Szacowanie błędu lokalnego w metodach jednokrokowych

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

Po co?

1) W rachunkach numerycznych musimy znać oszacowanie błędu

2) Gdy oszacowanie jest w miarę dokładne: można poprawić wynik

3) Aby ustawić krok czasowy tak, aby błąd był akceptowalny

Oszacowanie błędu lokalnego w metodach jednokrokowych

W każdym kroku generujemy nowy błąd w rachunkach.
Znamy jego rząd.

$$u(t_n) = u(t_{n-1}) + \Delta t f(t_{n-1}, u_{n-1}) + \frac{\Delta t^2}{2}\left[f'_t + f'_u f\right]_{(t_{n-1}, u_{n-1})} + \frac{\Delta t^3}{6} u'''(\xi_n)$$

dla RK: wstawialiśmy rozwiązanie dokładne do schematu i je rozwijaliśmy w szereg T.

$$u(t_n) = u(t_{n-1}) + \Delta t\left[b_1 f + b_2\left(f + c\Delta t f'_t + a\Delta t f f'_u\right)\right] + O(\Delta t^3)$$

wybór b_1=0, b_2=1, c=1/2, a=1/2 dawał RK2 punktu środkowego

$$u_{n+1} = u_n + \Delta t f(t_n + \frac{\Delta t}{2}, u_n + \frac{\Delta t}{2} f(t_n, u_n))$$

Rozwijając do jednego rzędu wyżej z Δt uzyskamy oszacowanie błędu lokalnego $d_n = u(t_n) - u_n$ [przy założeniu, że $u(t_{n-1}) = u_{n-1}$]

$$d_n = \frac{\Delta t^3}{6}\left[3(f''_{tt} + 2f f''_{tu} + f^2 f''_{yy}) - (f'_t f'_y + f(f'_y)^2)\right]_{t_{n-1}, u_{n-1}} + O(\Delta t^4)$$

świetny wzór choć mało praktyczny

Oszacowanie błędu (lokalnego) w metodach jednokrokowych

metodą rzędu *p* z chwili t_{n-1} wykonujemy krok do t_n

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

$$u(t_n) - u_n = d_n$$

$$d_n = C_n \Delta t^{p+1} + O(\Delta t^{p+2})$$

może zależeć od t_{n-1} oraz u_{n-1}, ale nie zależy od Δt

$$\boxed{d_n = \frac{\Delta t^3}{6}\left[3(f''_{tt} + 2ff''_{tu} + f^2 f''_{yy}) - (f'_t f'_y + f(f'_y)^2)\right]_{t_{n-1},u_{n-1}} + O(\Delta t^4)}$$

folia wcześniej

szacowanie błędu:

1) ekstrapolacja Richardsona (*step doubling*)
2) osadzanie (*embedding*)

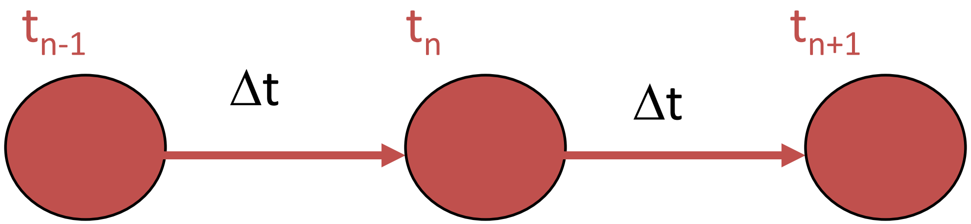
ekstrapolacja
Richardsona

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

$$u(t_n) - u_n = d_n$$

$$d_n = C_n \Delta t^{p+1} + O(\Delta t^{p+2})$$

dwa kroki Δt: dostaniemy lepsze oszacowanie u(t_{n+1})



jeden krok 2Δt: dostaniemy gorsze oszacowanie u(t_{n+1})

szacujemy C_n z porównania obydwu rozwiązań

ekstrapolacja
Richardsona

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

błąd lokalny $u(t_n)-u_n=d_n$ jest:

$$d_n = C_n \Delta t^{p+1} + O(\Delta t^{p+2})$$

wykonujemy krok następny od t_n do t_{n+1}

$$u_{n+1} = u_n + \Delta t \Phi(t_n, u_n, \Delta t)$$

odchylenie wyniku numerycznego od dokładnego $u(t_{n+1})-u_{n+1}= \gamma d_n + d_{n+1}$

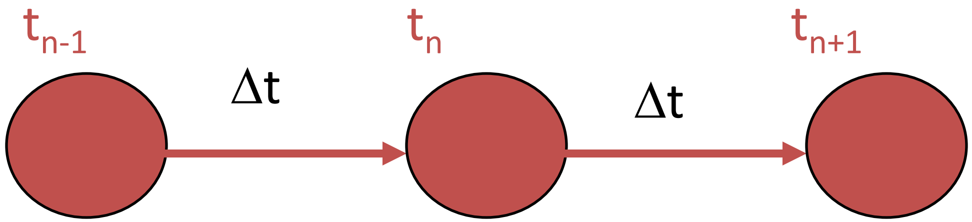
1) zakładamy, że krok jest na tyle mały, że stała błędu się nie zmienia $C_n \approx C_{n+1}$
(lub, ze w jednym kroku zmienia się o $O(\Delta t)$]

wtedy błąd lokalny popełniony w chwili t_{n+1} jest $d_{n+1} \approx d_n$.

2) gdy krok mały: współczynnik wzmocnienia błędu $\gamma \approx 1$
(błąd popełniony w kroku pierwszym nie jest istotnie wzmacniany)
Przy tym założeniu: błąd po drugim kroku – suma błędów $\gamma\ d_n+d_{n+1} \approx 2d_n$,

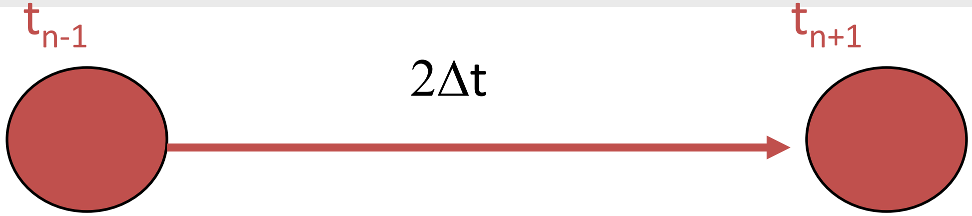
$$u(t_{n+1}) - u_{n+1} = 2C_n(\Delta t)^{p+1} + O(\Delta t)^{p+2}$$

ekstrapolacja Richardsona



$$u(t_{n+1}) - u_{n+1} = 2C_n(\Delta t)^{p+1} + O(\Delta t^{p+2})$$

to chwili t_{n+1} dojdziemy z t_{n-1} w pojedynczym kroku $2\Delta t$



dostaniemy gorsze oszacowanie $u(t_{n+1})$

$$\tilde{u}_{n+1} = u_{n-1} + 2\Delta t \Phi(t_{n-1}, u_{n-1}, 2\Delta t)$$
$$\tilde{d}_n = C_n(2\Delta t)^{p+1} + O((2\Delta t)^{p+2})$$
$$u(t_{n+1}) - \tilde{u}_{n+1} = C_n(2\Delta t)^{p+1} + O(2\Delta t^{p+2})$$

chcemy poznać C_n (to + znajomość p da nam oszacowanie błędu): odejmujemy niebieskie wzory tak aby wyeliminować rozwiązanie dokładne (nam niedostępne) ekstrapolacja Richardsona

$$u(t_{n+1}) - u_{n+1} = 2C_n(\Delta t)^{p+1} + O(\Delta t^{p+2})$$

$$u(t_{n+1}) - \tilde{u}_{n+1} = C_n(2\Delta t)^{p+1} + O(2\Delta t^{p+2})$$

$$\downarrow$$

$$u_{n+1} - \tilde{u}_{n+1} = C_n\left[(2\Delta t)^{p+1} - 2(\Delta t)^{p+1}\right]$$

$$C_n = \frac{u_{n+1} - \tilde{u}_{n+1}}{(2\Delta t)^{p+1} - 2(\Delta t)^{p+1}}$$

$$u(t_{n+1}) - u_{n+1} = 2C_n(\Delta t)^{p+1} + O(\Delta t)^{p+2}$$

błąd wykonany po dwóch krokach Δt wynosi więc:

$$d = u(t_{n+1}) - u_{n+1} = \frac{u_{n+1} - \tilde{u}_{n+1}}{2^p - 1} + O(\Delta t^{p+2})$$

pierwszy wniosek: jeśli znamy rząd metody *p* to potrafimy go podnieść o jeden

$$u(t_{n+1}) = u_{n+1} + \frac{u_{n+1} - \tilde{u}_{n+1}}{2^p - 1} + O(\Delta t^{p+2})$$

ekstrapolacja Richardsona

$$u(t_{n+1}) = u_{n+1} + \frac{u_{n+1} - \tilde{u}_{n+1}}{2^p - 1} + O(\Delta t^{p+2})$$

podnosimy rząd dokładności metody
„algorytm"

$$\text{do } n = 1, N$$

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

$$u_{n+1} = u_n + \Delta t \phi(t_n, u_n, \Delta t)$$

$$\tilde{u}_{n+1} = u_{n-1} + 2\Delta t \phi(t_{n-1}, u_{n-1}, 2\Delta t)$$

$$u_{n+1} = u_{n+1} + \frac{u_{n+1} - \tilde{u}_{n+1}}{2^p - 1}$$

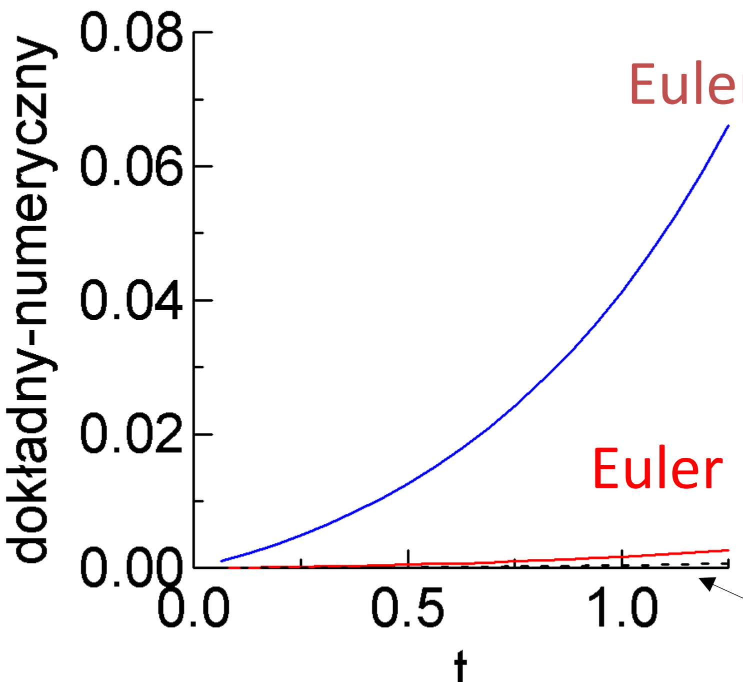
$$\text{enddo}$$

Przykład:

$$\frac{du}{dt} = u \quad \longrightarrow \quad \text{r. dokładne:} \quad u(t) = \exp(t)$$

$$u(0) = 1$$

$$\Delta t = \frac{1}{32}$$

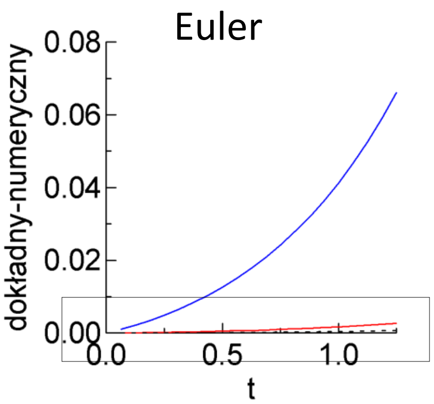


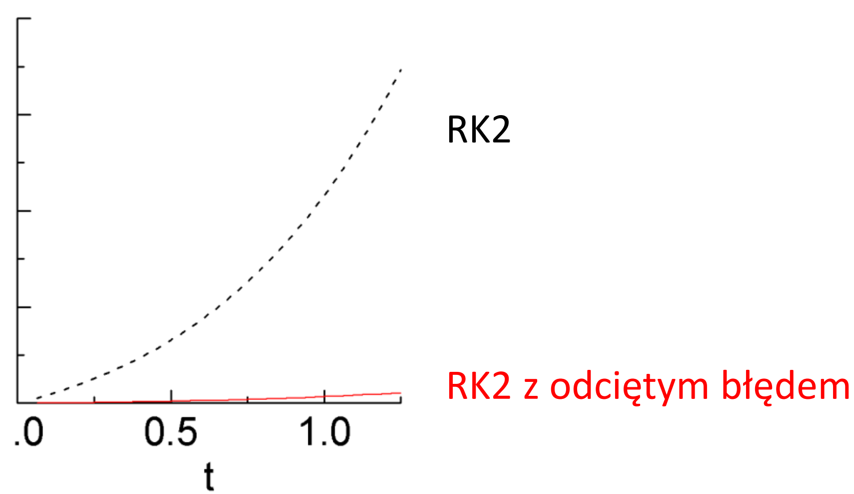
Euler (p=1) błąd lokalny $O(\Delta t^2)$

Euler po poprawce: błąd lokalny $O(\Delta t^3)$

kreski: RK2 punktu środkowego (p=2), b.lok. $O(\Delta t^3)$

znając rząd dokładności możemy radykalnie poprawić dokładność metody przy natdatku (50 procent) numeryki


