ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ Ι

ΔΙΑΛΕΞΗ 16, 18/12/09

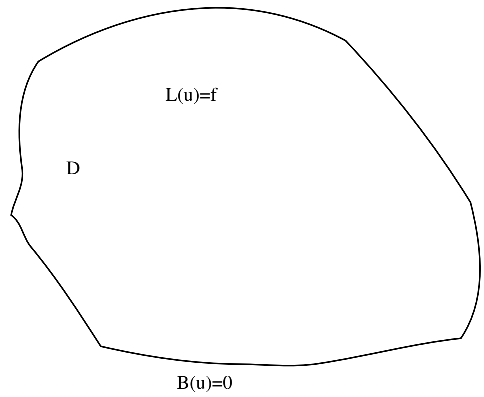
Ε. ΓΑΛΛΟΠΟΥΛΟΣ
Τμήμα Μηχ. Η/Υ και Πληροφορικής
Παν/μιο Πατρών

Προβλήματα σε 2 ή περισσότερες διαστάσεις (Μερική διαφορική εξίσωση)

$\mathcal{L}$: $-(u_{xx} + u_{yy}) = f(x,y)$ (αποκαλείται εξίσωση Laplace αν $f \equiv 0$, και Poisson διαφορετικά.)

$\mathcal{B}$: $u(x,y)$ γνωστή στο σύνορο $\partial\Omega$

Ω: $[0,1] \times [0,b]$



Έστω $h = \frac{1}{m+1} = \frac{b}{n+1}$:

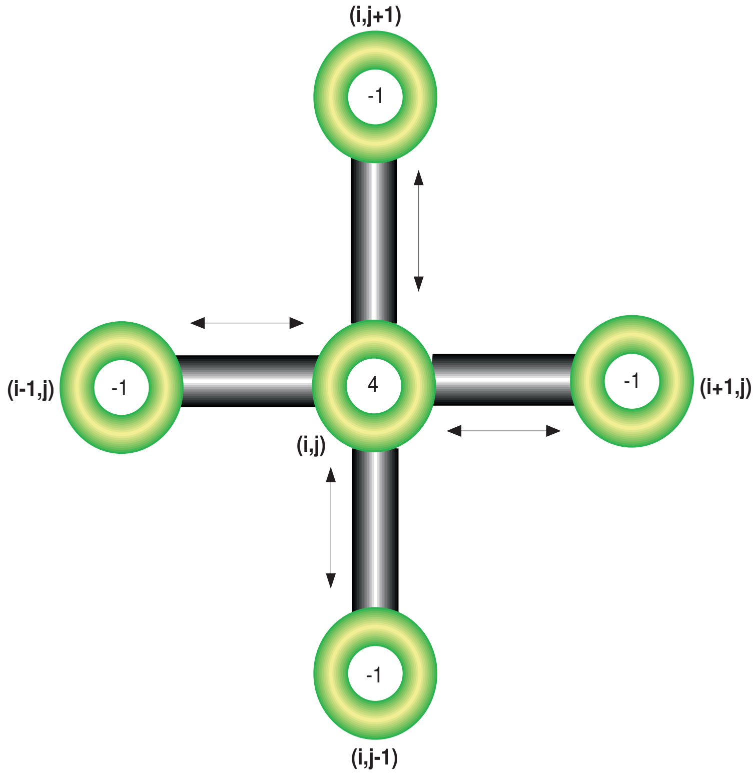
$\Omega \to \Omega_h = \{(x_i, y_j) | x_i = ih, y_j = jh; i = 0 : m+1, j = 0 : n+1\}$

$\mathcal{L} \to \mathcal{L}_h$: διακριτοποίηση με κεντρισμένες διαφορές 2ης τάξης

