda Runge-Kutty

Po podstawieniu do wzoru na x_{n+1} daje to

$$x_{n+1} = x_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2) = x_n + hb_1 k_1 + hb_2 k_2$$

$$= x_n + hb_1 f_n + hb_2 \Big(f_n + ah(f_t + f f_x)|_{t=t_n,\, x=x_n} + \mathcal{O}(h^2) \Big)$$

$$= x_n + h(b_1 + b_2) f_n + h^2 a b_2 (f_t + f f_x)|_{t=t_n\, x=x_n} + \mathcal{O}(h^3).$$

Z drugiej strony (jak zwykle z Twierdzenia Taylora)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + h \cdot 1 \cdot f_n + h^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (f_t + f f_x)|_{t=t_n,\, x=x_n} + \mathcal{O}(h^3).$$

Dwustopniowa metoda Runge-Kutty

Przypuśćmy, że wartość przybliżenia w kroku t_n jest **dokładna** (tzn. mamy $x_n = x(t_n)$), wówczas

$$x(t_{n+1}) - x_{n+1} = h \cdot (1 - b_1 - b_2) \cdot f_n + h^2 \cdot \left(\frac{1}{2} - ab_2\right) \cdot (f_t + f f_x)|_{t=t_n,\, x=x_n} + \mathcal{O}(h^3).$$

Powstałą w ten sposób wielkość nazywamy **błędem lokalnym**. W ogólności ta metoda ma błąd lokalny rzędu $\mathcal{O}(h)$ – nie jest to najlepszy rezultat (metoda nie jest nawet zgodna). Ale...

Rząd zbieżności 2-stopniowej metody RK

... zerując kolejne współczynniki otrzymujemy rząd metody równy 1 lub 2.

błąd lokalny		warunki osiągnięcia rzędu metody			rząd*
$\mathcal{O}(h^2)$	jeśli	$b_1 + b_2 = 1$	oraz	dowolne a	$p = 1$
$\mathcal{O}(h^3)$	jeśli	$b_1 + b_2 = 1$	oraz	$ab_2 = \frac{1}{2}$	$p = 2$

* W przypadku metod RK mówimy, że metoda jest rzędu p, jeśli błąd lokalny jest $\mathcal{O}(h^{p+1})$.

Rząd zbieżności 2-stopniowej metody RK

Przyjmując $b_2 = \theta$ otrzymujemy rodzinę 2-stopniowych jawnych metod RK rzędu 2 (dla $\theta \neq 0$), gdzie $b_1 = 1 - \theta$, $a = \frac{1}{2\theta}$. Najpopularniejsze z nich to:

1. *ulepszona metoda Eulera*: $\theta = \frac{1}{2}$,
2. *zmodyfikowana metoda Eulera*: $\theta = 1$.

Można pokazać, że nie da się dobrać parametrów a, b_1 i b_2 tak, by rząd metody był równy 3.

Klasa metod Runge-Kutty

Ogólna r-stopniowa metoda RK może zostać zapisana w postaci:

$$x_{n+1} = x_n + h \sum_{i=1}^{r} b_i k_i,$$

gdzie k_i są obliczane na podstawie wartości funkcji f:

$$k_i = f\left(t_n + c_i h,\, x_n + h \sum_{j=1}^{r} a_{i,j} k_j\right), \quad i = 1, \ldots, r.$$

Tak jak w przypadku metod 2-stopniowych widzimy, że nachylenie stycznej do przybliżonego rozwiązania będzie **średnią ważoną** nachyleń w różnych punktach pośrednich (o ile mamy odpowiednie c_i).

Klasa metod Runge-Kutty

Wobec tego naturalnym warunkiem jest nałożenie ograniczenia

$$c_i = \sum_{j=1}^{r} a_{i,j}, \quad i = 1, \ldots, r.$$

Metoda zawiera wówczas $r^2 + r$ parametrów $\{a_{i,j}, b_j\}$.

Tablica Butchera

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,r-1} & a_{1,r} \\ c_2 & a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,r-1} & a_{2,r} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_r & a_{r,1} & a_{r,2} & \dots & a_{r,r-1} & a_{r,r} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_{r-1} & b_r \end{array}$$

Parametry metody RK często zapisuje się w postaci tabeli (tzw. **tablica Butchera**).

Tablica Butchera

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,r} \\ c_2 & a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,r} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_r & a_{r,1} & a_{r,2} & \dots & a_{r,r} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_r \end{array}$$

Zauważmy, że w ogólności wyznaczenie wartości k_i wymaga rozwiązania r (najczęściej nieliniowych) równań:

$$k_i = f\left(t_n + c_i h,\, x_n + h\sum_{j=1}^{r} a_{i,j} k_j\right), \quad i = 1, \dots, r.$$

Metody RK są więc w ogólności metodami **niejawnymi**.

