ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ Ι

ΔΙΑΛΕΞΗ 18, 8/01/10

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

Παρατηρήσεις Θα εξετάσουμε τι γίνεται όταν εφαρμόσουμε τη RK-2 (Heun) για να υπολογίσουμε αριθμητικά τη λύση του προβλήματος μοντέλου

$$u'(t) = au(t), u(0) = c.$$

Αντικαθιστώντας την τιμή $f(t, u) = au(t)$ έχουμε:

$$\begin{aligned} K_1 &= aU_n \\ K_2 &= f(t_{n+1}, U_n + hK_1) = a(U_n + haU_n) \\ &= aU_n + ha^2U_n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ &= U_n + \frac{h}{2}(aU_n + aU_n + ha^2U_n) \\ &= (1 + ha + \frac{(ha)^2}{2})U_n \end{aligned}$$

ΠΡΟΣΟΧΗ: Επομένως φαίνεται ότι έχουμε μια ακριβέστερη προσέγγιση της αναλυτικής λύσης (που είναι $u(t_{n+1}) = e^{ah}u(t_n)$) σε σύγκριση με την εμπρός Euler.
Σφάλμα και ευστάθεια Με λίγη προσοχή συνδυάζοντας τα παραπάνω φαίνεται ότι το ολικό σφάλμα θα είναι

$$|u(t_{n+1}) - U_{n+1}| = |(1 + ha + \frac{(ha)^2}{2})(u(t_n) - U_n) + \frac{(h)^3}{3!}u'''(\hat{t}_n)|$$

επομένως, αν η u''' είναι φραγμένη, το ΤΣΔ είναι $O(h^3)$ και η μέθοδος θα είναι 2ης τάξης.
Βλέπετε επίσης ότι ο συντελεστής μετάδοσης είναι $|1 + ha + \frac{(ha)^2}{2})|$ και η ευστάθεια της μεθόδου απαιτεί επιλογή h τέτοιου ώστε

$$|1 + ha + \frac{(ha)^2}{2})| \leq 1.$$

Παράδειγμα

$$\frac{d}{dt}u(t) = -u(t)/2, \qquad u(0) = 1.$$

Χρησιμοποιούμε την RK-2 (Heun) που περιγράψαμε πιο πριν

t	$u(t) = e^{-t/2}$	$N = 5$	$N = 10$	$N = 20$
0.2	0.9048	0.9050	0.9049	0.9048
0.6	0.7408	0.7412	0.7409	0.7408
1.0	0.6065	0.6071	0.6067	0.6066

«Ακριβείς» και υπολογισμένες τιμές U_j με $\Delta t = 1/N$

Η διακύμανση του απόλυτου σφάλματος σε κάθε σημείο:

t	$u(t) = e^{-t/2}$	$N = 5$	$N = 10$	$N = 20$
0.2	0.9048	$0.1626e-03$	$0.0391e-03$	$0.0960e-04$
0.6	0.7408	$0.3994e-03$	$0.0962e-03$	$0.2359e-04$
1.0	0.6065	$0.5451e-03$	$0.1312e-03$	$0.3219e-04$

καθώς $h \leftarrow \frac{h}{2}$, το «ολικό σφάλμα διακριτοποίησης» υποτετραπλασιάζεται

επιβεβαιώνοντας ότι η συγκεκριμένη RK είναι 2ης τάξης.

Επίλυση με κώδικες MATLAB Το $u'(t) = f(t, u)$, $u(0) = 1$ στο διάστημα $[0, 10]$ όπου το f είναι ένα από τα παρακάτω:

$$\begin{aligned}
f_1(t,u) &= 0, \text{λύση } \; u(t) = 1 \\
f_2(t,u) &= t, \text{ λύση } \; u(t) = 1 + t^2/2 \\
f_3(t,u) &= t^2, \text{ λύση } \; u(t) = 1 + t^3/3 \\
f_4(t,u) &= 1/(1-3t), \text{ λύση } \; 1 - \ln(1-3t)/3 \\
f_5(t,u) &= -10 * u, \text{ λύση } \; u(t) = \exp(-10 * t) \\
f_6(t,u) &= Au, A = [-1, 0; -1, -10],, \text{ λύση } \; \exp(A) * u(0)
\end{aligned}$$

στο f_6 η αρχική συνθήκη είναι $u(0) = [1; 1]$.
Επεξηγήσεις για τους επιλυτές της MATLAB
Χρησιμοποιούν προεπιλεγμένες τιμές (defaults) για αρκετές παραμέτρους τους ώστε να μην επιβαρύνουν τον χρήστη με πολλές επιλογές.
Αναφέρουμε μερικες:

μέγιστο σχετ. ΤΣΔ (`RelTol`, προεπιλ. $1e-3$.