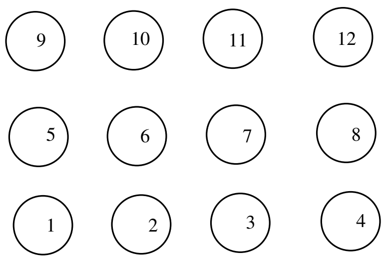
$$\begin{aligned} u_{xx}(x_i, y_j) &= \frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} + O(h^2) \\ u_{yy}(x_i, y_j) &= \frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{h^2} + O(h^2) \end{aligned}$$

$$u_{xx}(x_i, y_j) + u_{yy}(x_i, y_j) \approx \frac{U_{i-1,j} + U_{i,j-1} - 4U_{i,j} + U_{i+1,j} + U_{i,j+1}}{h^2}$$

Άστρο 5 σημείων:



Φυσική αρίθμηση πλέγματος σε 2 διαστάσεις



Διακριτές εξισώσεις

$$\frac{-U_{i-1,j} - U_{i,j-1} + 4U_{i,j} - U_{i+1,j} - U_{i,j+1}}{h^2} = F_{i,j} \qquad i = 1 : m, j = 1 : n$$

με τις κατάλληλες συνοριακές τιμές

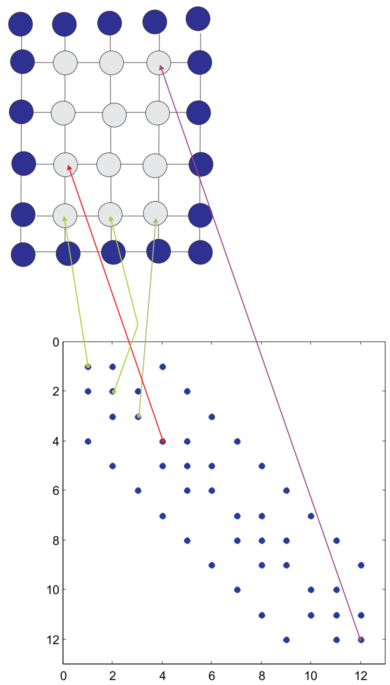
$$U_{0,j}, U_{m+1,j}, U_{i,0}, U_{i,n-1}$$

Σύστημα $m \times n$ εξισώσεων για ισάριθμους αγνώστους:

Τριδιαγώνιο ως προς τους ορμαθούς:

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} T & -I & \ddots & & \\ -I & T & -I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -I & T \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_{1:m,1} \\ U_{1:m,2} \\ \vdots \\ U_{1:m,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{1:m,1} \\ F_{1:m,2} \\ \vdots \\ F_{1:m,n} \end{pmatrix}$$

όπου $T = \mathrm{trid}_m[-1, \underline{4}, -1]$ και $I = \mathtt{eye}(m)$



$$\begin{array}{c} \text{Μητρείο ζώνης} \\ \text{μπορεί να δειχθεί ΣΘΕ} \\ \downarrow \\ A(k|k) \Rightarrow A(k|k) = L(k|0)U(0|k) \\ \downarrow \\ T_{\text{αρθ}} \approx O(nm^2) \text{ αντί } O((mn)^3) \end{array}$$

Υπάρχουν ταχύτερες μέθοδοι για το πρόβλημα αυτό:

Ταχείς ελλειπτικοί επιλυτές
$T_{\text{αρθ}} \approx O(n^2 \log n)$ αν $m = n$ ... ακόμα και $O(n^2)$

Επαναληπτικές μέθοδοι για μεγάλα και πιο δύσκολα προβλήματα, π.χ.

$$-a(x,y)u_{xx} - b(x,y)u_{yy} + c(x,y)u(x,y) = d(x,y)$$

ΤΜΗΥΠ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΙΙ !!!

Επίλυση προβλήματος αρχικών τιμών ΣΔΕ πρώτης τάξης (πρόβλημα Cauchy):

$$\frac{du}{dt} = f(t,u), \qquad \text{με αρχική τιμή } u(t_0) = c.$$

όπου t θεωρείται «χρόνος», $u, f \in \mathbb{R}^n$ και $c \in \mathbb{R}^n$ είναι κάποια σταθερά.
Ενδιαφερόμαστε για (όλες, μερικές ή μόνον τις τελικές) τιμές του u για το χρονικό διάστημα $[t_0, T]$.