Euler
dokładny-numeryczny
0.08
0.06
0.04
0.02
0.00
0.0
0.5
1.0
t


RK2
RK2 z odciętym błędem
.0
0.5
1.0
t

Oszacowanie błędu lokalnego w metodach jednokrokowych

1) ekstrapolacja Richardsona (*step doubling*)
2) **osadzanie (*embedding*)**

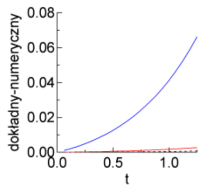
cel: szacujemy błąd lokalny metody rzędu *p*
przy pomocy lepszej metody, np. rzędu *p+1*
obydwie metody szacują rozwiązanie w tych samych chwilach czasowych

$$u_n^p = u_{n-1} + \Delta\phi_p(t_{n-1}, y_{n-1}, \Delta t) \qquad d_n^p = C_n^p(\Delta t)^p$$

$$u_n^{p+1} = u_{n-1} + \Delta\phi_{p+1}(t_{n-1}, y_{n-1}, \Delta t) \qquad d_n^{p+1} = C_n^{p+1}(\Delta t)^{p+1}$$

$$d_n^p = u(t_n) - u_n^p = u(t_n) - u_n^{p+1} + u_n^{p+1} - u_n^p = d_n^{p+1} + u_n^{p+1} - u_n^p$$

$$|d_n^p| \le |\cancel{d_n^{p+1}}| + |u_n^{p+1} - u_n^p|$$



co daje oszacowanie błędu gorszej metody

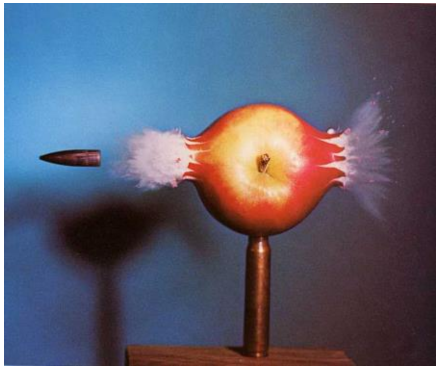
$$|d_n^p| \simeq |u_n^{p+1} - u_n^p|$$

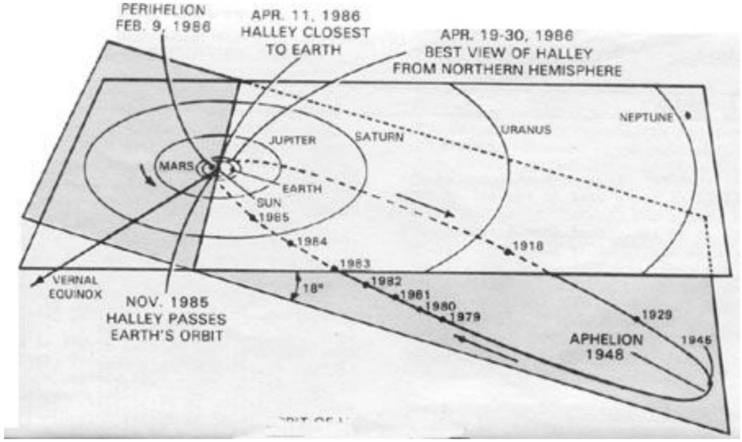
nie nadaje się do poprawiania schematu *p po cóż zresztą poprawiać gdy mamy p+1* celem szacowania błędu nie jest poprawa wyniku,

(dla poprawy zawsze można Δt zmienić)

lecz adaptacja Δt :

stały krok zawsze może okazać się zbyt wielki albo zbyt mały.





JAKI KROK CZASOWY SYMULACJI USTAWIĆ

gdy coś ciekawego zdarza się tylko czasem ?

Automatyczna kontrola kroku czasowego dla metod jednokrokowych

Program może sam dobierać krok czasowy w zależności od tego co dzieje się w symulacji.

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

Chcemy utrzymać błąd na poziomie zbliżonym do parametru *tol.*
nie większy aby zachować wymaganą dokładność,
nie mniejszy aby nie tracić czasu na rachunki zbyt dokładne

Szacujemy błąd lokalny E (ekstrapolacja Richardsona lub metody *embedding)*

$E=C[\Delta t]^{p+1}$

chcemy zmienić krok odpowiednio do naszych wymagań z Δt do Δt(nowy)

$tol=C[\Delta t(nowy)]^{p+1} \longrightarrow \Delta t(nowy)=(tol/E)^{1/(p+1)}\,\Delta t$

$\Delta t(nowy)=(S\ tol\,/E)^{1/(p+1)}\,\Delta t$ dla bezpieczeństwa S<1

<u>wzór zwiększy zbyt mały krok i vice versa</u>
uwaga: błąd jest szacowany, zawsze warto dorzucić sztywne ograniczenia na Δt

Automatyczna kontrola kroku czasowego dla metod jednokrokowych

symulacja ustawiająca krok czasowy może wyglądać np. tak:

u_0= warunek początkowy
t_0=0
n=1

do {

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

jeśli E<tol
{ tn:=tn+Δt
n:=n+1 (oznacza akceptację wyniku) }

$\Delta t := (S\ tol / E)^{1/(p+1)}\ \Delta t$

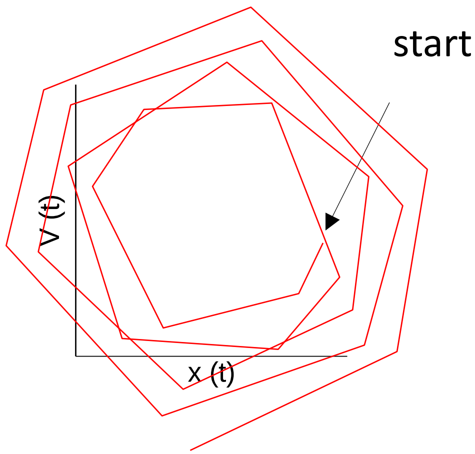
} while (t<T)

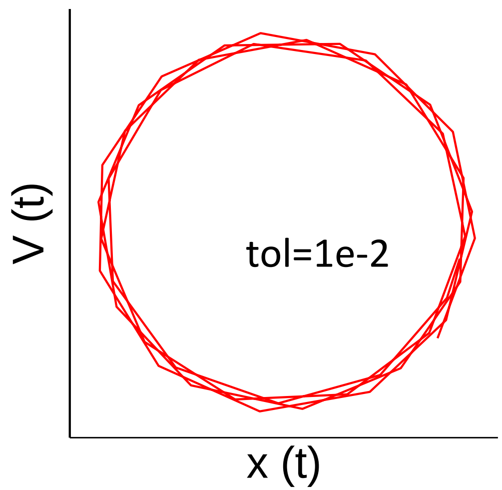
Przykład: oscylator harmoniczny
używane oszacowanie błędu z RK2
Uwaga: tutaj rozwiązania *nie poprawiamy* przez ekstrapolacje

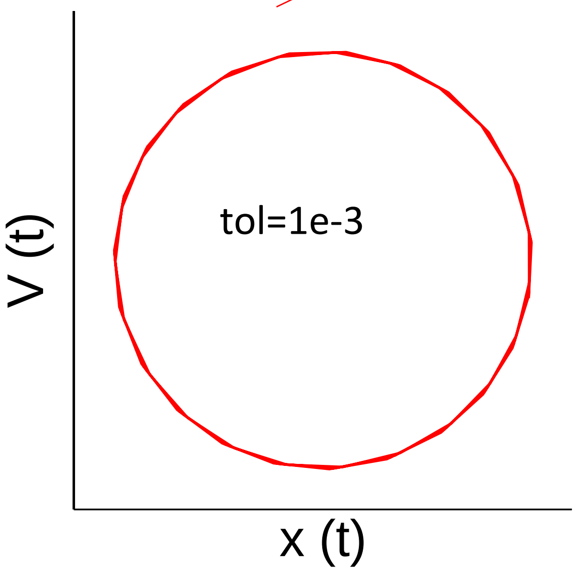
$$\frac{dx}{dt} = V(t) \quad x(0) = 1$$
$$\frac{dV}{dt} = -x(t) \quad V(0) = 0$$

tolerancja błędu obcięcia
tol=0.1

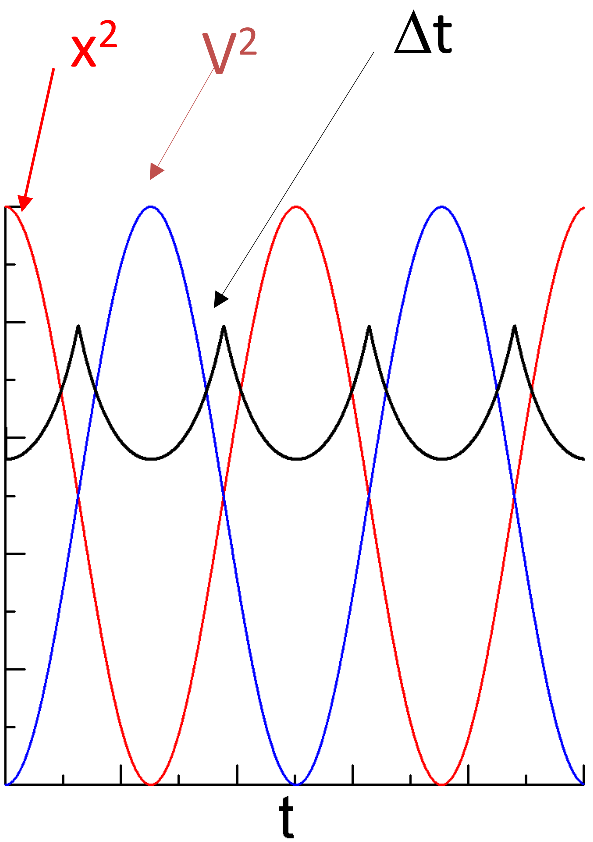
RK2



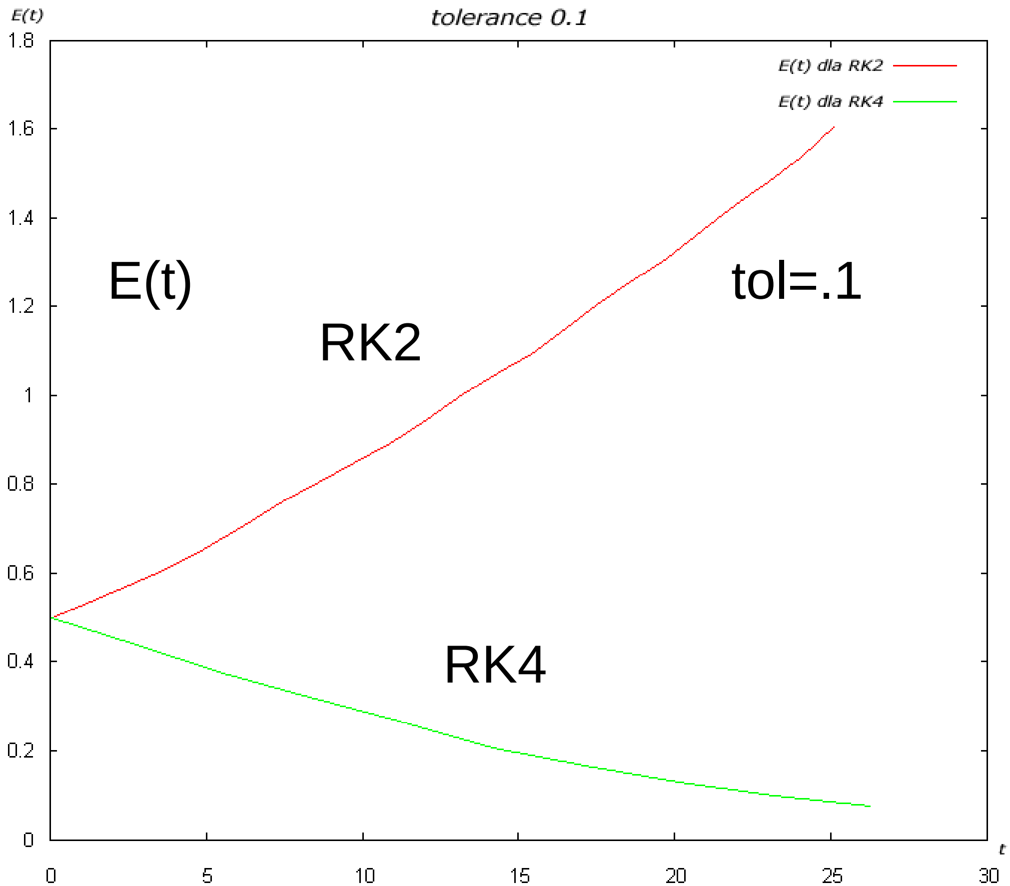




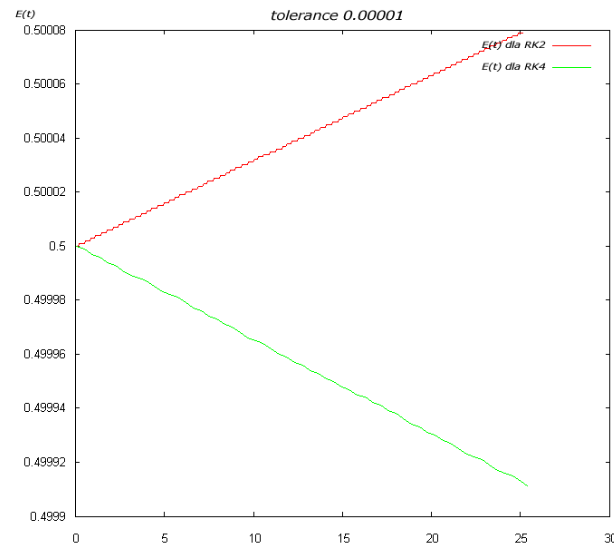
algorytm ustawia
minimalny
krok czasowy
gdy zmiany prędkości
lub położenia są maksymalne



wyniki Konrada Rekiecia



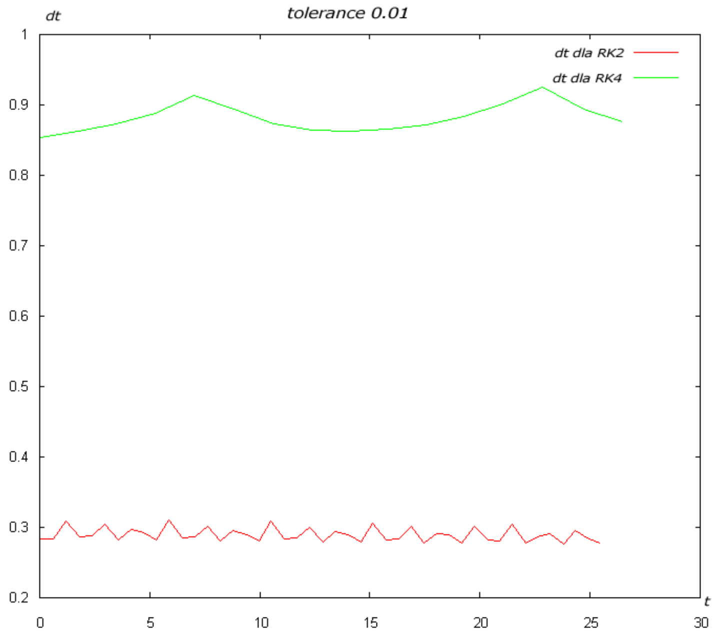
RK4 – spirala się skręca zamiast rozkręcać

