Numerické řešení diferenciálních rovnic

Mirko Navara
http://cmp.felk.cvut.cz/˜navara/
Centrum strojového vnímání, katedra kybernetiky FEL ČVUT
Karlovo náměstí, budova G, místnost 104a

http://math.feld.cvut.cz/nemecek/nummet.html

15. prosince 2010

Omezení: obyčejné (nikoli parciální) diferenciální rovnice, Cauchyho počáteční úloha, pouze jedna diferenciální rovnice 1. řádu
Úloha: Na intervalu $\langle x_0, x_n\rangle$ máme řešit diferenciální rovnici

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

s počáteční podmínkou

$$y(x_0) = y_0\,,$$

kde f je funkce dvou reálných proměnných a $y_0 \in \mathbb{R}$.

Poznámka: Pokud f nezávisí na y, tj. $f(x,y) = g(x)$, dostáváme numerickou integraci jako speciální případ řešení diferenciální rovnice

$$y'(x) = g(x)$$

Existence a jednoznačnost řešení

Není obecně zaručena:
Příklad: Uvažujme diferenciální rovnici s počáteční podmínkou:

$$y'(x) = \sqrt[3]{y(x)}, \qquad y(0) = 0\,,$$

kde třetí odmocninu považujeme za reálnou funkci definovanou i pro záporný argument. Má řešení např. $y(x) = 0$ a $y(x) = \pm\left(\frac{2}{3}\,x\right)^{\frac{3}{2}}$.
Věta: Nechť funkce f je definovaná a spojitá na $\langle x_0, x_n\rangle \times \mathbb{R}$ (tj. pro všechna $x \in \langle x_0, x_n\rangle$, $y \in \mathbb{R}$).
Nechť je splněna **Lipschitzova podmínka**

$$\exists L \in \mathbb{R}\ \forall x \in \langle x_0, x_n\rangle\ \forall y_1, y_2 \in \mathbb{R} : |f(x, y_1) - f(x, y_2)| \le L\,|y_1 - y_2|\,.$$

Pak řešení naší úlohy na intervalu $\langle x_0, x_n\rangle$ existuje a je jednoznačné.
Postačující podmínka: $\frac{\partial f}{\partial y}$ spojitá a omezená na $\langle x_0, x_n\rangle \times \mathbb{R}$.

Interpretace úlohy a princip řešení

Poznámka: Ekvivalentní formulace úlohy: řešení

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(t, y(t))\,dt$$

lze chápat jako integrál (neznámé) funkce $g(t) = f(t, y(t))$ jedné proměnné nebo křivkový integrál známé funkce f přes (neznámou) křivku s parametrizací $(t, y(t))$, $t \in \langle x_0, x_n\rangle$.
Interval $\langle x_0, x_n\rangle$ rozdělíme na n dílčích intervalů délky $h = (x_n - x_0)/n$. Získáme **uzlové body** $x_i = x_0 + i\,h$, $i = 0, \ldots, n$.
Správné hodnoty řešení v uzlových bodech, $y(x_i)$, nahradíme odhady y_i.

Hodnoty derivace: $f_i = f(x_i, y_i)$.

Obecný postup řešení

Generujeme posloupnost y_i, $i = 0, \dots, n$. V kroku $i+1$ počítáme z odhadů $y_0, \dots, y_i$ odhad y_{i+1}. Přesné řešení:

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t, y(t))\, dt$$

odhadujeme pomocí

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t, y(t))\, dt\,.$$

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i\,.$$

Jednotlivé metody se liší pouze odhadem Δy_i.

Rungovy-Kuttovy metody 1: Eulerova metoda

Je zobecněním metody levého odhadu; funkci $f(t, y(t))$ nahrazujeme její hodnotou $f(x_i, y_i)$ v bodě x_i

$$\Delta y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x_i, y_i)\, dt = h\, f(x_i, y_i)\,,$$

$$y_{i+1} = y_i + h\, f(x_i, y_i) = y_i + h\, f_i\,.$$

Geometrický význam: $f_i = f(x_i, y_i)$ je směrnice úsečky vedené body (x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1}).