μέγιστο απόλ. ΤΣΔ `AbsTol`, προεπιλ. $1e-6$

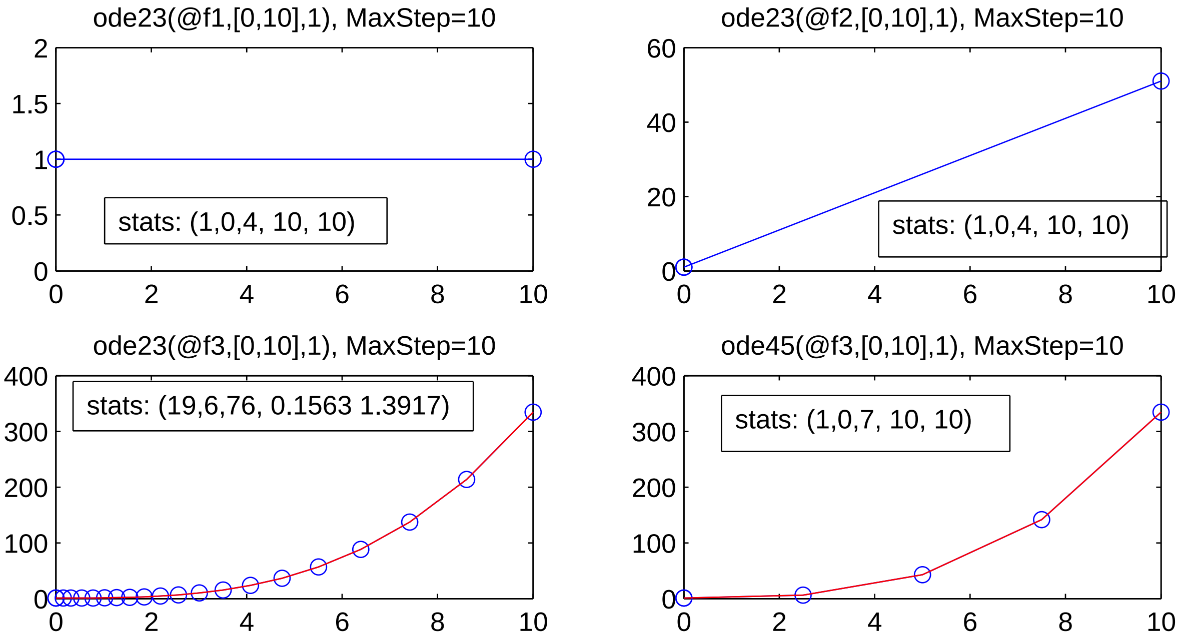
μέγιστο βήμα `MaxStep`, προεπιλ. `1/10` του `TSPAN(end) − TSPAN(1)`, δηλ. του ολικού χρονικού διαστήματος ολοκλήρωσης.

Οι προεπιλεγμένες τιμές αλλάζουν με τη συνάρτηση `odeset` που αναθέτει τις τιμές που θέλουμε στη μεταβλητή MATLAB `OPTIONS`. Π.χ.

```
OPTIONS = odeset('RelTol',1e-2,'MaxStep',0.5)
```

```
[TOUT,YOUT] = ode23(@myode,TSPAN,Y0,OPTIONS)
```