- Αν η f εξαρτάται μόνον από το t και όχι από το u τότε το πρόβλημα μοιάζει με τον υπολογισμό του ολοκληρώματος της f: $u(t) = c + \int_{t_0}^{t} f(\tau)d\tau$.
- μόνο που στην (υπολογιστική) ολοκλήρωση ενδιαφερόμαστε για τη μια τιμή $u(t)$ ενώ στην επίλυση της ΣΔΕ ενδιαφέρει η προσέγγιση μιας συνάρτησης (της u):
  - ... μέσω τιμών της στο $[t_0, t]$: $[u(t_0), u(t_1), ..., u(t_n)]$: κομβική συνάρτηση
  - ... μπορεί όμως να μας ενδιαφέρει μόνον το $u(t)$.
- Συνθήκη Lipschitz:

$$\|f(t,u) - f(t,v)\| \le \lambda \|u - v\|, \qquad \forall u, v \in \mathbb{R}^n, t \ge t_0$$

  όπου η «σταθερά Lipschitz» $\lambda > 0$ είναι ανεξάρτητη των u, v.
- Θεώρημα ύπαρξης: Αν ισχύει η συνθήκη Lipschitz η ΔΕ έχει μοναδική λύση.

Παρατηρήσεις για τη ΣΔΕ Κάτω από ορισμένες προϋποθέσεις (π.χ. αν ισχύει η συνθήκη Lipschitz), το πρόβλημα $\frac{du}{dt} = f(t,u), u(t_0) = c$ καθορίζει μια οικογένεια από λύσεις $u(t)$:

- ✓ Για την $\frac{du}{dt} = f(t)$, $u(t_0) = c$: Κάθε λύση μπορεί να υπολογιστεί με αριθμητική ολοκλήρωση:

$$u(t) = c + \int_{t_0}^{t} f(\tau)d\tau.$$

- ✓Οι λύσεις διαφέρουν μόνον κατά τη σταθερά c που έχει καθοριστεί από τις αρχικές τιμές.

- ✓ Κάθε μέλος της οικογένειας έχει την ίδια κλίση $f(t)$.
- ✓ Κάθε μέλος της οικογένειας των λύσεων της $\frac{du}{dt} = f(t,u)$, με αρχική τιμή $u(t_0) = c$. μπορεί να υπολογιστεί με μεθόδους για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών.
- ✓ Κάθε μέλος της οικογένειας έχει διαφορετική κλίση $f(t,u)$.
- Στη 1η περίπτωση μπορούμε να βρούμε τις τιμές της $u(t)$ με όποια σειρά, π.χ. $u(\tau_n), u(\tau_3), u(\tau_1)$. Στη 2η, συνήθως, δεν μπορούμε να υπολογίσουμε την τιμή της $\frac{du}{dt} = f(t,u)$ στο τ μέχρι να γνωρίζουμε και την τιμή της $u(\tau)$.

Παράδειγμα Η λύση της ΣΔΕ

$$\frac{du}{dt} = e^{-t},\ u(0) = c.$$

είναι

$$u(t) = u(0) + 1 - e^{-t}$$

και της

$$\frac{du}{dt} = -u,\ u(0) = c.$$

είναι

$$u(t) = e^{-t}u(0)$$

Για κάθε δυνατή τιμή του $u(0)$ υπάρχει μια λύση. Παρακάτω παρουσιάζονται οι ακριβείς λύσεις για κάθε μια από τις προηγούμενες εξισώσεις.
Προσέξτε ότι για δεδομένο t, οι ακριβείς λύσεις της 1ης εξίσωσης έχουν την ίδια κλίση. Αντίθετα, αυτό δεν ισχύει για τη δεύτερη εξίσωση.