Tablica Butchera

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,r-1} & a_{1,r} \\ c_2 & a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,r-1} & a_{2,r} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_r & a_{r,1} & a_{r,2} & \dots & a_{r,r-1} & a_{r,r} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_{r-1} & b_r \end{array}$$

Jeśli jednak tablica Butchera jest ściśle trójkątna dolna (tzn. mamy $a_{i,j} = 0$ dla wszystkich $j \geqslant i$), to metoda staje się **jawna** – nie trzeba wówczas rozwiązywać żadnych równań nieliniowych.

Rząd metody RK

Definicja 7.

Mówimy, że metoda Runge-Kutty jest rzędu p, jeśli dla dostatecznie gładkich funkcji x mamy

$$|x(t_0 + h) - x_1| \leqslant C \cdot h^{p+1},$$

tzn. błąd lokalny jest równy $\mathcal{O}(h^{p+1})$.

Określenie warunków, by metoda miała odpowiedni rząd wiąże się zazwyczaj ze żmudnymi obliczeniami (widzieliśmy to na przykładzie metody 2-stopniowej). Ograniczymy się do metod jawnych.

Rząd metody – warunki dla metody rzędu 3

Twierdzenie 7.

Jawna metoda RK jest rzędu 3 wtedy i tylko wtedy, gdy:

$$\sum_{j=1}^{r} b_j = 1, \qquad \sum_{j=2}^{r}\sum_{k=1}^{j-1} b_j a_{j,k} = \frac{1}{2},$$

$$\sum_{j=2}^{r}\sum_{k=1}^{j-1}\sum_{\ell=1}^{j-1} b_j a_{j,k} a_{j,\ell} = \frac{1}{3}, \qquad \sum_{j=3}^{r}\sum_{k=2}^{j-1}\sum_{\ell=1}^{k-1} b_j a_{j,k} a_{k,\ell} = \frac{1}{6}.$$

Pierwszy warunek gwarantuje rząd 1, kolejny – rząd 2 (to już widzieliśmy), a kolejne dwa gwarantują rząd 3. Musimy mieć zatem co najmniej 3-stopniową metodę.

Rząd metody – warunki dla metody rzędu 4

Twierdzenie 8.

Jawna metoda RK jest rzędu 4 wtedy i tylko wtedy, gdy są spełnione warunki dla metody rzędu 3 oraz:

$$\sum_{j=2}^{r}\sum_{k=1}^{j-1}\sum_{\ell=1}^{j-1}\sum_{m=1}^{j-1} b_j a_{j,k} a_{j,\ell} a_{j,m} = \frac{1}{4}, \qquad \sum_{j=3}^{r}\sum_{k=1}^{j-1}\sum_{\ell=2}^{j-1}\sum_{m=1}^{\ell-1} b_j a_{j,k} a_{j,\ell} a_{\ell,m} = \frac{1}{8},$$

$$\sum_{j=3}^{r}\sum_{k=2}^{j-1}\sum_{\ell=1}^{k-1}\sum_{m=1}^{k-1} b_j a_{j,k} a_{k,\ell} a_{k,m} = \frac{1}{12}, \qquad \sum_{j=4}^{r}\sum_{k=3}^{j-1}\sum_{\ell=2}^{k-1}\sum_{m=1}^{\ell-1} b_j a_{j,k} a_{k,\ell} a_{\ell,m} = \frac{1}{24}.$$

Warunki robią się coraz bardziej skomplikowane.

Ile stopni powinna mieć metoda rzędu p?

- Można przypuszczać, że metoda rzędu p potrzebuje p stopni (zgadza się dla $p = 1, 2, 3, 4$). Jednak **nie** jest to prawda dla $p > 4$.
- Znane są dokładne liczby potrzebnych stopni dla $p \leqslant 8$.
- Aby uzyskać rząd metody równy 9, potrzeba między 12 a 17 stopni, a parametry muszą spełniać 486 nieliniowych równań algebraicznych. :-)

Najpopularniejsza z metod RK

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \qquad \begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & & \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 1 & 0 & \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8} \end{array}$$

W 1901 roku Kutta zaproponował dwie metody 4-stopniowe, które osiągają rząd 4. Powyżej znajdują się tablice Butchera tych metod. Pierwsza z nich jest bardziej popularna (nazywana jest często po prostu **metodą Runge-Kutty**), a druga jest bardziej dokładna.

Zbieżność metod Runge-Kutty

Zakładamy, że zagadnienie $x'(t) = f(t, x(t))$ dla $t > t_0$, $x(t_0) = x_0$ ma jednoznaczne rozwiązanie. Oznaczmy przez x_h łamaną łączącą punkty rozwiązania numerycznego z krokiem h.

Twierdzenie 9.