Odhad chyby

Taylorův rozvoj funkce y se středem v x_0 vyhodnotíme v bodě x_1:

$$y(x_1) = y(x_0) + h\, y'(x_0) + \frac{h^2}{2}\, y''(\xi)\,,$$

kde $\xi \in \langle x_0, x_1 \rangle$.

$$y(x_1) = \underbrace{y(x_0) + h\, f(x_0, y_0)}_{y_1} + \frac{h^2}{2}\, y''(\xi)\,,$$

$$y(x_1) - y_1 = \frac{h^2}{2}\, y''(\xi)\,.$$

Chyba na konci prvního kroku je úměrná h^2.
V dalších krocích vycházíme z počáteční podmínky, která není přesná. Přesto lze za jistých podmínek odvodit, že chyba je zhruba úměrná h^2 a počtu kroků $n = \frac{x_n - x_0}{h}$.
Chyba na konci daného intervalu je úměrná $\frac{1}{h}\, h^2 = h \quad \Rightarrow$ metoda 1. řádu.

Rungovy-Kuttovy metody 2: První modifikace Eulerovy metody

Je zobecněním obdélníkové metody; funkci $f(t, y(t))$ v ní nahradíme opět hodnotou v bodě $\dfrac{x_i + x_{i+1}}{2} = x_i + \dfrac{h}{2}$.
Jako druhý argument funkce f použijeme výsledek pomocného kroku poloviční délky (Eulerovou metodou):

$$\eta_i = y_i + \frac{h}{2}\, f_i\,.$$

$$f(t, y(t)) \approx f(x_i + \frac{h}{2}, \eta_i)$$

$$\Delta y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f\left(x_i + \frac{h}{2}, \eta_i\right)\, dt = h\, f\left(x_i + \frac{h}{2}, \eta_i\right)\,.$$

Metoda 2. řádu.

Druhá modifikace Eulerovy metody (Heunova metoda)

Je zobecněním lichoběžníkové metody integrace; funkci $f(t, y(t))$ nahradíme lineární funkcí, proloženou hodnotami v krajních bodech intervalu:

v x_i: $f_i = f(x_i, y_i)$,
v x_{i+1}: neznalost y-ové souřadnice řešíme pomocným krokem (délky h Eulerovou metodou):

$$\theta_i = y_i + h\, f_i\,.$$

Funkci $f(t, y(t))$ nahradíme lineární funkcí, jejíž graf prochází body $\big(x_i, f(x_i, y_i)\big)$, $\big(x_{i+1}, f(x_{i+1}, \theta_i)\big)$.

$$\Delta y_i = \frac{h}{2}\left(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \theta_i)\right).$$

Metoda 2. řádu.

Rungovy-Kuttovy metody 4: Rungova-Kuttova metoda 4. řádu

Je zobecněním Simpsonovy metody; nejprve vypočteme pomocné body a hodnoty derivace v nich,

$$\begin{aligned}
k_{i,1} &= f(x_i, y_i)\,,\\
k_{i,2} &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}\, k_{i,1}\right)\,,\\
k_{i,3} &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}\, k_{i,2}\right)\,,\\
k_{i,4} &= f(x_i + h, y_i + h\, k_{i,3})\,.
\end{aligned}$$

Integrál nahradíme lineární kombinací těchto hodnot:

$$\Delta y_i = \frac{h}{6}\left(k_{i,1} + 2k_{i,2} + 2k_{i,3} + k_{i,4}\right).$$

Rungovy-Kuttovy metody 5: Obecné Rungovy-Kuttovy metody

Odhadují integrál $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t, y(t))\, dt$ z několika hodnot funkce f v bodech, získaných z výchozích hodnot x_i, y_i a pomocných kroků. Tyto hodnoty jsou zkombinovány tak, aby se vykompenzovaly chyby nejnižších řádů.