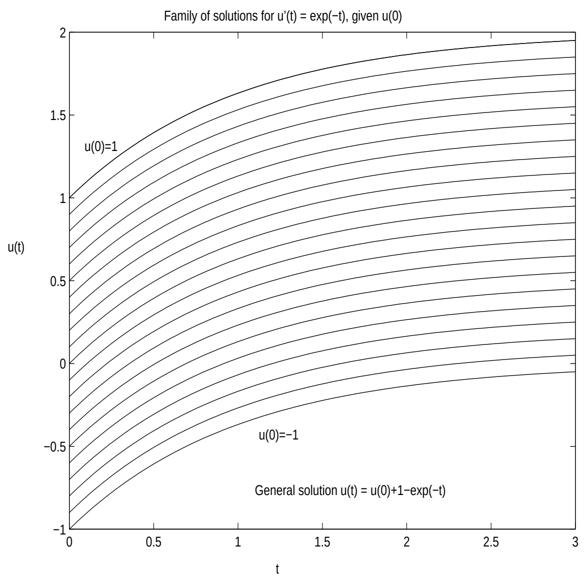
Μερικά μέλη της οικογένειας όλων των λύσεων της 1ης ΣΔΕ με διαφορετική διακριτότητα $u(t) = u(0) + 1 - e^{-t}$ φαίνονται στο παρακάτω διάγραμμα.

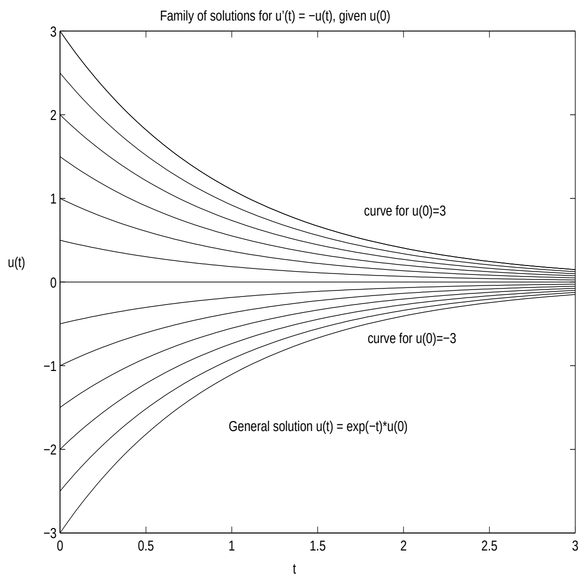
Παρατηρήσεις Το παραπάνω πρόβλημα είναι ΣΔΕ πρώτης τάξης αρκετά γενικό γιατί πολλές ΣΔΕ μπορούν να μετασχηματιστούν και να λάβουν και να λυθούν σε αυτή τη μορφή:
Παράδειγμα 1.

$$\begin{aligned} \frac{d^3u}{dt^3} &= f(t,u,u',u'') \\ u(0) = \gamma_1, u'(0) = \gamma_2, u''(0) = \gamma_3. \end{aligned}$$

Τότε θέτουμε

$$\eta_1 = u, \qquad \eta_2 = u', \qquad \eta_3 = u''$$





οπότε προκύπτει το σύστημα ΣΔΕ:

$$\begin{array}{ll} \eta_1^{'} = \eta_2, & \eta_1(0) = \gamma_1 \\ \eta_2^{'} = \eta_3, & \eta_2(0) = \gamma_2 \\ \eta_3^{'} = f(t, \eta_1, \eta_2, \eta_3), & \eta_3(0) = \gamma_3 \end{array}$$

Αν για παράδειγμα η f είναι γραμμική συνάρτηση, π.χ.