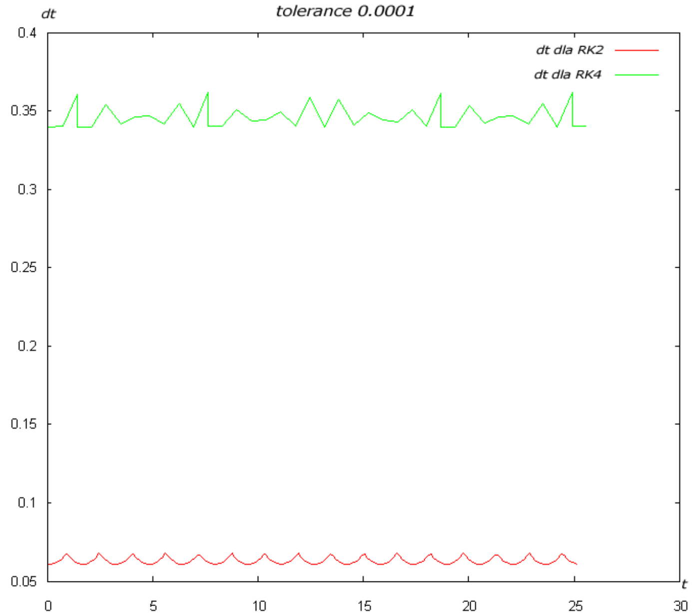


przy założonej tolerancji RK4 wcale nie jest dokładniejsze od RK2

... tylko pozwala stawiać dłuższe kroki

dt





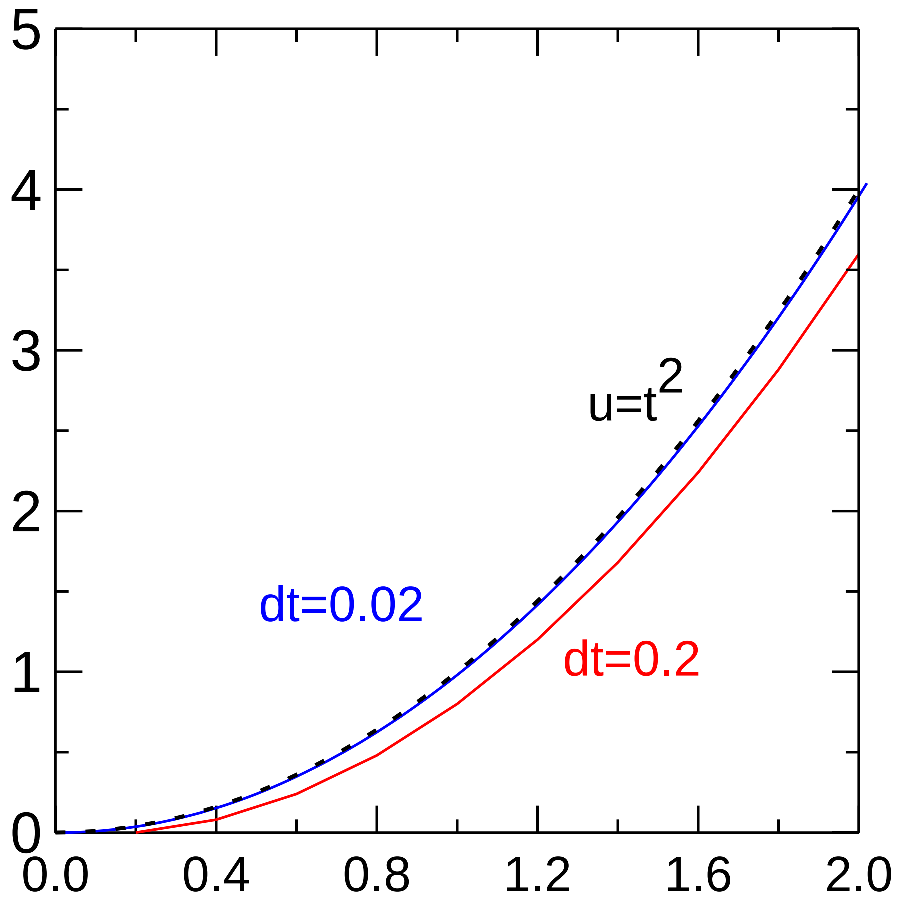
Problemy sztywne

$$\frac{du}{dt} = 2t$$

u(0)=0

$$u(t+dt) = u(t) + dt \times 2t$$

proste równanie traktowane jawnym schematem Eulera



prosty problem
nieco komplikujemy

$$u' = -\alpha(u - t^2) + 2t$$

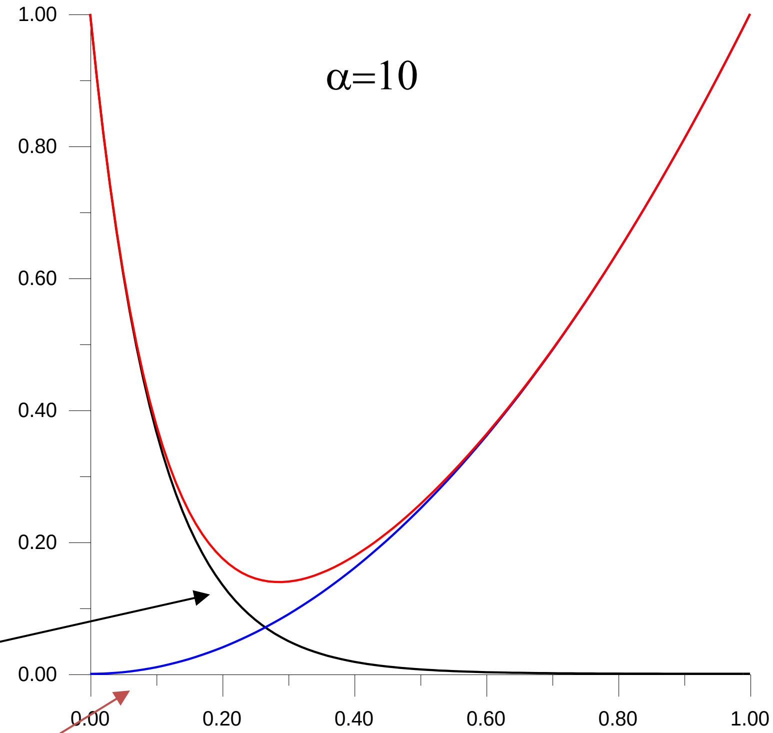
niech $\alpha >> 0$

$$u(0) = u_0$$

$$u(t) = \underbrace{u_0 \exp(-\alpha t)}_{\text{szybkozmienna składowa}} + \underbrace{t^2}_{\text{składowa wolnozmienna}}$$