Vícekrokové metody

Metody

- jednokrokové: využívají x_i, y_i a $f_i = f(x_i, y_i)$
  (např. Rungeovy-Kuttovy),
- vícekrokové: využívají i výsledky předcházejících kroků, tj. x_j, y_j a $f_j = f(x_j, y_j)$, $j = i, i-1, \ldots, i-s+1$
  (pro s-krokovou metodu).

Vícekrokové metody dovolují zvýšit řád metody bez pomocných kroků.
Nicméně k nastartování s-krokové metody potřebujeme s hodnot $y_0, y_1, \ldots, y_{s-1}$. Ty získáváme **startovací metodou** (některou z jednokrokových metod).

Adamsovy-Bashforthovy metody (explicitní)

s hodnotami derivace $f_i, f_{i-1}, \ldots, f_{i-s+1}$
v uzlových bodech $x_i, x_{i-1}, \ldots, x_{i-s+1}$
proložíme interpolační polynom φ_i a ten integrujeme místo $f(t, y(t))$:

$$\Delta y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i(t)\, dt\,.$$

Není potřeba počítat φ_i, neboť

$$\Delta y_i = h \sum_{j=0}^{s-1} w_j\, f_{i-j}\,,$$

kde w_j jsou předem známé koeficienty.
Polynomem aproximujeme derivaci $y'(t) = f(t, y(t))$, nikoli řešení, $y(t)$!

Pro $s = 1$:
$\varphi_i = f_i$ je konstantní $\Rightarrow$ Eulerova metoda.
Pro $s = 2$:
φ_i je lineární polynom proložený body (x_i, f_i), (x_{i-1}, f_{i-1}),

$$\varphi_i(t) = f_i + \frac{f_i - f_{i-1}}{h}\,(t - x_i)$$

$$\Delta y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i(t)\,dt = h\,f_i + \frac{h}{2}\,(f_i - f_{i-1}) = \frac{h}{2}\,(3f_i - f_{i-1})\,.$$

Pro $s = 3$:

$$\Delta y_i = \frac{h}{12}\,(23f_i - 16f_{i-1} + 5f_{i-2})\,,$$

Pro $s = 4$:

$$\Delta y_i = \frac{h}{24}\,(55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3})\,.$$

Řád metody je s=počet bodů použitých v aproximaci.
Výhoda:

- jednoduchost

Nevýhody:

- různá znaménka koeficientů ($\Rightarrow$ zaokrouhlovací chyby)
- chyba metody způsobená extrapolací polynomem

$\Rightarrow$ snaha vyhnout se extrapolaci

Adamsovy-Moultonovy metody (implicitní)

Pravou stranu $f(t, y(t))$ aproximujeme interpolačním polynomem φ_i proloženým hodnotami $f_i, f_{i-1}, \ldots, f_{i-s+1}$ a hodnotou v bodě x_{i+1}, tj. $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})\,.$
Opět se redukuje na tvar

$$y_{i+1} - y_i = \Delta y_i = h \sum_{j=-1}^{s-1} w_j\, f_{i-j}\,,$$

kde w_j jsou předem vypočtené koeficienty (zde jiné).
Dostáváme rovnici

$$y_{i+1} = y_i + h\,w_{-1}\,f(x_{i+1}, y_{i+1}) + h \sum_{j=0}^{s-1} w_j\, f_{i-j}$$

pro neznámou hodnotu y_{i+1}, která je tímto určena **implicitně**.