$$f(t, u, u', u'') = -2u - 3u' - 4u''$$

μπορούμε να γράψουμε:

$$\frac{d\eta}{dt} = A\eta$$

όπου

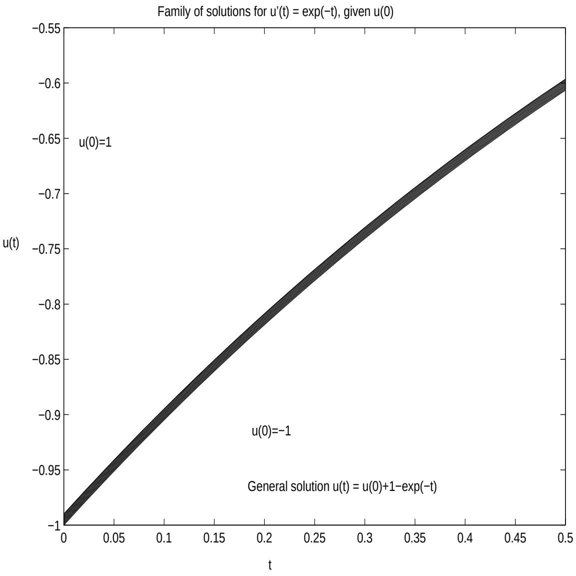
$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -2 & -3 & -4 \end{pmatrix}, \eta = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{pmatrix}$$

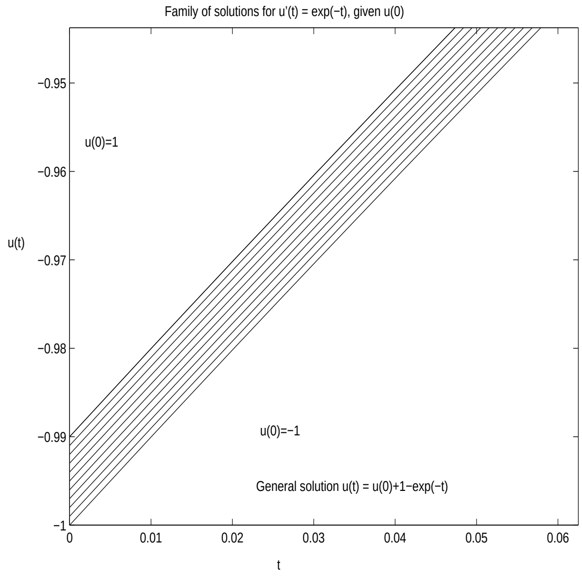
και να υπολογίσουμε τη λύση μέσω του παραπάνω συστήματος ΣΔΕ. □

Κατηγορίες μεθόδων για προβλήματα αρχικών τιμών

Μονοβηματικές μέθοδοι: Προσεγγίζουμε την τιμή για την επόμενη χρονική στιγμή χρησιμοποιώντας την τιμή της τωρινής τιμής: π.χ. μέθοδοι Euler, Runge-Kutta.

Πολυβηματικές μέθοδοι Προσεγγίζουμε την τιμή για την επόμενη χρονική στιγμή χρησιμοποιώντας τις τιμές από 2 ή περισσότερες προηγούμενες χρονικές στιγμές: π.χ. μέθοδος Adams-Bashford-Moulton.





Θέματα:

Επιλογή μεθόδου.

Εκτίμηση σφάλματος.

Επιλογή παραμέτρων της μεθόδου: π.χ. προσαρμογή μεγέθους βήματος.

Αρχικοποίηση μεθόδου.

Αριθμητική επίλυση Έστω

$$\frac{du}{dt} = f(t,u), \qquad \text{με αρχική τιμή } u(t_0) = c.$$

Ζητούμενο: Να μπορούμε να προσεγγίσουμε την λύση $u(t)$ με αποδεκτό σφάλμα χρησιμοποιώντας κατάλληλο βήμα. Μια μέθοδος: Έστω ότι υπάρχουν οι u' και u'' και ότι είναι συνεχείς στο διάστημα $[t_0, T]$. Τότε από Taylor:

$$u(t+\Delta t) = u(t) + \Delta t u'(t) + \frac{\Delta t^2}{2} u''(t+\theta\Delta t)$$

για κάποιο $\theta \in (0,1)$.
Μέθοδος Euler

$$\frac{d}{dt}u(t) = \frac{u(t+\Delta t) - u(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

