Schematy jawne i niejawne dla równań różniczkowych zwyczajnych*

17 marca 2015

Równanie różniczkowe o ogólnej postaci

$$\frac{du}{dt} = f(t, u) \tag{1}$$

rozwiążemy prostymi schematami różnicowymi i porównamy dokładność uzyskanych rozwiązań.

Zadanie 1. Jawny schemat Eulera (10 pkt)
Przyjmujemy $f(t, u) = u \cdot \cos(t)$. Rozwiązywać będziemy więc równanie

$$\frac{du}{dt} = u \cdot \cos(t) \tag{2}$$

przy pomocy schematu różnicowego:

$$u_n = u_{n-1} + \Delta t f(t_{n-1}, u_{n-1}) \tag{3}$$

(indeks dolny n oznacza n-tą chwilę czasową). Równanie (2) należy rozwiązać w przedziale $t \in [0, 4\pi]$ z krokiem czasowym $\Delta t = \frac{\pi}{400}$ oraz warunkiem początkowym $u(t = 0) = u_0 = 1$. Porównać rozwiązanie numeryczne z dokładnym (rysując wykres uzyskanego rozwiązania numerycznego i dokładnego $u(t) = e^{\sin(t)}$) oraz narysować błąd globalny $e(t)$ (tj. różnicę rozwiązania dokładnego i numerycznego) w funkcji t.

Rozwiązać równanie ponownie dla dziesięciu różnych kroków czasowych (użyć $\Delta t = \frac{\pi}{100}, \frac{\pi}{90}, \frac{\pi}{80}, ..., \frac{\pi}{10}$) i narysować błąd $e(t = \pi)$ w funkcji Δt.

Zadanie 2. Niejawny schemat Eulera (10 pkt)
Równanie (2) rozwiązać **niejawnym** schematem Eulera

$$u_n = u_{n-1} + \Delta t f(t_n, u_n) \tag{4}$$

*Laboratorium z inżynierskich metod numerycznych, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH 2014/2015. Bartłomiej Szafran (bszafran@agh.edu.pl), Krzysztof Kolasiński (kolasinski@fis.agh.edu.pl), Elżbieta Wach (Elzbieta.Wach@fis.agh.edu.pl), Dariusz Żebrowski (Dariusz.Zebrowski@fis.agh.edu.pl) przy identycznych parametrach, jak w poprzednim zadaniu (krok czasowy, przedział, warunek początkowy). Przepis (4) to równanie liniowe na u_n, które potrafimy rozwiązać analitycznie (w praktyce rzadko się to udaje, nawet gdy znamy wzór na funkcję f):

$$u_n = \frac{u_{n-1}}{1 - \Delta t \cos(t_n)}. \tag{5}$$

Wyniki przedstawić w formie wykresu błędu globalnego $e(t)$ wraz z błędem uzyskanym **jawnym** schematem Eulera w 1. zadaniu.

Zadanie 3. Iteracja Newtona, niejawny schemat Eulera (15 pkt)

Pozostajemy przy **niejawnej** metodzie Eulera [równanie (4)]. Wyobraźmy sobie, że prawa strona równania (2) nie jest dana w postaci wzoru (a jest np. wynikiem bardziej złożonych rachunków lub pomiarów). Nie dojdziemy wtedy do równania (5).

Równanie niejawnego schematu Eulera dla pojedynczego kroku najlepiej jest rozwiązać jak równanie nieliniowe – metodą Newtona. Szukamy zera funkcji $F(u_n) = u_n - u_{n-1} - \Delta t f(t_n, u_n)$. Metoda Newtona prowadzi do iteracji[1]

$$u_n^{\mu} = u_n^{\mu-1} - \frac{u_n^{\mu-1} - u_{n-1} - \Delta t f(t_n, u_n^{\mu-1})}{1 - \Delta t f'_u(t_n, u_n^{\mu-1})}, \tag{6}$$

gdzie μ numeruje iteracje, natomiast f'_u to pochodna funkcji $f(t, u)$ liczona po zmiennej u. Dla n-tej chwili czasowej przyjmujemy na początku iteracji $u_n^0 = u_{n-1}$, czyli zaczynamy od $u_1^0 = u_0 = 1$. Kolejne iteracje wzoru (6) prowadzimy aż do uzyskania zbieżności - bierzemy pod uwagę np. 6 cyfr znaczących. Zastosować metodę dla f z równania (2) i rozwiązać je. Należy narysować dwa wykresy:

- błąd $e(t)$ wraz z błędami dla jawnego i niejawnego schematu Eulera z zadań 1. i 2; czy któraś z metod okazała się dokładniejsza?
- liczbę iteracji, które program przeprowadził aż do uzyskania zbieżności, w funkcji czasu.