Pro $s = 1$: φ_i je lineární polynom proložený body (x_i, f_i), (x_{i+1}, f_{i+1}), tj.

$$\varphi_i(t) = f_i + \frac{f_{i+1} - f_i}{h}\,(t - x_i)\,.$$

$$\Delta y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i(t)\,dt = \frac{h}{2}\,(f_{i+1} + f_i)\,,$$

po dosazení $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$

$$y_{i+1} - y_i = \frac{h}{2}\,\big(f(x_{i+1}, y_{i+1}) + f_i\big)\,.$$

Pro $s = 2$:

$$\Delta y_i = \frac{h}{12}\,\big(5f(x_{i+1}, y_{i+1}) + 8f_i - f_{i-1}\big)\,,$$

Pro $s = 3$:

$$\Delta y_i = \frac{h}{24}\left(9f(x_{i+1}, y_{i+1}) + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}\right).$$

Řád metody je $s+1$=počet bodů použitých v aproximaci.
Výhoda:

- vyšší přesnost

Nevýhody:

- obtížné řešení implicitní rovnice (zřídka možné exaktně, numerické řešení zvyšuje složitost)
- i chyba metody způsobená interpolací polynomem může být značná

Metody prediktor-korektor

Základem je **korektor**, což je některá z implicitních metod, v níž se příslušná rovnice řeší numericky.
V j-té iteraci z ní vypočítáme odhad $y_{i+1,j}$ hodnoty y_{i+1}, přičemž na pravé straně použijeme odhad $y_{i+1,j-1}$ získaný v předchozí iteraci:

$$y_{i+1,j} = y_i + h\sum_{j=0}^{s-1} w_j\, f_{i-j} + h\, w_{-1}\, f(x_{i+1}, y_{i+1,j-1}).$$

Počáteční odhad $y_{i+1,0}$ najdeme z výsledků předchozích kroků (event. z počátečních podmínek) jinou metodou, zvanou **prediktor**, např. některou z explicitních metod.

Řídicí mechanismus

P = prediktor (**Predictor**)
C = korektor (**Corrector**)
E = vyhodnocení derivace (**Evaluation**)
Nejčastější možnosti:

- cyklus korektoru provádět tak dlouho, dokud není rozdíl $y_{i+1,j} - y_{i+1,j-1}$ dostatečně malý,
- konstantní počet k opakování korektoru, $\mathrm{P(EC)}^k\mathrm{E}$,
- jediný průchod korektorem, PECE.

Adamsovy metody

Prediktor: Adamsova-Bashforthova metoda
Korektor: Adamsova-Moultonova metoda
Příklad: Nejjednodušší varianta Adamsovy metody, $s = 1$:
Prediktor: Eulerova metoda (1. řádu)

$$y_{i+1,0} = y_i + h\, f_i.$$

Korektor: Adamsova-Moultonova metoda 2. řádu

$$y_{i+1,j+1} = y_i + \frac{h}{2}\left(f_i + f(x_{i+1}, y_{i+1,j})\right).$$

Volba startovací metody (jejího řádu)
Volba kroku

Richardsonova extrapolace při řešení diferenciálních rovnic

$\tilde{y}(x, h)$ ... numerické řešení v bodě x, získané s krokem h
$\tilde{y}(x, 2h)$ ... numerické řešení v bodě x, získané s krokem $2h$
(zde $q = 2$)

Chyba odhadu $\tilde{y}(x,h)$ bude zhruba $2^p\times$ menší než chyba odhadu $\tilde{y}(x,2h)$
$\Rightarrow$ **odhad chyby výsledku $\tilde{y}(x,h)$ metodou polovičního kroku**:

$$\tilde{y}(x,h) - y(x) \approx \frac{1}{2^p-1}\left(\tilde{y}(x,2h) - \tilde{y}(x,h)\right).$$

Odhad výsledku zpřesněný Richardsonovou extrapolací:

$$y(x) \approx \tilde{y}(x,h) + \frac{1}{2^p-1}\left(\tilde{y}(x,h) - \tilde{y}(x,2h)\right).$$

Richardsonova extrapolace

- pasivní
- aktivní