και καταλήγουμε στις προσεγγίσεις

$$\frac{U_{k+1} - U_k}{\Delta t} = f(t_k, U_k), \qquad \text{με αρχική τιμή } U_0 = c.$$

επομένως
$$U_{k+1} = U_k + \Delta t f(t_k, U_k), \qquad \text{με αρχική τιμή } U_0 = c.$$
Προσεγγίσεις:
$$\begin{aligned} U_0 &= c \\ U_1 &= U_0 + \Delta t_1 f(t_0, U_0) \\ U_2 &= U_1 + \Delta t_2 f(t_1, U_1) \\ &\cdots \\ U_k &= U_{k-1} + \Delta t_k f(t_{k-1}, U_{k-1})) \end{aligned}$$

$s = 0$
repeat
  υπολογισμός του $F_k = f(t_k, U_k)$
  επιλογή βήματος Δt_k
  $t_{k+1} = t_k + \Delta t_k$
  $U_{k+1} = U_k + \Delta t_k F_k$
  $s = s + 1$
until $(t_{k+1} \geq t_{\max})$

- Σε κάθε βήμα, υπολογίζεται η τιμή του U στο νέο κόμβο t_{k+1} χρησιμοποιώντας την τιμή στον κόμβο t_k.
- $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$ μήκος βήματος
- *προς τα εμπρός Euler*
- επιτρέπει την επιλογή διαφορετικού Δt κάθε φορά.
- Η εμπρός Euler είναι εύχρηστη αλλά ... ΠΡΟΣΟΧΗ γιατί είναι και εύθραυστη!

Εφαρμογή της Euler Αν την εφαρμόσουμε στις δυο εξισώσεις που είδαμε στην αρχή:
$$1)\;\; u'(t) = e^{-t} \qquad\qquad 2)\;\; u'(t) = -u(t).$$
Ας δούμε τι γίνεται στην 1η εξίσωση:
Στο πρώτο βήμα, υπολογίζουμε
$$U_1 = U_0 + \Delta_0 f(0) = U_0 + \Delta_0 exp(-0)$$
επομένως, η λύση στο $t_1 = t_0 + \Delta_0$ είναι στο σημείο U_1 για το οποίο ισχύει ότι
$$\frac{U_1 - U_0}{\Delta_0} = f(0)$$
επομένως, από το $(0, U_0)$, χαράζουμε μια γραμμή με κλίση $f(0)$, θέτουμε $U_1 = U_0 + \Delta_0 f(0)$, και θέτουμε σαν σημείο της λύσης μας το (t_1, U_1).
Προσοχή:

- Το σημείο αυτό δεν βρίσκεται πλέον κατ' ανάγκη στην «τροχιά» $u(t) = u_0 + 1 - e^{-t}$ της θεωρητικής λύσης του $u'(t) = e^{-t}, u(0) = u_0$,
- ... όμως θα βρίσκεται στην τροχιά κάποιας άλλης καμπύλης από τις λύσεις της ίδιας ΣΔΕ που αντιστοιχεί όμως σε διαφορετικές αρχικές συνθήκες.
- Επομένως, σε κάθε βήμα, μπορεί να αλλάζουμε τροχιά. Σημαντικό, σε κάθε σημείο, οι αποστάσεις των σημείων που υπολογίζονται από εκείνα της θεωρητικής λύσης να μη γίνονται μεγάλες,
- ... κάτι που εξαρτάται από
  1. την ευστάθεια της ΣΔΕ, καθώς και από
  2. την ευστάθεια της αριθμητικής μεθόδου.
  3. Για να έχουμε την ελπίδα να υπολογίζεται καλή προσέγγιση στη λύση είναι απαραίτητο να υποθέσουμε ότι το μαθηματικό πρόβλημα έχει «καλή κατάσταση», δηλ. ότι μικρές αλλαγές στα δεδομένα δεν οδηγούν σε μεγάλες αλλαγές στη λύση. Αν συμβαίνει αυτό λέμε ότι το πρόβλημα είναι κακά τοποθετημένο[1] και ότι η λύση είναι ασταθής.