Przypuśćmy, że w pewnym otoczeniu rozwiązania x wyjściowego zagadnienia zachodzi $|f_x| \leqslant L$, a także, że błąd lokalny nie przekracza wartości $C \cdot h^{p+1}$. Wówczas dla odpowiednio małych $h > 0$ mamy

$$|x(t) - x_h(t)| \leqslant \frac{C}{L}\left(\mathrm{e}^{L(t-t_0)} - 1\right) \cdot h^p.$$

Porównanie jawnych metod stałokrokowych

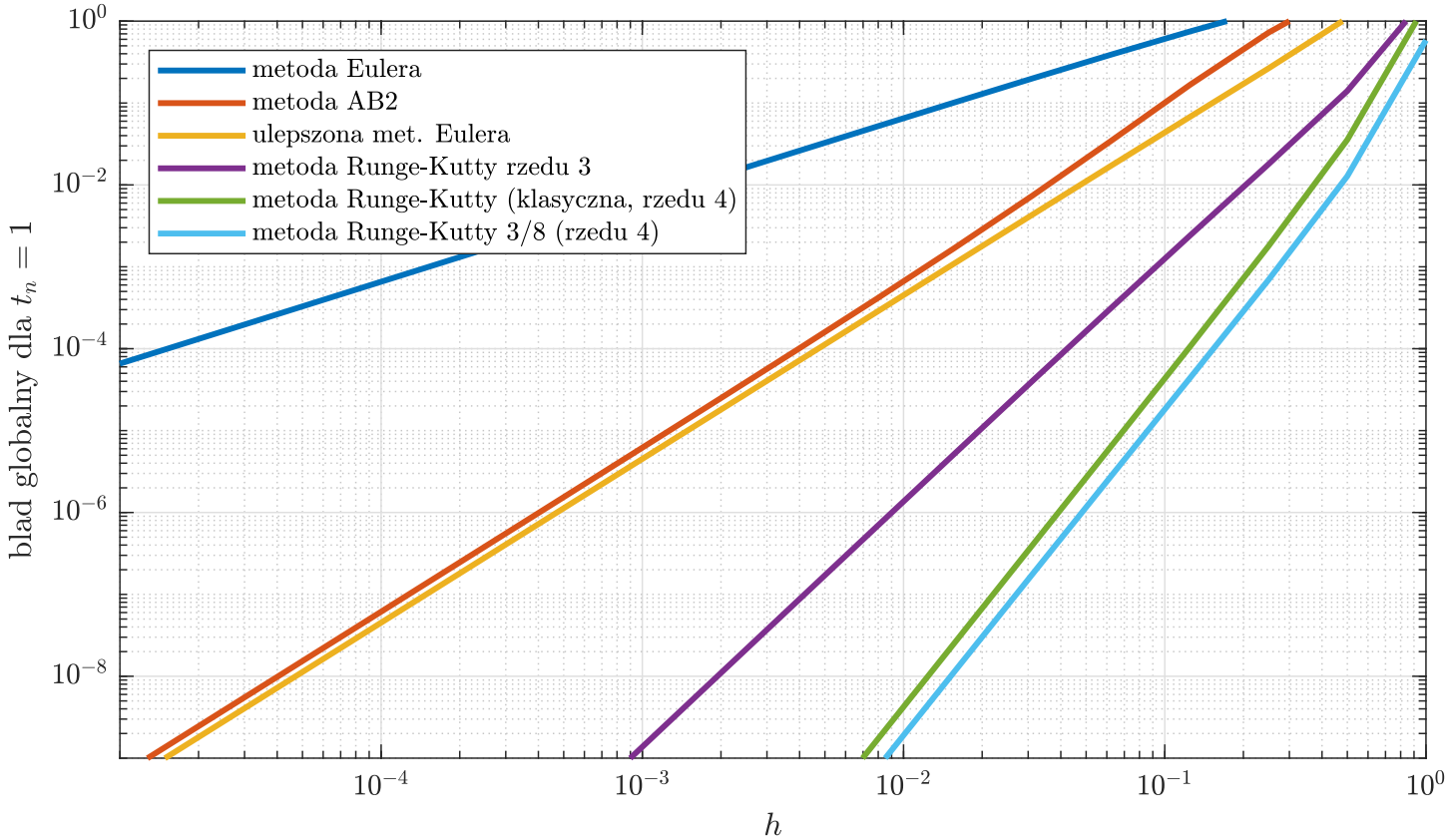
Wróćmy jeszcze do Przykładu 6 z równaniem

$$x'(t) - x(t) = -\frac{1}{2}\mathrm{e}^{t/2}\sin(5t) + 5\mathrm{e}^{t/2}\cos(5t), \quad t > 0,$$

z warunkiem $x(0) = 0$.

Porównajmy błąd globalny dla $t = 1$ przy różnych metodach i różnych wartościach h.

Porównanie jawnych metod stałokrokowych



Podsumowanie

- Każdą z przedstawionych metod można uogólnić na rozwiązywanie układów równań.
- Na laboratorium, poza implementacją podstawowych metod, zajmiemy się również kwestią doboru wielkości kroku siatki tak, aby osiągnąć pożądany poziom dokładności rozwiązania (czyli zajmiemy się adaptacyjnym wyborem kroku).

KONIEC CZĘŚCI 1