---

[1] Oznacza to, że należy zastosować dodatkową pętlę dla każdej chwili czasowej $t_n \in [0, 4\pi]$ z implementacją metody Newtona. Pętlę wewnętrzną przerywamy po uzyskaniu zbieżności - tj. gdy wartość u_n^{μ} z iteracji na iterację nie zmienia się znacząco (z zadaną dokładnością).

Równanie różniczkowe zwyczajne pierwszego rzędu (1) z warunkiem początkowym $u(t=0)=u_0$, rozwiązujemy przy pomocy wybranego jednokrokowego schematu różnicowego, który pozwala na wyliczenie $u(t+\Delta t)$, jeśli znamy $u(t)$:

$$u(t+\Delta t) = u(t) + \Delta t F(t, u(t), \Delta t, f(t,u)) + O(\Delta t^n), \tag{7}$$

gdzie ostatni wyraz oznacza błąd lokalny rzędu n (dla jawnego Eulera $\mathbf{n}=\mathbf{2}$). Wykorzystamy znajomość parametru n do:

1. podniesienia dokładności schematu;
2. opracowania algorytmu automatycznego doboru kroku czasowego.

Obydwa zabiegi wykorzystują porównanie wyniku uzyskanego w pojedynczym i długim kroku $2\Delta t$ z dokładniejszym wynikiem uzyskanym w dwóch krótszych krokach Δt. Zastosujemy notację:

- u_1 - wynik numeryczny uzyskany w <u>pojedynczym, długim kroku $2\Delta t$</u>;
- u_{12} - (pomocniczy) wynik numeryczny uzyskany w <u>pierwszym krótkim kroku Δt</u>;

  u_2 - wynik numeryczny uzyskany w <u>drugim krótkim kroku Δt</u> (obliczony na podstawie u_{12}).

Rozwiązanie dokładne w chwili $t+2\Delta t$ różni się od u_1 numerycznego uzyskanego z długim krokiem $2\Delta t$ o błąd lokalny

$$u(t+2\Delta t) = u_1 + O([2\Delta t]^n) = u_1 + C(2\Delta t)^n + O([\Delta t]^{n+1}). \tag{8}$$

Bardziej precyzyjne przybliżenie uzyskamy w dwóch krótszych krokach: licząc z krokiem Δt najpierw $u_{12} = u(t+\Delta t)$, a następnie (wykorzystując znajomość u_{12}) $u_2 = u(t+2\Delta t)$, popełniamy dwukrotnie błąd $C(\Delta t)^n$

$$u(t+2\Delta t) = u_2 + 2C(\Delta t)^n + O([\Delta t]^{n+1}).[2] \tag{9}$$

Odejmując stronami (8) i (9) wyliczymy stałą błędu

$$C = \frac{u_2 - u_1}{2(2^{n-1}-1)\Delta t^n}. \tag{10}$$

Zgodnie z (10) szacujemy, że błąd obcięcia wykonany w dwóch krokach Δt wyniósł

$$E = 2C(\Delta t)^n = \frac{u_2 - u_1}{2^{n-1}-1}. \tag{11}$$

Poprawiając u_2 z równania (9) dostaniemy przybliżenie poprawione

$$u_2' = u_2 + \frac{u_2 - u_1}{2^{n-1}-1} + O(\Delta t^{n+1}). \tag{12}$$

[2] Stosujemy tutaj przybliżenie zakładające, że stała błędu C jest identyczna w obydwu krokach - patrz wykład.

Wartość u_2' wykorzystujemy w rachunkach dla późniejszych chwil czasowych. Równanie (12) daje nam schemat różnicowy o podniesionym o jeden rzędzie błędu lokalnego. Zabieg szacowania błędu przy pomocy rachunków z różnymi krokami całkowania nazywany jest ekstrapolacją Richardsona.[3]

Zadanie 4. Eliminacja błędu przy pomocy ekstrapolacji Richardsona (20 pkt)

Wzór (12) znacząco poprawia precyzję rozwiązania numerycznego. Wracamy do równania różniczkowego

$$\frac{du}{dt} = u \cdot \cos(t). \tag{13}$$

W 1. zadaniu rozwiązaliśmy je numerycznie przy pomocy jawnego schematu Eulera ($\mathbf{n = 2}$). z krokiem $\Delta t = \frac{\pi}{400}$, warunkiem początkowym $u_0 = 1$ i przedziałem czasowym $t \in [0, 4\pi]$. Do zaimplementowanego algorytmu należy wprowadzić eliminację błędu przez ekstrapolację Richardsona według wzoru (12). Powtórzyć rachunek dla błędu globalnego $e(t)$ i narysować go w funkcji czasu wraz z błędem z zadania 1.