Ακρίβεια και ευστάθεια

- Αν επιλέξουμε μια μέθοδο επίλυσης (π.χ. εμπρός Euler), η παράμετρος που έχουμε διαθέσιμη για να ελέγξουμε το σφάλμα και την ευστάθεια είναι το μέγεθος του βήματος Δt.

Τυπική κατάσταση:

Ο χρήστης δίνει στο πρόγραμμα ένα μέγιστο σφάλμα ϵ για την απάντηση

Το πρόγραμμα επιλέγει ή προσαρμόζει το Δt ώστε το μέγιστο σφάλμα στην υπολογισμένη λύση να είναι φραγμένο από ϵ

Χρειάζεται τρόπος για να εκτιμάται η ακρίβεια των υπολογισμών

Σύγκλιση μεθόδων για ΣΔΕ αρχικής τιμής Μία αριθμητική μέθοδος συγκλίνει αν για κάθε ΣΔΕ σαν την παραπάνω, με συνάρτηση Lipschitz f και κάθε $T > 0$ ισχύει ότι

$$\lim_{h\to 0} \max_{j=0,1,\ldots,\lceil T/h\rceil} \|u(t_j) - U_j(h)\| = 0$$

Αναγκαιότητα: Αν μια μέθοδος δεν συγκλίνει τότε δεν είναι αποδεκτή ...

[1] ill-posed αντί για «καλά τοποθετημένο» (well-posed).

ενώ ακόμα και να συγκλίνει δεν συνεπάγεται αποδεκτά αποτελέσματα!

- πρέπει να συγκλίνει «αρκετά γρήγορα»
- πρέπει το σφάλμα να είναι αποδεκτό για το h που χρησιμοποιούμε

Σύγκλιση εμπρός Euler Περίπτωση $u \in \mathbb{R}$ και σταθερού $\Delta t = h$.
Το πλέγμα στο διάστημα $[0, T]$ είναι

$$\Omega_h = [0, \Delta t, 2\Delta t, ..., s\Delta t, (s+1)\Delta t], T = (s+1)\Delta t$$

Προσεγγίζουμε με την «κομβική συνάρτηση» (διάνυσμα)

$$U = [U_0, U_1, ..., U_{k+1}]$$

Σφάλμα

$$e_j(h) = u(t_j) - U_j$$

σύγκλιση
$$\Updownarrow$$
$$\lim_{h\to 0} \max_j \|e_j(h)\| = 0$$

Υποθέτουμε ότι η $f(t, u)$ είναι διαφορίσιμη και συνεχής, οπότε και οι $u(t), u'(t), u''(t)$ είναι συνεχείς.

$$\begin{aligned}
u(t_{j+1}) - U_{j+1} &= u(t_j) + hu'(t_j) + h^2 u''(t_j + \theta_j h) - U_j - hf(t_j, U_j), , \theta_j \in (0, 1) \\
&= [u(t_j) - U_j] + hf(t_j, u(t_j)) - hf(t_j, U_j) + h^2 u''(t_j + \theta_j h) \\
e_{j+1} &= e_j + h[f(t_j, u(t_j)) - f(t_j, U_j)] + h^2 u''(t_j + \theta_j h) \\
\|e_{j+1}\| &\leq \|e_j\| + h\lambda\|e_j\| + O(h^2) = (1 + \lambda h)\|e_j\| + \rho h^2
\end{aligned}$$

αν η u'' είναι συνεχής στο $[t_j, t_{j+1}]$.
Με επαγωγή μπορεί να δειχθεί η ανισότητα

$$\|e_j\| \leq \frac{\rho}{\lambda} h[(1 + \lambda h)^j - 1], \qquad j = 0, 1, ...$$