szybkozmienna
składowa

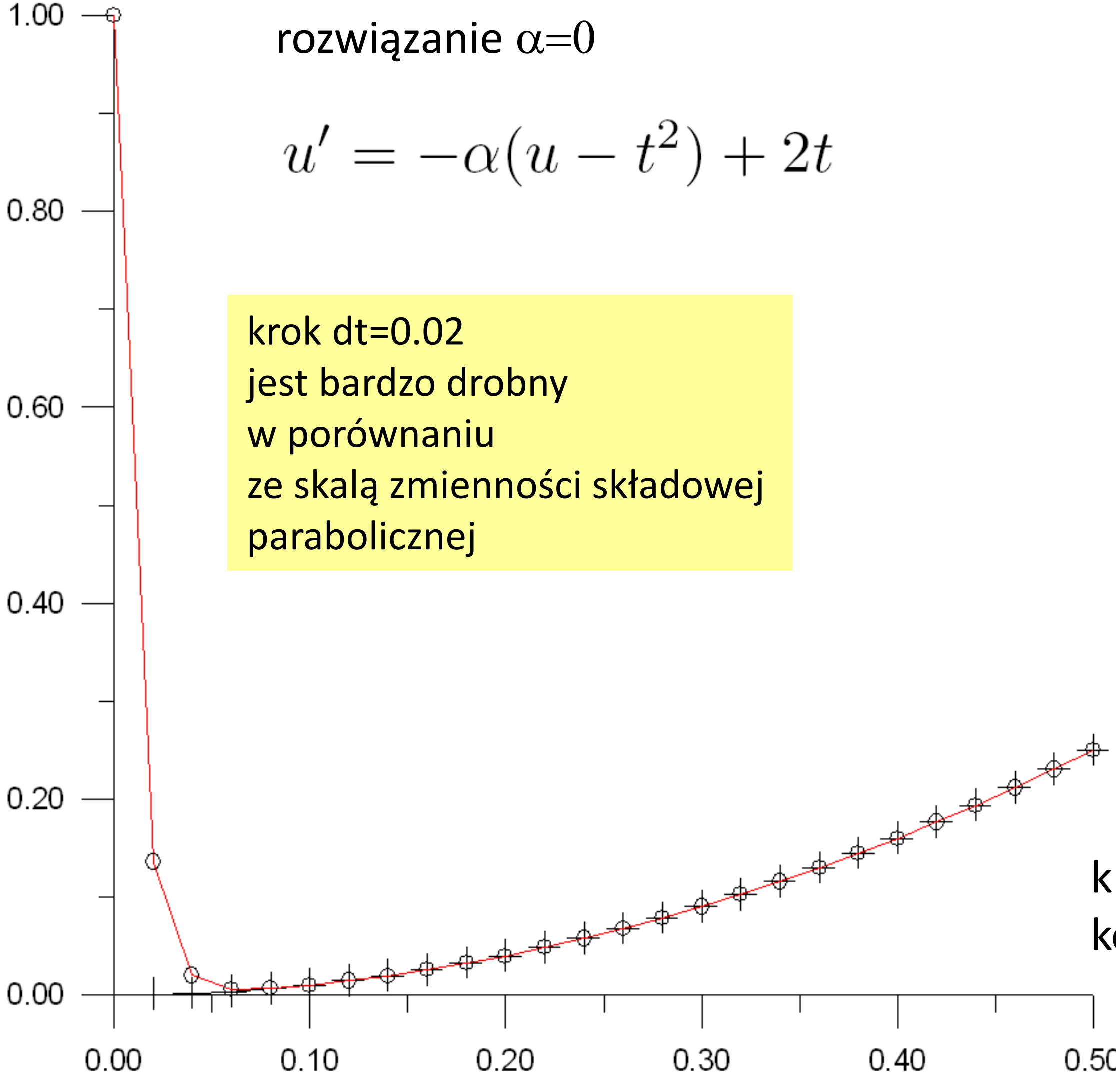
składowa
wolnozmienna



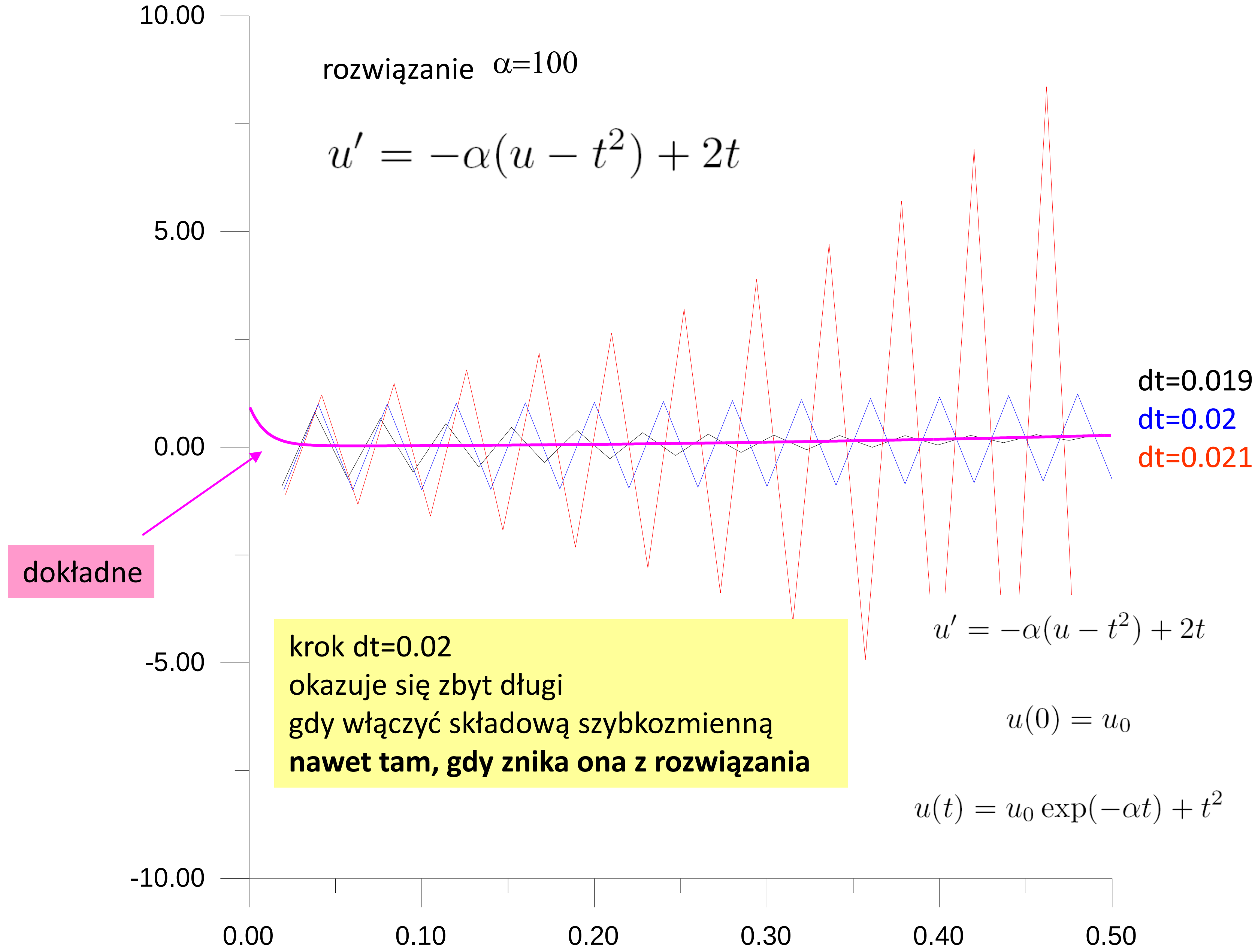
rozwiązanie α=0

$$u' = -\alpha(u - t^2) + 2t$$

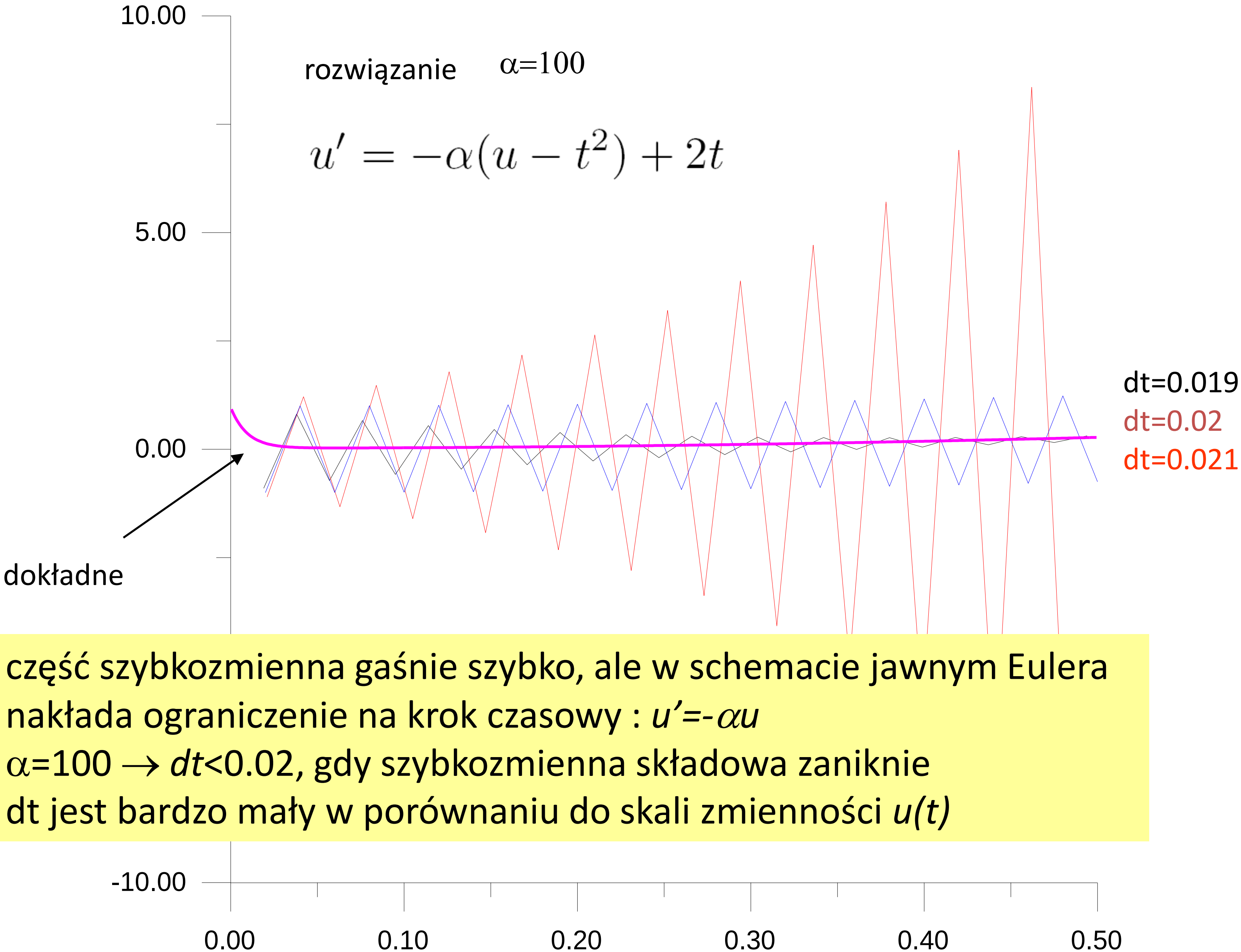
krok dt=0.02
jest bardzo drobny
w porównaniu
ze skalą zmienności składowej
parabolicznej



krzyżyki : t^2
kółka : t^2 + exp(-100t)



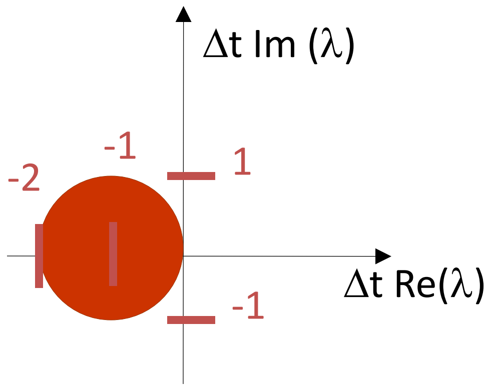
rozwiązanie $\alpha=100$
$$u' = -\alpha(u - t^2) + 2t$$
10.00
5.00
0.00
-5.00
-10.00
0.00
0.10
0.20
0.30
0.40
0.50
dt=0.019
dt=0.02
dt=0.021
dokładne
krok dt=0.02
okazuje się zbyt długi
gdy włączyć składową szybkozmienną
nawet tam, gdy znika ona z rozwiązania
$$u' = -\alpha(u - t^2) + 2t$$
$$u(0) = u_0$$
$$u(t) = u_0 \exp(-\alpha t) + t^2$$



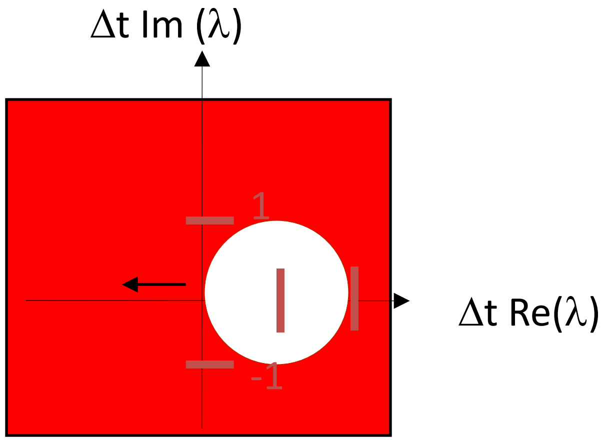
część szybkozmienna gaśnie szybko, ale w schemacie jawnym Eulera nakłada ograniczenie na krok czasowy : $u'=-\alpha u$

α=100 $\rightarrow$ *dt*<0.02, gdy szybkozmienna składowa zaniknie

dt jest bardzo mały w porównaniu do skali zmienności *u(t)* regiony stabilności metod Eulera



metoda Eulera jawna



niejawna metoda Eulera

w metodzie niejawnej problemu
ze stabilnością bezwzględna nie ma ...

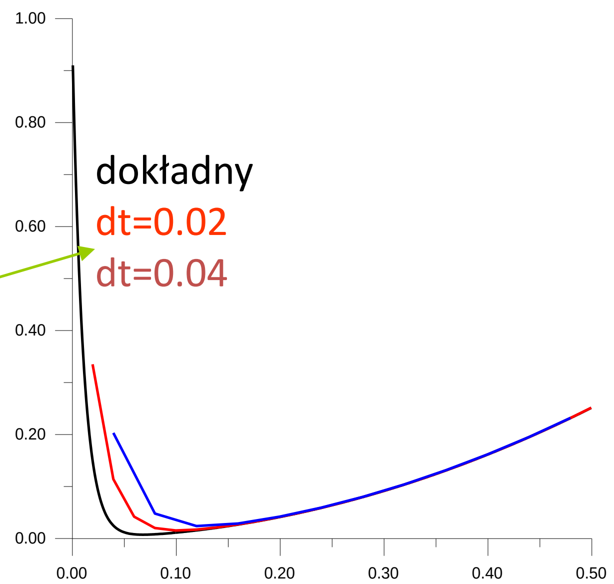
niejawna metoda Eulera:
zastosowanie do problemu sztywnego

$$u' = -\alpha(u - t^2) + 2t \qquad \frac{du}{dt} = f(t,u)$$

$$u(0) = u_0$$

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

$$u_n = \frac{u_{n-1} + 2\Delta t t_n + \alpha \Delta t t_n^2}{1 + \alpha \Delta t}$$



rozwiązania są stabilne
i dokładne dla dużych t nawet gdy dt duże
dla małych t można wstawić mniejsze dt,
potem krok zwiększyć

Problemy sztywne (drętwe) (*stiff, stiffness*)

Problem jest praktyczny i ścisłej definicji, która byłaby użyteczna, nie ma .
Jedna z możliwych: problem jest sztywny, gdy stosując schemat <u>jawny</u>
musimy przyjąć krok czasowy bardzo mały w porównaniu
ze skalą zmienności funkcji.

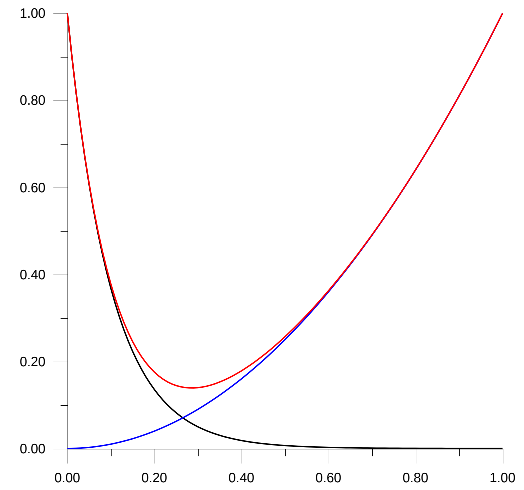
RRZ jest problemem sztywnym gdy:

1. Problem jest charakteryzowany bardzo różnymi skalami czasowymi
2. Stabilność bzwz nakłada silniejsze ograniczenia na krok czasowy niż dokładność.
3. Metody jawne się nie sprawdzają.

$$u' = -\alpha(u - t^2) + 2t$$

$$u(0) = u_0$$

$$u(t) = u_0 \exp(-\alpha t) + t^2$$



niech $\alpha >> 0$

szybkozmienna składowa

składowa wolnozmienna

Problemy sztywne (drętwe) (*stiff*)

problem najczęściej spotykany dla układ równań różniczkowych opisujących sprzężone procesy o bardzo różnych skalach czasowych

Ogólna postać układu równań pierwszego rzędu

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{F}(t, \mathbf{y})$$

wektor R^n

fcja $R \times R^n \rightarrow R$

Tylko niekiedy można podać rozwiązanie w zamkniętej formie analitycznej.
Można, np. dla jednorodnego problemu liniowego

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$$

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$$ gdzie $$\mathbf{A}\mathbf{v_j} = \lambda_j \mathbf{v_j}$$

$$\mathbf{y}(t) = \sum_{j=1}^{n} c_j \exp(\lambda_j t)\mathbf{v_j}$$

dla niezdegenerowanych wartości własnych

c_j liczone z warunku początkowego

---

np. problem rozpadu promieniotwórczego
Izotop 2 o stałej rozpadu λ_2 rozpada się promieniotwórczo na inny izotop 1 o stałej rozpadu λ_1

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dt} &= -\lambda_1 y_1(t) + \lambda_2 y_2(t)\\ \frac{dy_2}{dt} &= -\lambda_2 y_2(t)\end{aligned}$$

$y_1(0)=0$
$y_2(0)=1$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & \lambda_2 \\ 0 & -\lambda_2 \end{pmatrix} \longrightarrow$$

wartości własne $-\lambda_1$, $-\lambda_2$
rozłożyć warunek początkowy
na wektory własne

$$\mathbf{y}(t) = \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2}\exp(-\lambda_2 t)\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\lambda_1-\lambda_2}{\lambda_2}\end{bmatrix} - \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2}\exp(-\lambda_1 t)\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y}(t) = \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2}\exp(-\lambda_2 t)\left[\begin{array}{c} 1 \\ \frac{\lambda_1-\lambda_2}{\lambda_2} \end{array}\right] - \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2}\exp(-\lambda_1 t)\left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array}\right]$$

gdy duża rozpiętość między minimalną
a maksymalną wartością własną $|\lambda_{max}/\lambda_{min}|>>1$:

duże różnice skal czasowych

wektor własny który odpowiada największej wartości własnej wygaśnie najprędzej,
ale (dla metod jawnych) pozostawi najsilniejsze ograniczenie dla kroku czasowego
(np. Euler, RK2 $dt<2/|\lambda_{max}|$)

jesteśmy zmuszeni przyjąć malutki krok w porównaniu z przebiegiem rozwiązania
(w przeciwnym wypadku eksplozja)

następny przykład:

podobny do poprzedniego
problem sztywny z liniowego równania drugiego rzędu o bliskich współczynnikach

u''+1001u'+1000u=0

$$\begin{cases} w_1 = u \\ w_2 = u' \end{cases} \rightarrow \begin{cases} w_2' + 1001 w_2 + 1000 w_1 = 0 \\ w_1' = w_2 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} w_1' \\ w_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1000 & -1001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$$

wartości / wektory własne: -1 / $[-1,1]^T$
-1000 / $[1,-1000]^T$

bardzo różne skale czasowe

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = c \exp(-t) \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} + d \exp(-1000t) \begin{pmatrix} 1 \\ -1000 \end{pmatrix}$$

szczególnie dotkliwy przypadek:
równanie niejednorodne (bez rozwiązania analitycznego)

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{y}(t) + \phi(t)$$

załóżmy, że wartości własne **A** są ujemne

Rozwiązanie będzie miało postać:

$$\mathbf{y}(t) = \underbrace{\sum_{j=1}^{n} c_j \exp(\lambda_j t)\mathbf{v_j}}_{\text{stan przejściowy (wszystkie zgasną)}} + \Psi(t)$$

stan ustalony wolnozmienny

stan przejściowy (wszystkie zgasną)

Na czym polega problem? :
Rozwiązując problem numerycznie metodą jawną (Euler, RK2)

musimy przyjąć krok czasowy Δt < 2/|λ_max| aby uniknąć eksplozji rozwiązań

nawet gdy wszystkie wyrazy z powyższej sumy w rozwiązaniu znikają

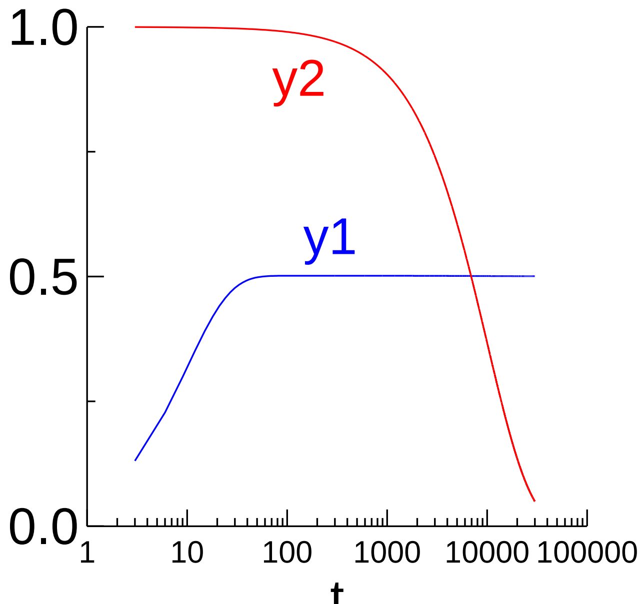
y_2 – izotop matka wolno rozpadająca się na y_1