Wskazówka: ekstrapolacja Richardsona spowoduje, że w pliku wynikowym obliczone wartości numeryczne będą pojawiać się co $2\Delta t$.

Zadanie 5. Algorytm automatycznego doboru kroku czasowego (30 pkt)

Ekstrapolacji Richardsona można użyć również do kontroli (zmiany w trakcie obliczeń) kroku czasowego Δt, tak żeby błędy obcięcia nie przekraczały pewnej zadanej wartości tol (uwaga: w tym zadaniu **nie** eliminujemy błędu, to jest **nie** stosujemy wzoru (12); błąd tylko monitorujemy według wzoru (11)).

W trakcie obliczeń sprawdzamy na bieżąco oszacowanie błędu $E = \frac{u_2 - u_1}{2^{n-1}-1}$. Jeśli $|E| < tol$ rozwiązanie $u_2 = u(t + 2\Delta t)$ akceptujemy, ale zwiększamy krok czasowy do dalszego całkowania. Jeśli natomiast $|E| > tol$: zmniejszamy Δt i powtarzamy obliczenia. Zmianę kroku czasowego w obydwu przypadkach obsłuży nam wzór

$$\Delta t_{\text{nowy}} = \left(\frac{S \cdot tol}{|E|} \right)^{1/n} \Delta t, \tag{14}$$

gdzie czynnik $S < 1$ wprowadzamy dla bezpieczeństwa.

Będziemy sprawdzać błąd obcięcia dla równania (13) z tolerancją $tol = 10^{-5}$. Przyjąć $S = 0.75$ i rozwiązać równanie jawną metodą Eulera zmodyfikowaną przez algorytm automatycznego doboru kroku. Powinniśmy otrzymać poprawne wyniki z dokładnością zdefiniowaną przez tol niezależnie od tego, z jakim krokiem czasowym wystartujemy - zacznijmy więc od dużego $\Delta t_0 = 5\pi$, aby się o tym przekonać. Zbadać, jak algorytm ustawia krok czasowy w zależności od $u(t)$, tj. przedstawić na wspólnym wykresie dobrany krok $\Delta t(t)$ i rozwiązanie $u(t)$.

[3]ekstrapolujemy oszacowanie błędu do $\Delta t = 0$.

Zadanie 6. Schemat Rungego-Kutty (15 pkt)

W dalszej części laboratorium rozwiążemy układ równań różniczkowych zwyczajnych o postaci ogólnej:

$$\frac{du^1}{dt} = f^1(t, u^1, u^2) \tag{15}$$

$$\frac{du^2}{dt} = f^2(t, u^1, u^2). \tag{16}$$

przy pomocy jawnego schematu RK4.

Liczymy kolejno dla $i = 1, 2$

$$k_1^i = f^i(t_{n-1}, u_{n-1}^1, u_{n-1}^2) \tag{17}$$

następnie dla $i = 1, 2$

$$k_2^i = f^i(t_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}, u_{n-1}^1 + \frac{\Delta t k_1^1}{2}, u_{n-1}^2 + \frac{\Delta t k_1^2}{2}) \tag{18}$$

potem

$$k_3^i = f^i(t_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}, u_{n-1}^1 + \frac{\Delta t k_2^1}{2}, u_{n-1}^2 + \frac{\Delta t k_2^2}{2}) \tag{19}$$

później

$$k_4^i = f^i(t_{n-1} + \Delta t, u_{n-1}^1 + \Delta t k_3^1, u_{n-1}^2 + \Delta t k_3^2) \tag{20}$$

w końcu

$$u_n^i = u_{n-1}^i + \frac{\Delta t}{6}\left(k_1^i + 2k_2^i + 2k_3^i + k_4^i\right). \tag{21}$$

Jako przykład weźmy oscylator harmoniczny:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= y(t) \\ \frac{dy}{dt} &= -ax(t). \end{aligned} \tag{22}$$

z warunkiem początkowym $x_0 = 0$, $y_0 = 1$. Rozwiązać układ w przedziale $t \in [0, 4\pi]$ z krokiem czasowym $\Delta t = 0.1$. Przyjmujemy $a = 1$. Narysować wynik $y(x)$ oraz błąd $e(t)$ dla zmiennej x (rozwiązanie analityczne: $x(t) = \sin(t)$).