Επίσης $1 + h\lambda < e^{h\lambda}$ οπότε

$$\begin{aligned}
\|e_j\| &\leq \frac{\rho}{\lambda} h[e^{jh\lambda} - 1], \qquad j = 0, 1, ... \\
&\leq \frac{\rho}{\lambda} h[e^{(s+1)h\lambda} - 1] = \frac{\rho}{\lambda} h[e^{T\lambda} - 1] \leq h\rho \frac{e^{T\lambda} - 1}{\lambda} \\
\|e_j\| &\xrightarrow{h\to 0} 0, \qquad \text{αν και το φράγμα δεν είναι πρακτικό}
\end{aligned}$$

Διάδοση σφάλματος διακριτοποίησης σε αριθμητική μέθοδο Θα χρησιμοποιήσουμε την Euler ως παράδειγμα:

$$u(t_{k+1}) = u(t_k) + \Delta t_k u'(t_k) + \frac{\Delta t_k^2}{2} u''(\hat{t}_k), \qquad \text{όπου } t_k < \hat{t}_k < t_{k+1}.$$

επομένως

$$u(t_{k+1}) - U_{k+1} = (u(t_k) - U_k) + \Delta t_k (f(t_k, u(t_k)) - f(t_k, U_k)) + \frac{\Delta t_k^2}{2} u''(\hat{t}_k)$$

και από το θεώρημα της ενδιάμεσης τιμής

$$f(t_k, u(t_k)) - f(t_k, U_k) = \frac{\partial f}{\partial u}(u(t_k) - U_k)$$

επομένως

$$\begin{aligned} u(t_{k+1}) - U_{k+1} &= (u(t_k) - U_k) + \Delta t_k \frac{\partial f}{\partial u}(u(t_k) - U_k) + \frac{\Delta t_k^2}{2} u''(\hat{t}_k), \\ &= (I + \Delta t_k \frac{\partial f}{\partial u})(u(t_k) - U_k) + \frac{\Delta t_k^2}{2} u''(\hat{t}_k) \end{aligned}$$

όπου $t_k < \hat{t}_k < t_{k+1}$.

Ανάλυση σφάλματος Έστω ότι $h = \Delta t_k$

Τοπικό σφάλμα διακριτοποίησης της μεθόδου στο t_{k+1}: Το σφάλμα αν ίσχυε ότι η λύση στον κόμβο t_s ήταν ακριβής, δηλ. $U_k = u(t_s)$.

- Η μέθοδος είναι **συνεπής αν το ΤΣΔ** $\to 0$ **καθώς** $h \to 0$.

Αν το τοπικό σφάλμα διακριτοποίησης είναι τάξης $O(h^{p+1})$ λέμε ότι η μέθοδος επίλυσης είναι τάξης p.

Ολικό σφάλμα διακριτοποίησης της μεθόδου στο t_{k+1}: Η διαφορά $u(t_{k+1}) - U_{k+1}$ μεταξύ θεωρητικής λύσης και υπολογισμένης λύσης.

Ο χρήστης δίνει ένα άνω φράγμα/κατώφλι για το ολικό αποδεκτό σφάλμα

- Η μέθοδος **συγκλίνει αν το ΟΣΔ** $\to 0$ **καθώς** $h \to 0$.

Σφάλμα μετάδοσης ο όρος $(I + \Delta t_k \frac{\partial f}{\partial u})(u(t_k) - U_k)$.

Αν το σφάλμα μετάδοσης μεγεθύνεται σε κάθε βήμα θα έχουμε αριθμητική αστάθεια

Συντελεστής μεγέθυνσης: μέτρο για τον όρο $I + \Delta t_k \frac{\partial f}{\partial u}$.

Ο συντελεστής μεγέθυνσης καθορίζει την ευστάθεια της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης

Σημαντική ιδιότητα:

$$\boxed{\text{ΣΥΝΕΠΕΙΑ + ΕΥΣΤΑΘΕΙΑ} \Rightarrow \text{ΣΥΓΚΛΙΣΗ}}$$