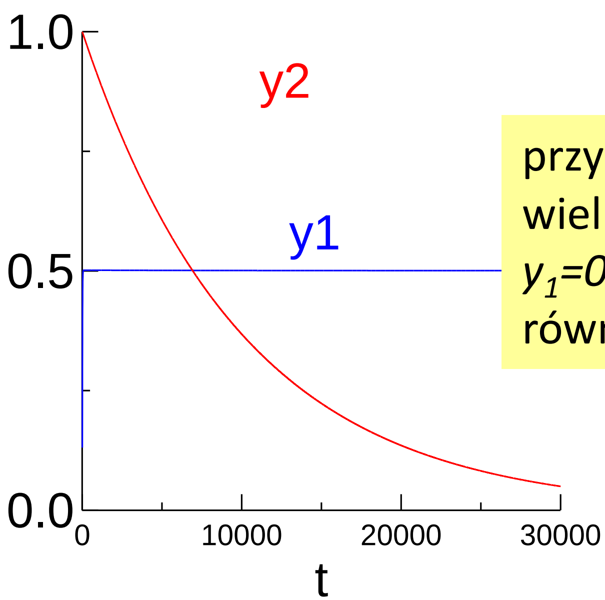
y_1 – izotop szybko rozpadający się, niejednorodność: dodatkowo pewna ilość jest w stałym tempie doprowadzana z zewnątrz

$$\frac{dy_1}{dt} = -\lambda_1 y_1 + \lambda_2 y_2 + \underline{\lambda_1/2}$$
$$\frac{dy_2}{dt} = -\lambda_2 y_2,$$

$y_2(0)=1$
$y_1(0)=0$

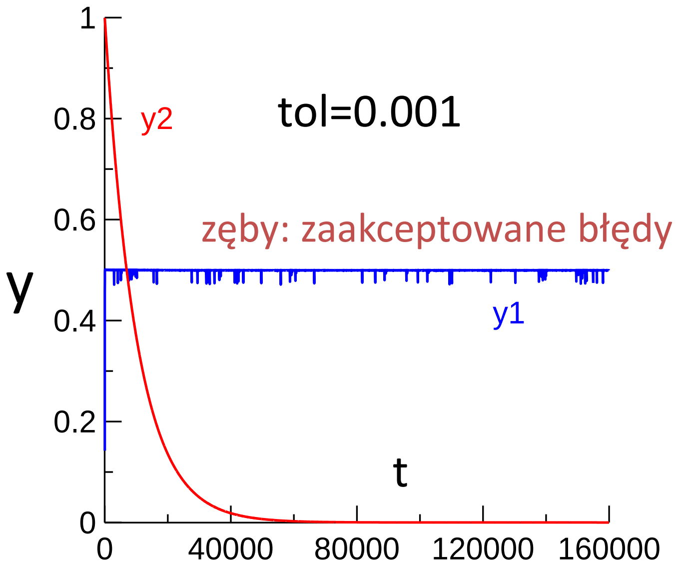
$\lambda_1=1/10$
$\lambda_2=1/10\,000$ ← bardzo wolno się rozpada [taka i większa rozpiętość lambd typowa również dla reakcji chemicznych spotykana również dla układów elektrycznych]

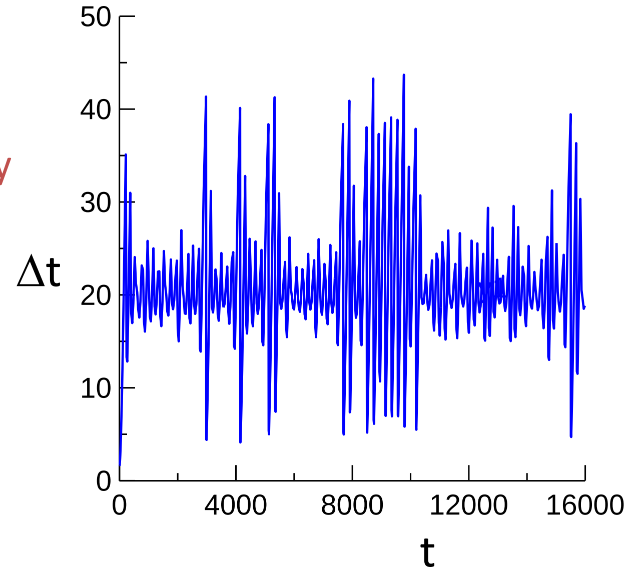




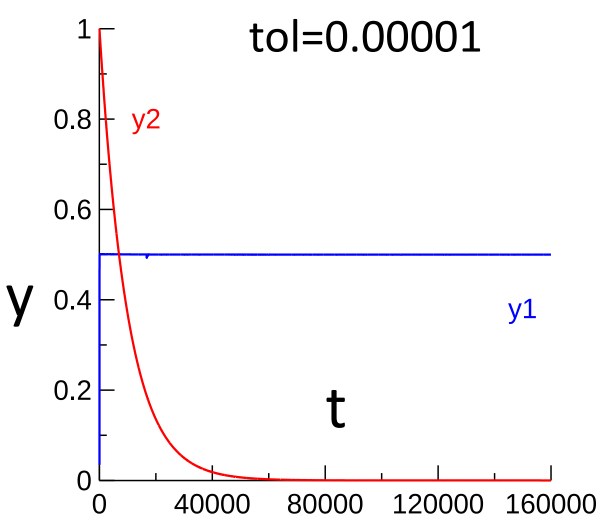
przy zaniedbywalnej wielkości λ_2
$y_1=0.5$ spełnia pierwsze równanie

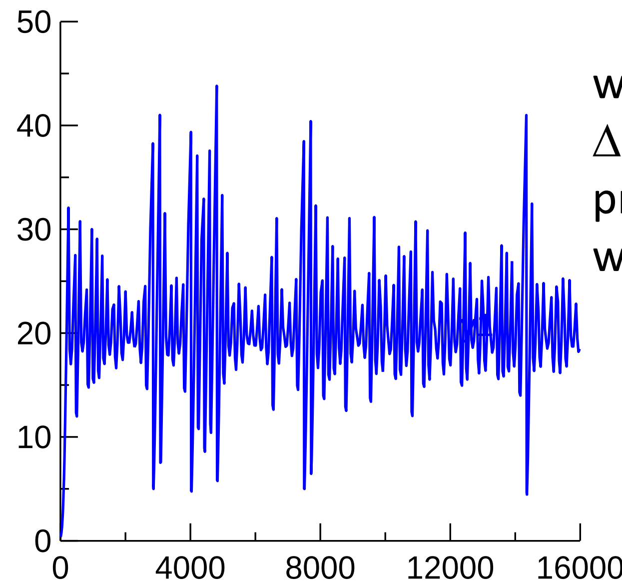
automatyczna kontrola kroku czasowego dla jawnego RK2
z krokiem czasowym ustawianym przez ekstrapolację Richardsona





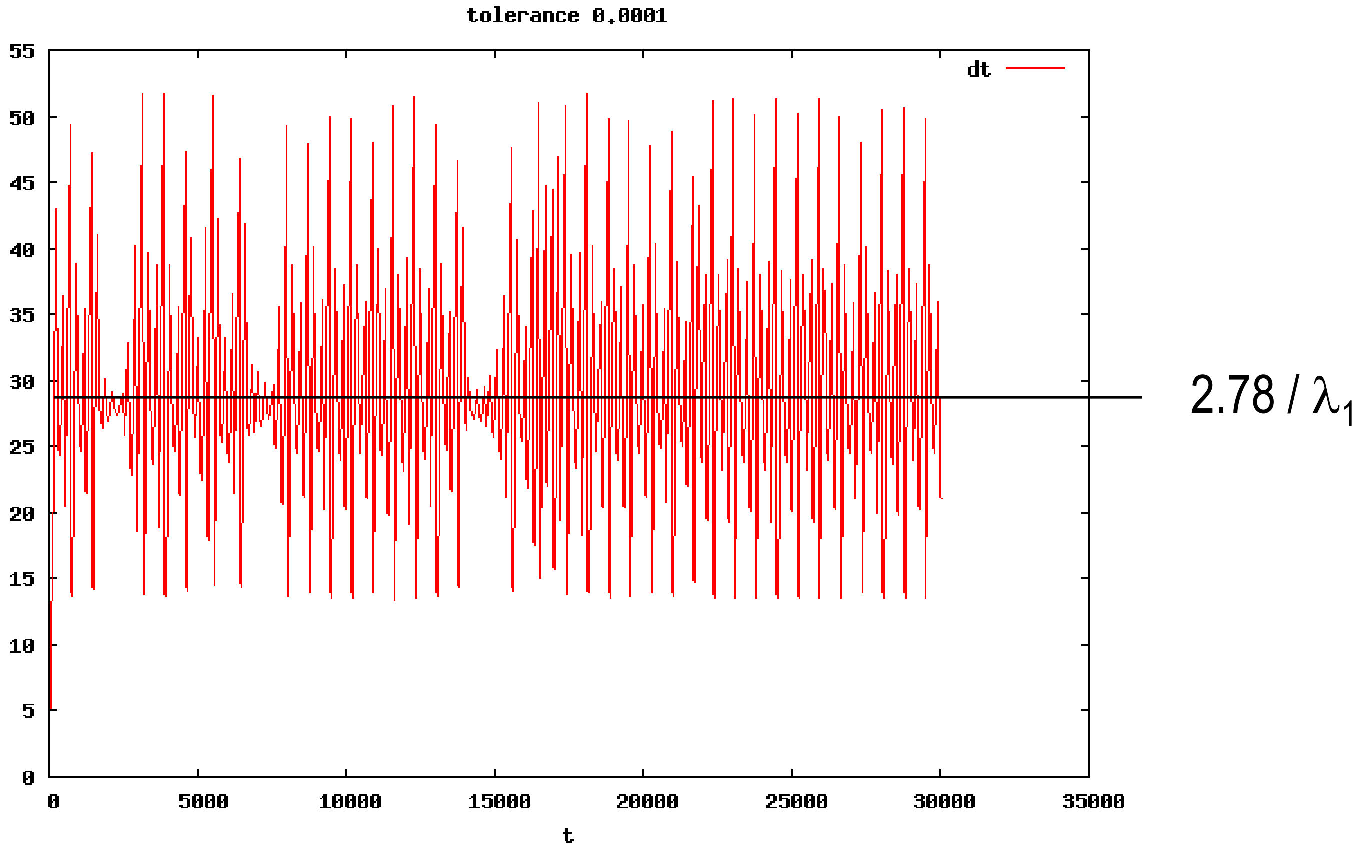
λ_1=1/10
λ_2=1/10 000





w obydwu przypadkach
Δt tylko chwilowo
przekracza krytyczną
wartość 2/(1/10)=20

RK4



tolerance 0.0001
dt
55
50
45
40
35
30
25
20
15
10
5
0
0
5000
10000
15000
20000
25000
30000
35000
t
2.78 / λ_1

Zastosujmy metodę A-stabilną
= wzór trapezów (p=2)

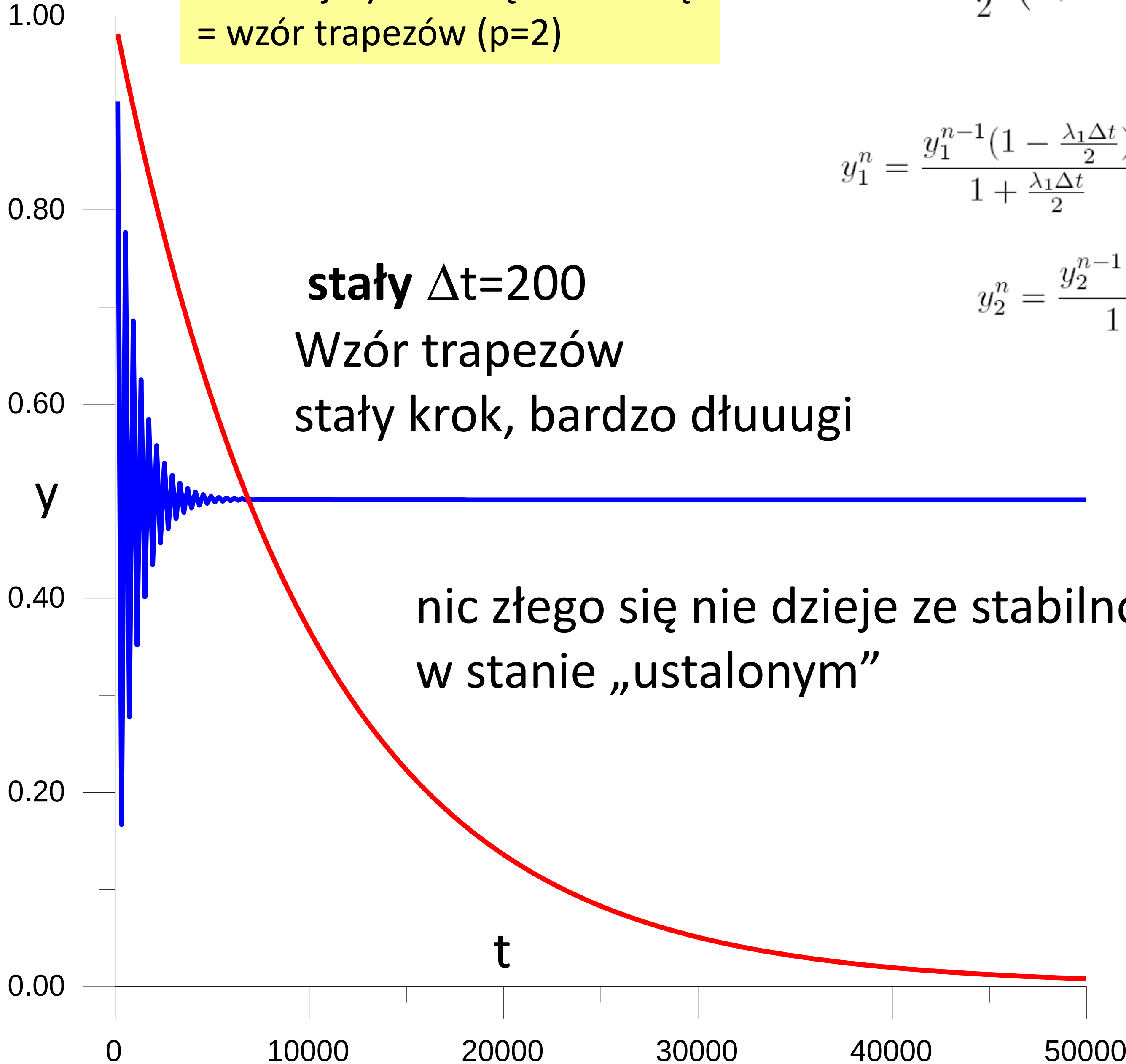
$$y^n = y^{n-1} + \frac{\Delta t}{2}\left(f(x^{n-1}, y^{n-1}) + f(x^n, y^n)\right),$$

$$y_1^n = \frac{y_1^{n-1}(1 - \frac{\lambda_1 \Delta t}{2})}{1 + \frac{\lambda_1 \Delta t}{2}} + \frac{\Delta t}{2}\frac{2\lambda_2 y_2^{n-1} + \lambda_1}{1 + \frac{\lambda_1 \Delta t}{2}}$$

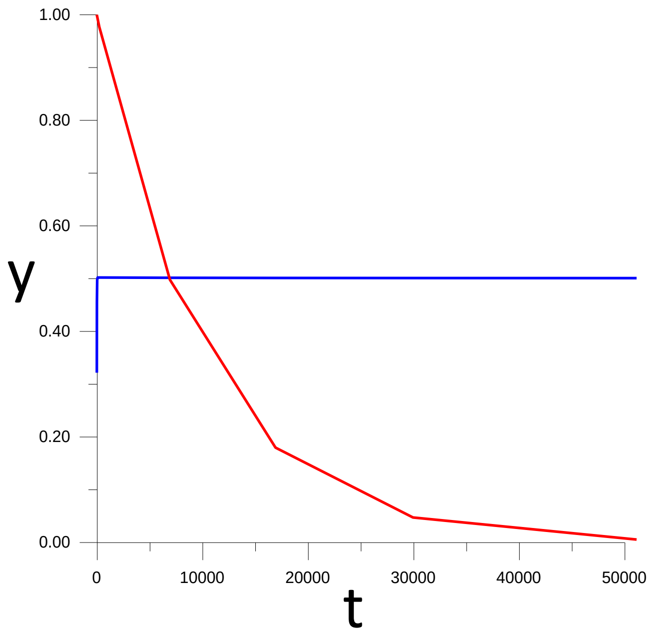
$$y_2^n = \frac{y_2^{n-1}(1 - \frac{\lambda_2 \Delta t}{2})}{1 + \frac{\lambda_2 \Delta t}{2}}.$$

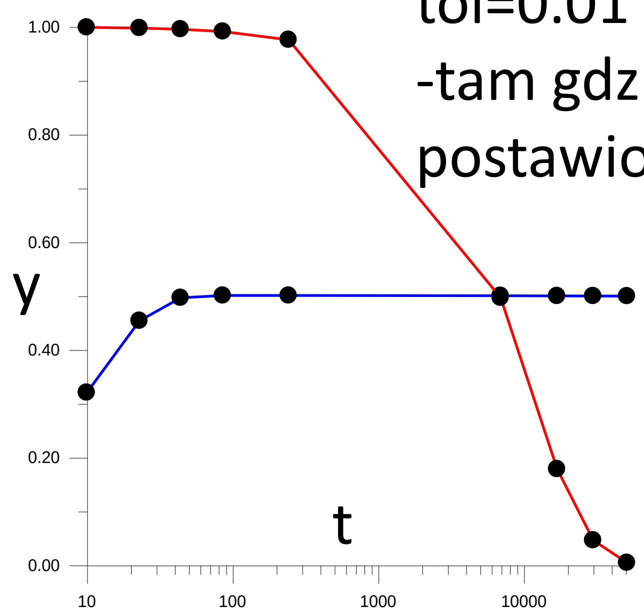
stały Δt=200
Wzór trapezów
stały krok, bardzo dłuuugi

nic złego się nie dzieje ze stabilnością
w stanie „ustalonym”



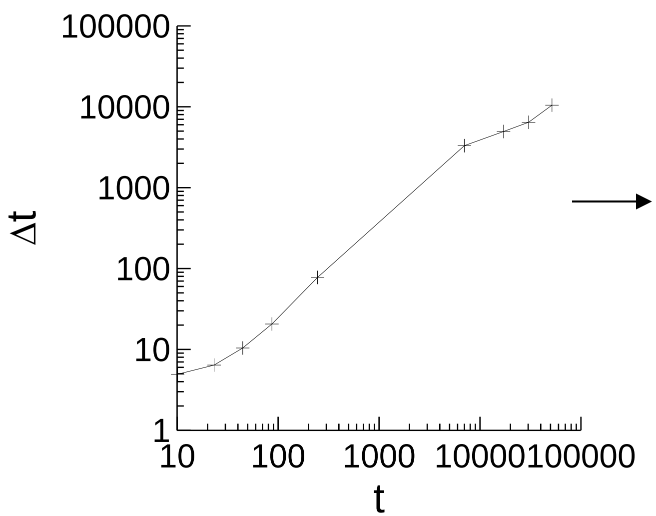
Wzór trapezów i **krok automatycznie dobierany** przez ekstrapolację Richardsona





tol=0.01 kropki
-tam gdzie
postawiony krok

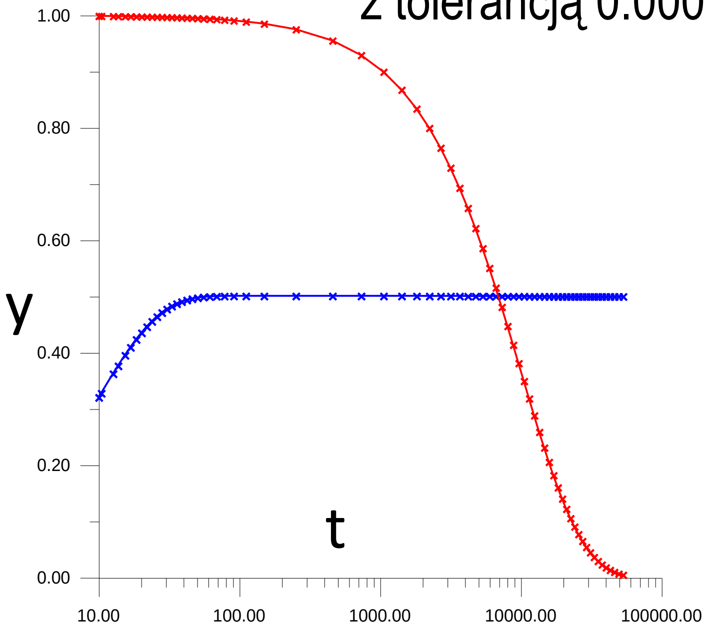
raptem 10 kroków i załatwione!
zamiast 10^4 kroków RK4

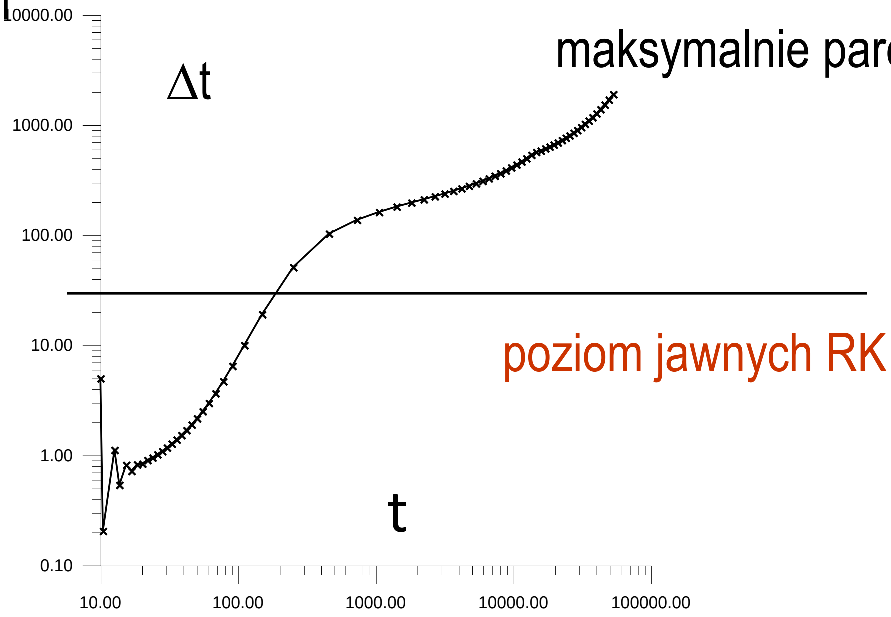


Krok czasowy – zmienność 4 rzędów wielkości.

trapezy (najdokładniejsza metoda A-stabilna spośród wielokrokowych)

z tolerancją 0.00001

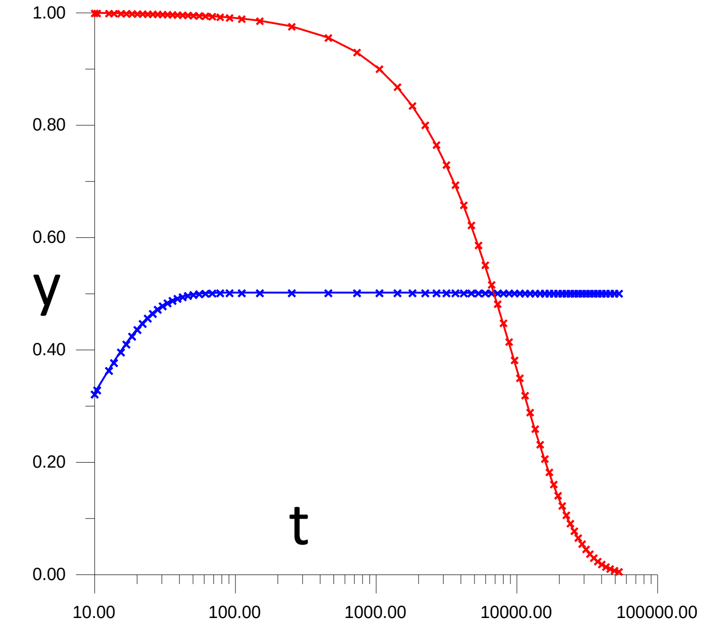


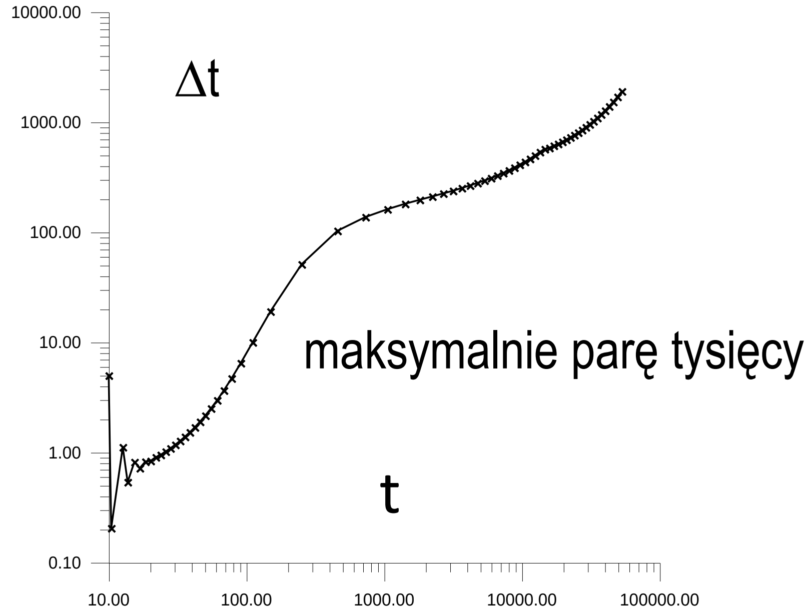


metoda trapezów: jako A-stabilna radzi sobie nieźle z doborem kroku czasowego
w problemach sztywnych – ale jest stosunkowo mało dokładna
dokładniejsza A-stabilna pozwoliłaby stawiać jeszcze dłuższe kroki

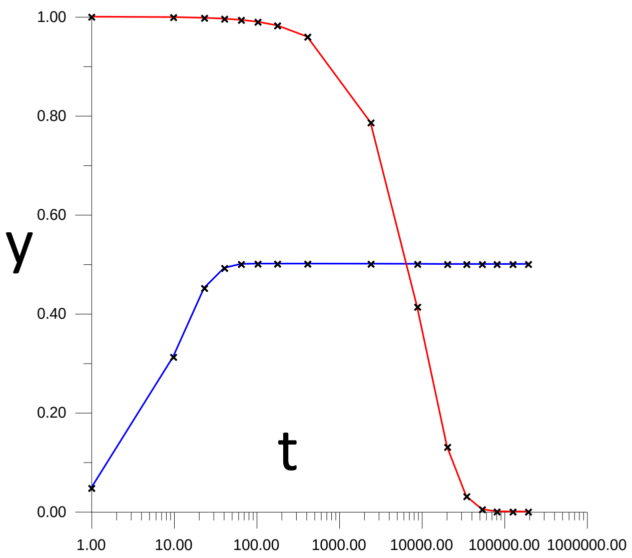
niestety = dokładniejszej A-stabilnej tej w klasie metod
(liniowe wielokrokowe) nie ma

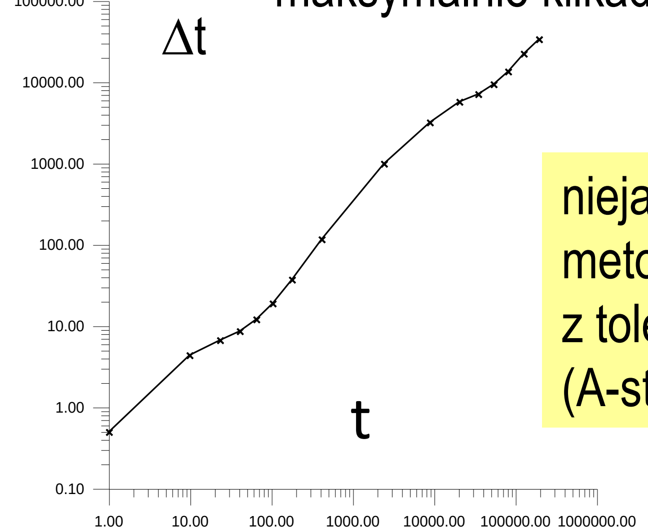
dlatego : niejawne metody RK (jednokrokowe, nieliniowe) trapezy z tolerancją 0.00001 (najdokładniejsza metoda A-stabilna spośród wielokrokowych)





maksymalnie kilkadziesiąt tysięcy





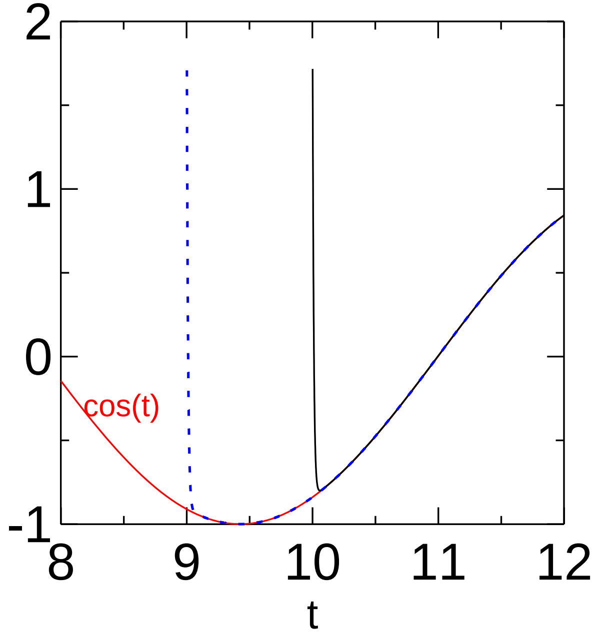
niejawna dwustopniowa
metoda RK (rzędu 4)
z tolerancją 0.00001
(A-stabilna)

Mówimy, że RRZ jest problemem sztywnym gdy:
1. Problem jest charakteryzowany różnymi skalami czasowymi.
2. Stabilność bzwz nakłada silniejsze ograniczenia na krok czasowy niż dokładność.
3. Metody jawne się nie sprawdzają.

Następny przykład: sztywny problem w pojedynczym równaniu:

$$\frac{du}{dt} = -100\,(u - \cos(t)) - \sin(t)$$

dla dużych *t* – rozwiązanie ustalone *u(t)=cos(t)*

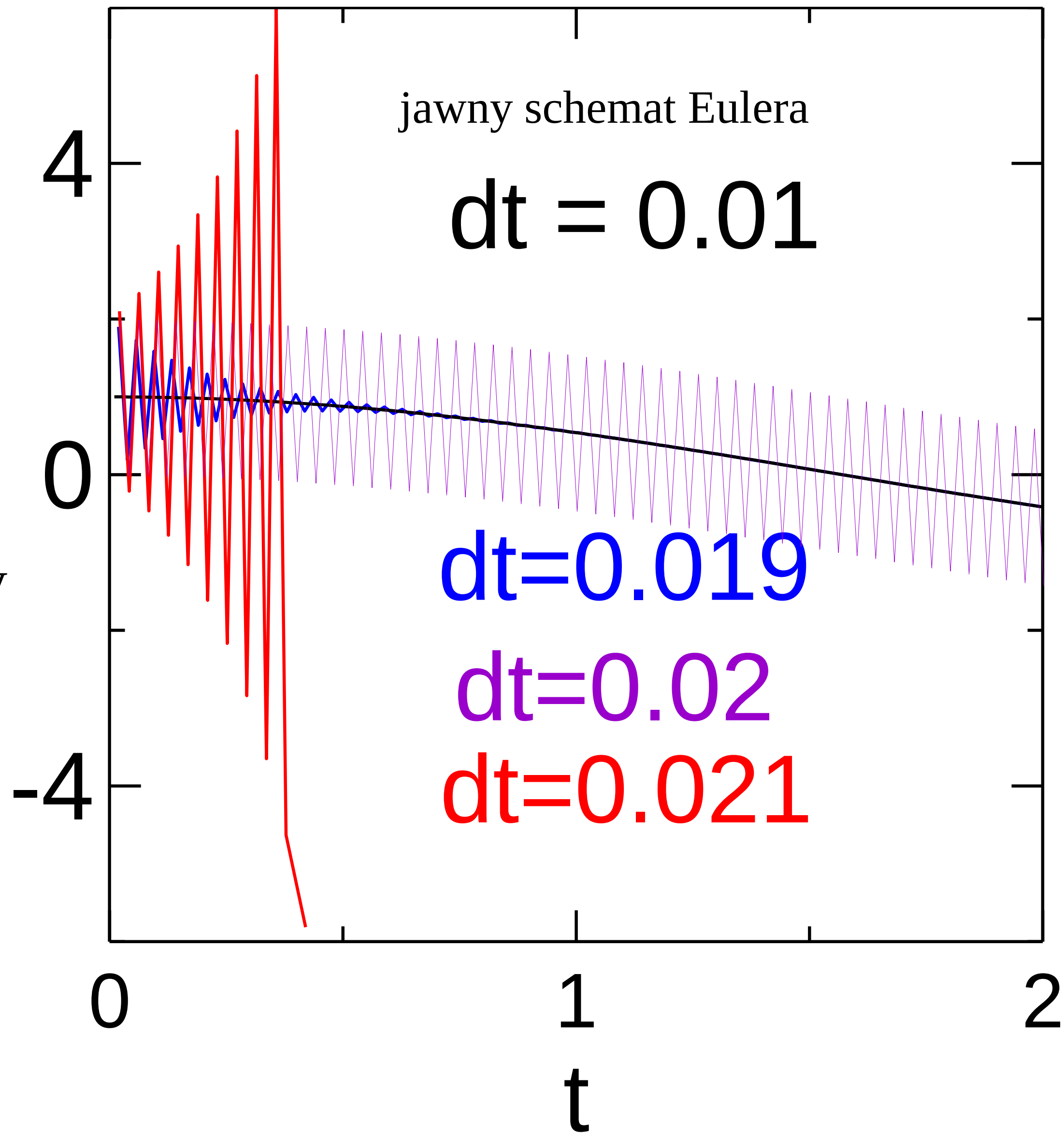


dwie bardzo różne skale czasowe
1) rozwiązania ustalonego okres 2pi
2) skala czasowa tłumienia „odchylenia od stanu ustalonego”
exp(-100 t) – czasowa stała zaniku 0.01

z *u(0)=2*

rozwiązanie: „stacjonarne” *u(t)=cos(t)*

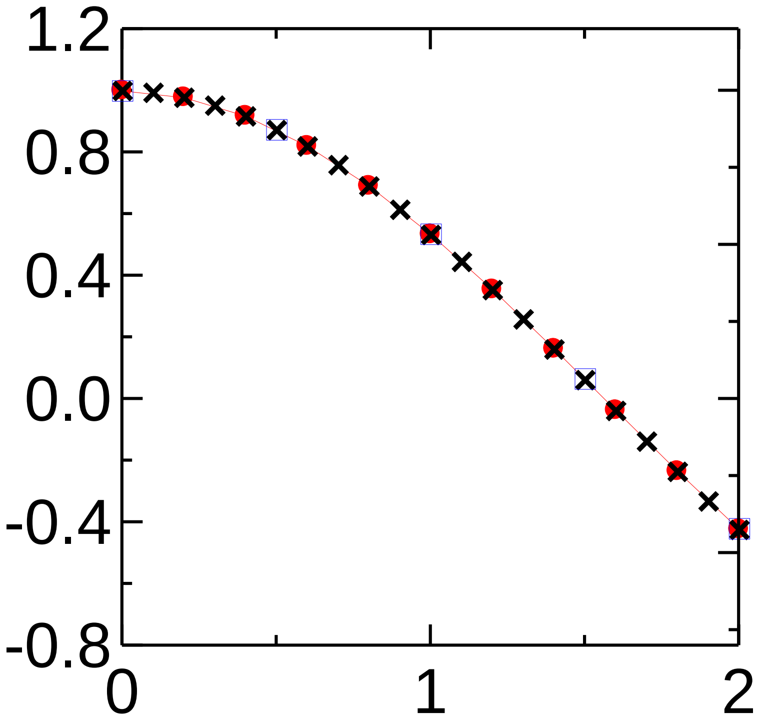
Stały krok czasowy:



rozpoznajemy ograniczenie:

$\Delta t < 2/|100|$

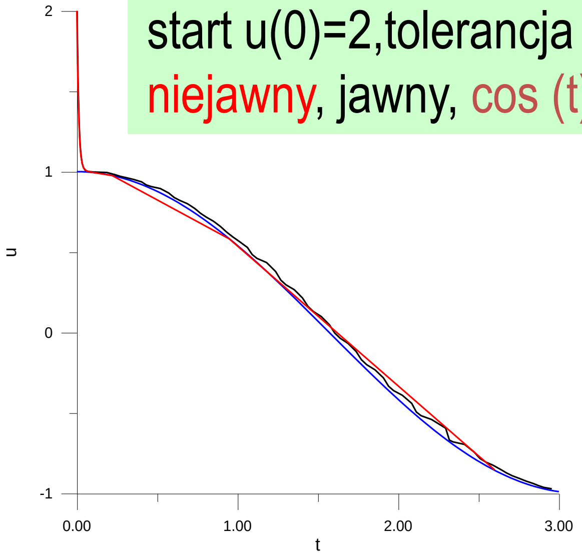
niejawny schemat Eulera – krok stały



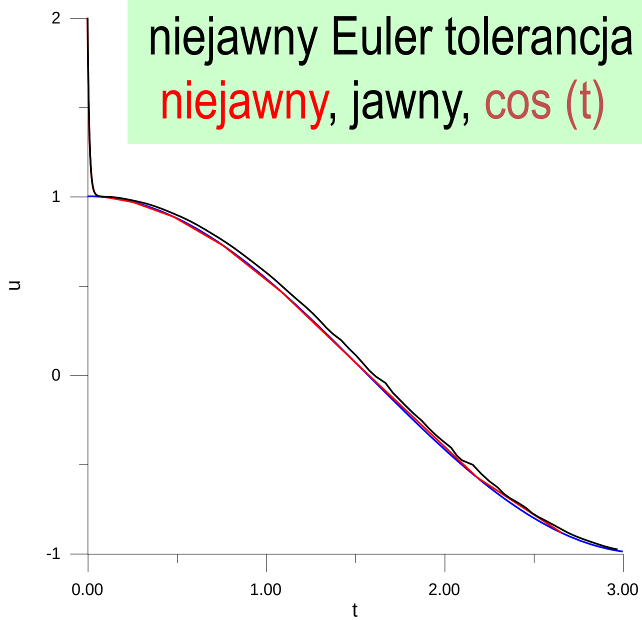
dt=0.1
dt=0.2
dt=0.5

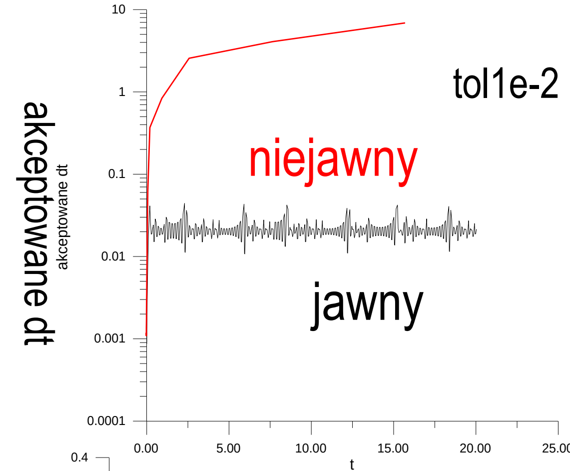
tutaj: startowane od warunku u(0)=1

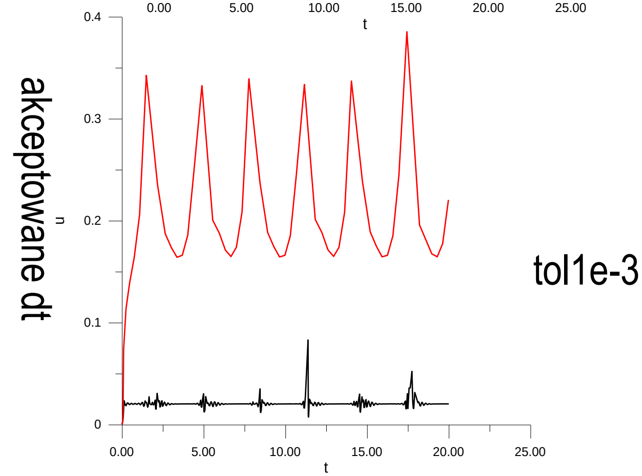
wyniki do uzyskania na laboratorium
start u(0)=2,tolerancja 1e-2
niejawny, jawny, cos (t)

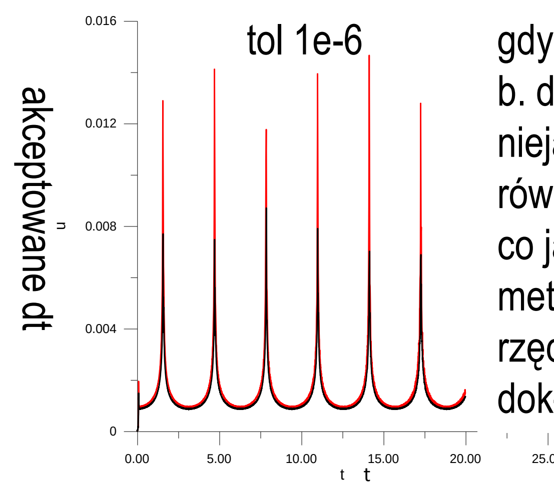


niejawny Euler tolerancja 1e-3
niejawny, jawny, cos (t)









gdy wymagana
b. duża dokładność
niejawny stawia
równie krótkie kroki
co jawny, obydwie
metody tego samego
rzędu
dokładności

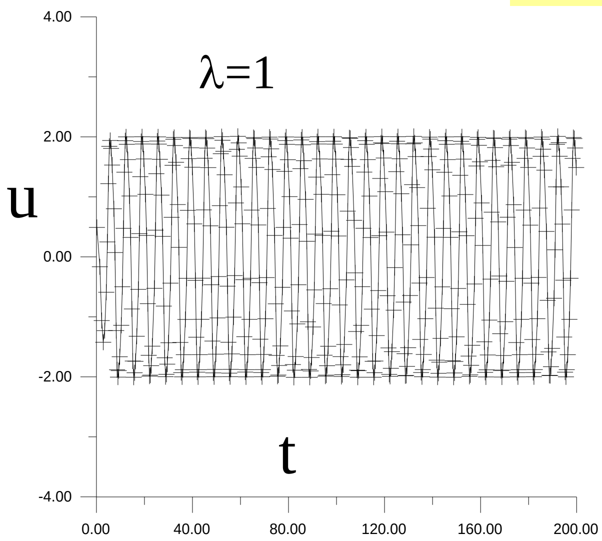
następny przykład: równanie swobodnego oscylatora van der Pola
[historycznie = odkrycie deterministycznego chaosu w lampach firmy Philips
aperiodyczne oscylacje przy periodycznym wymuszeniu]

$$u'' - \underline{\lambda(1-u^2)u'} + u = 0$$ (λ=0 = zwykły o. harmoniczny)

$$u' = v$$

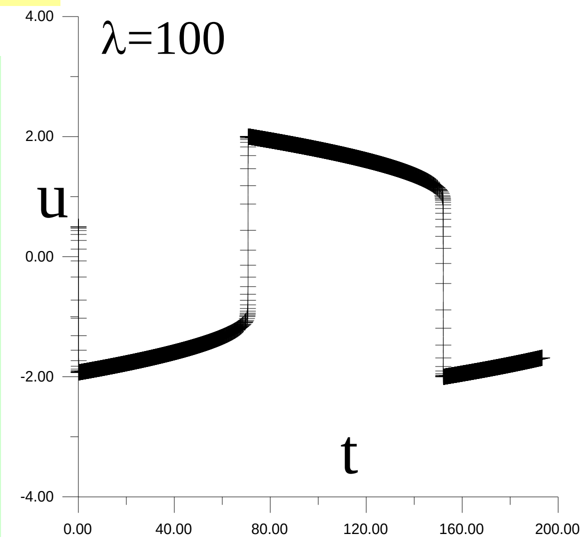
$$v' = \lambda(1-u^2)v - u$$

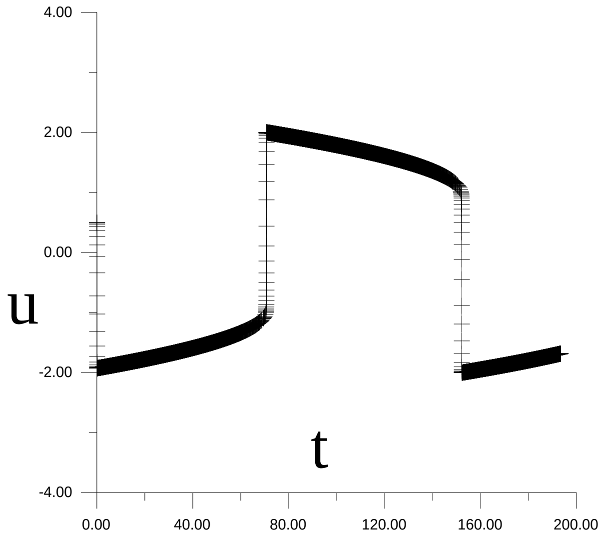
jawny RK4 = zmienny krok czasowy



punkt *u(t)* policzony = krzyż
po lewej: krzyże położone rozsądnie w porównaniu ze zmiennością rozwiązania

po prawej: problem sztywny
gładkie rozwiązanie
a krzyże się zlewają





równanie: czasem sztywne czasem nie

przydałoby się narzędzie do wykrywania sztywności
np. dla podjęcia decyzji:

tam gdzie sztywność = schemat niejawny
tam gdzie nie = schemat jawny (tańszy)

Detekcja sztywności dla problemu nieliniowego
(dla liniowego = wystarczy rozwiązać problem własny macierzy układu równań)

$$\frac{du}{dt} = f(t, u)$$ **układ** N równań (*u*,*f*-wektory)

w chwili t rozwiązanie $u^*(t)$
rozwiązanie chwilę później opisane przez odchylenie $\delta u(t)$ od u^*
$u(t) = u^*(t) + \delta u(t)$

linearyzacja: zakładamy, że odchylenie małe, rozwijamy $f(t,u)$ względem u wokół $f(t,u^*)$: [Taylor dla wektora]

$$f(t, u) = B + J(t)u(t) + \ldots$$

$$[J(t)]_{ij} = \frac{\partial f^i}{\partial u_j}(t, u^*(t)) \longleftarrow$$ macierz Jakobiego [N na N]

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

$$f(t,u) = B + J(t)u(t) + \ldots$$

problem zlinearyzowany

$$[J(t)]_{ij} = \frac{\partial f^i}{\partial u_j}(t, u^*(t))$$

$$\frac{du}{dt} = Au + B$$

B bez znaczenia dla stabilności

rozwiązać problem własny *A*: dostaniemy wartości własne λ_i:

Aby rachunek się powiódł: $\Delta t\, \lambda_i$ musi leżeć w regionie stabilności używanej metody dla wszystkich *i*.

Jeśli duża rozpiętość λ : problem będzie sztywny.

Przykład: nieliniowy układ równań z warunkowo występującą sztywnością

$$\begin{pmatrix} \frac{du^{(1)}}{dt} \\ \frac{du^{(2)}}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^{(1)}u^{(2)} \\ \cos(u^{(1)}) - \exp(u^{(2)}) \end{pmatrix}$$

$$[J(t)]_{ij} = \frac{\partial f^i}{\partial u_j}(t, u^*(t))$$

$$J = \begin{pmatrix} -u^{(2)} & -u^{(1)} \\ -\sin(u^{(1)}) & -\exp(u^{(2)}) \end{pmatrix}$$

---

jeśli druga składowa **u** urośnie – macierz prawie diagonalna
z szerokim zakresem wartości własnych - sztywność

Przykład detekcja sztywności dla: oscylatora van der Pola

$$u' = v$$

$$v' = \lambda(1 - u^2)v - u$$

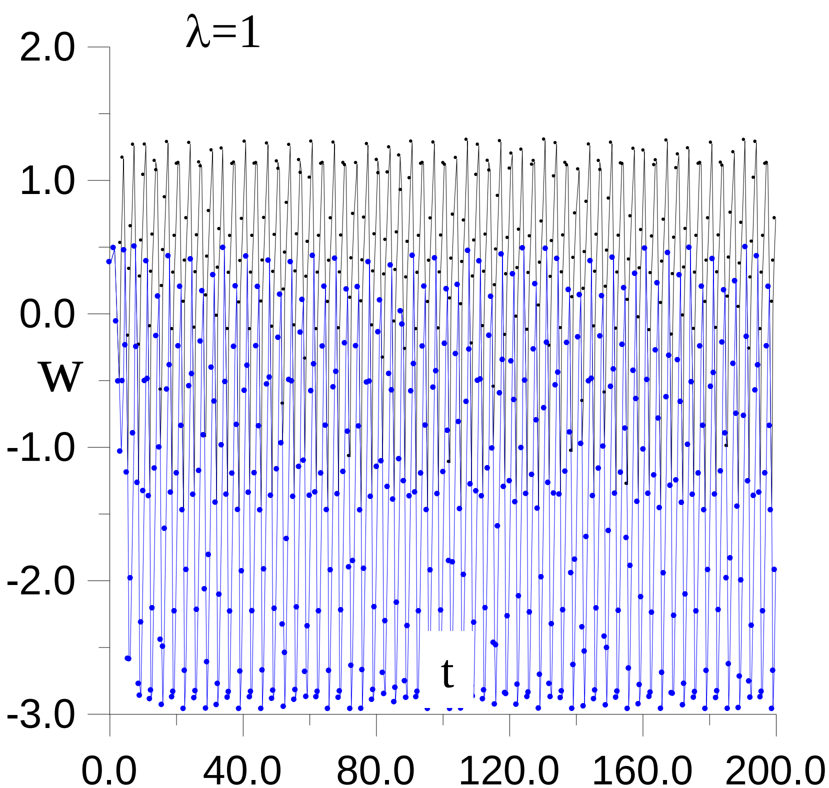
$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -2\lambda v u - 1 & \lambda(1 - u^2) \end{pmatrix}$$

wartości własne:

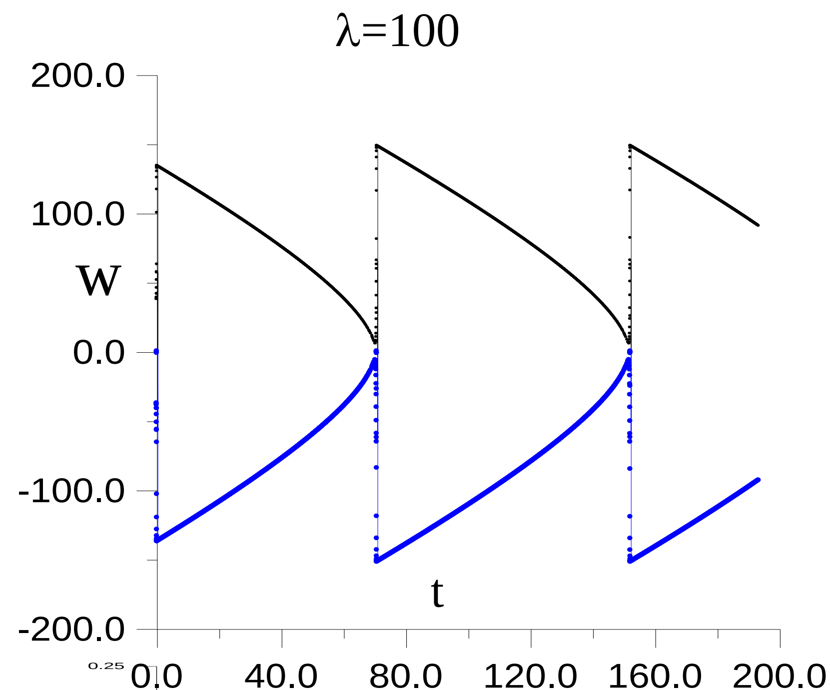
$$w(t) = \frac{1}{2}\left(1 - u(t)^2\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(1 - u(t)^2)^2 - 8\lambda v(t)u(t) - 4}$$

$$w = \frac{1}{2}\left(1-u^2\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\lambda^2(1-u^2)^2 - 8\lambda v u - 4}$$

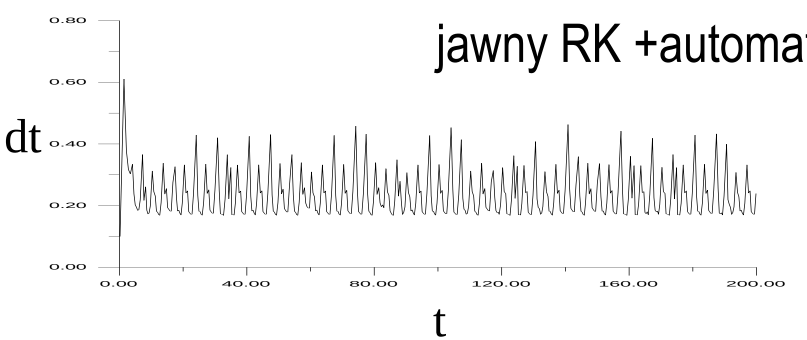
niebieskie i czarne: części rzeczywiste wartości własnych

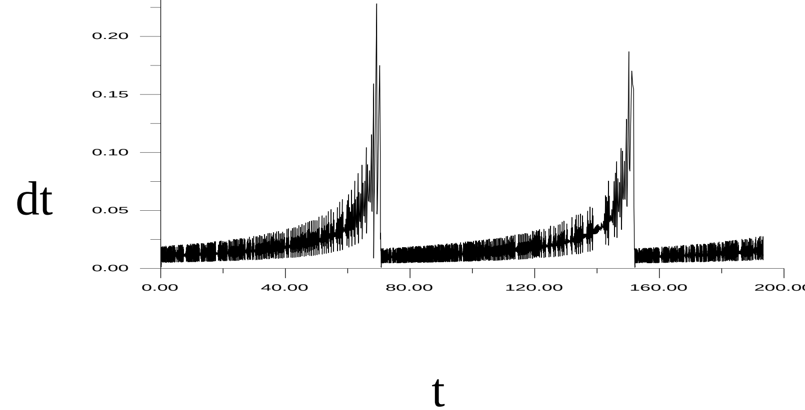


$$w \simeq \pm\lambda(1-u^2)/2$$



jawny RK +automat dt

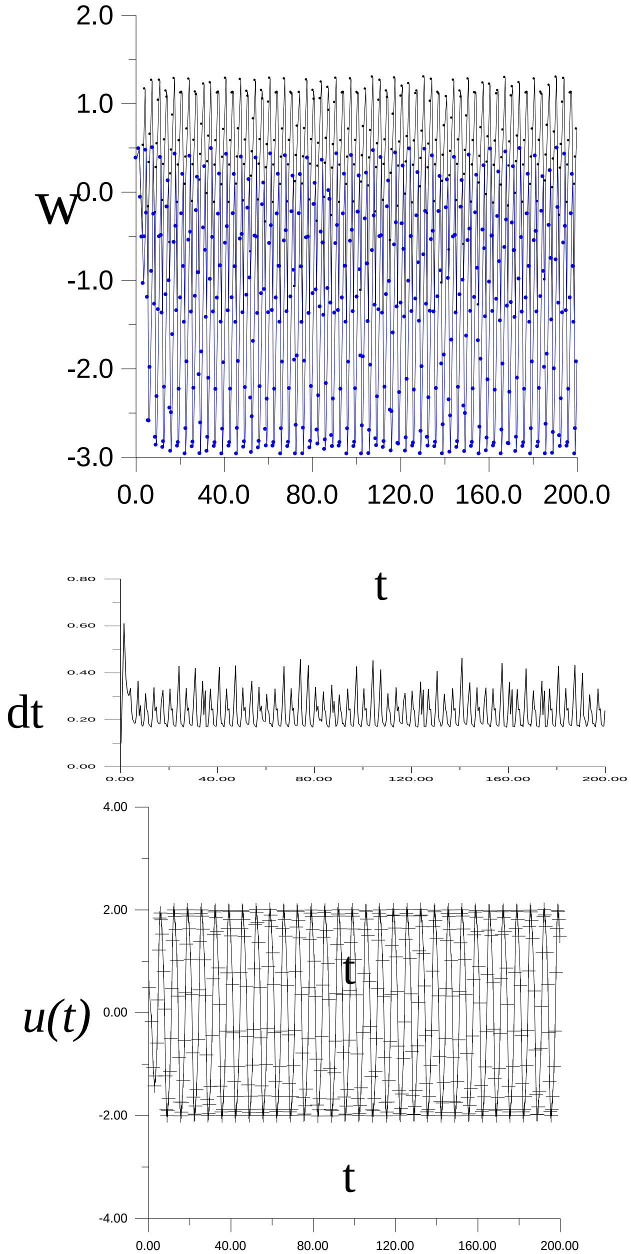




jawny RK +automat dt

$$w \simeq \pm\lambda(1-u^2)/2$$

λ=1



λ=100