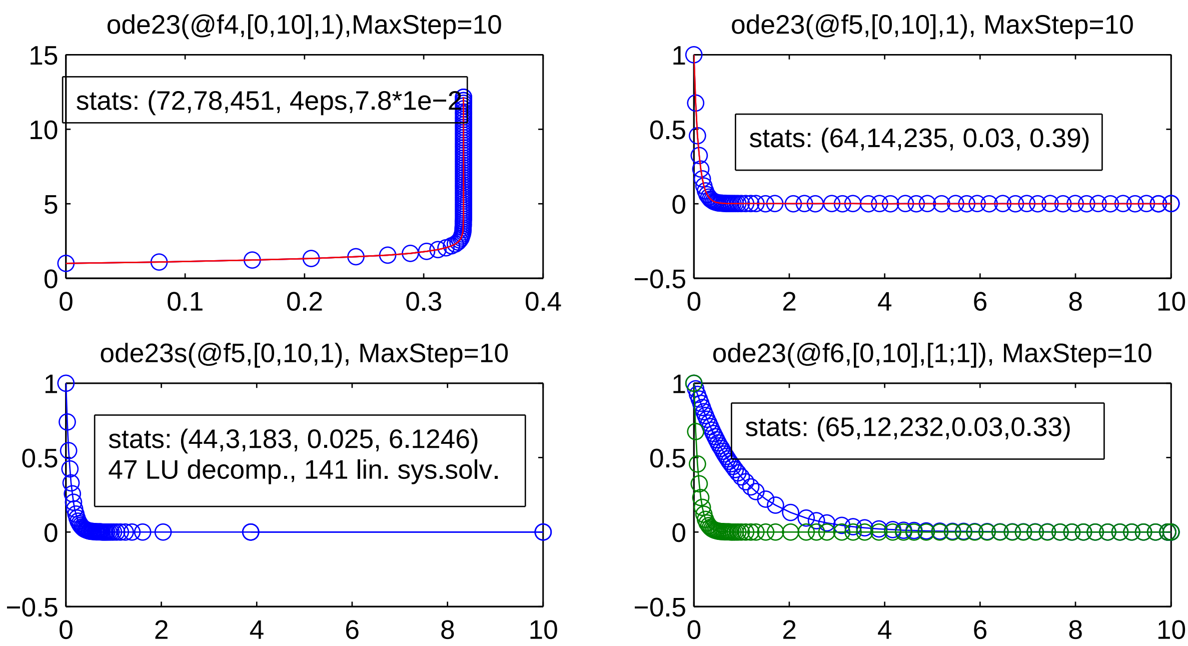
`ode23, ode45` στις f_1, f_2, f_3



Σχόλια:

- Στα `stats` καταγράφουμε 1) πλήθος βημάτων, 2) πλήθος αποτυχημένων βημάτων, 3) πλήθος υπολογισμών της f, 4) ελάχιστο βήμα, 5) μέγιστο βήμα.
- Λόγω της τάξης τους, η `ode23` λύνει ακριβώς για τα f_1, f_2 σε ένα μόνο βήμα. Η `ode45` λύνει ακριβώς και για την f_3.
- Με συνεχή γραμμή σημειώνονται οι ακριβείς λύσεις.
- Στην παράσταση της `ode45` σημειώνονται και οι ενδιάμεσες τιμές που υπολογίζονται από την ενσωματωμένη RK

`ode23, ode23s` στις f_4, f_5, f_6



Σχόλια:

- Για την `ode23s` (έμμεση Runge-Kutta) δίνουμε και στοιχεία που αφορούν τις επιλύσεις γραμμικών συστημάτων.
- Ο επιλυτής για την f_4 φθάνει μόνο λίγο πριν το $t = 1/3$ όπου η συνάρτηση είναι μοναδική και επιστρέφει μήνυμα σχετικά με τη δυσκολία που αντιμετωπίζει. Το βήμα γίνεται πάρα πολύ μικρό λόγω του ότι εκεί η u δεν είναι ακριβής.
- Οι f_5 και f_6 είναι ελαφρά δύσκαμπτες και το βήμα αναγκάζεται να γίνει μικρό. Έτσι αποφεύγεται η αστάθεια. Ο έμμεσος επιλυτής `ode23s` χρειάζεται πολύ λιγότερα βήματα.

Πρόβλεψη, εκτίμηση σφάλματος $\rightarrow$ προσαρμογή βήματος

- Σημαντικό στοιχείο σε πακέτα επίλυσης ΣΔΕ είναι η ενσωμάτωση μηχανισμού για την αυτόματη προσαρμογή του βήματος.
- Εξετάζουμε το ζήτημα για προβλήματα αρχικών τιμών.
- Αφετηρία είναι η πρόβλεψη της συμπεριφοράς του σφάλματος διακριτοποίησης (π.χ. το ΤΣΔ).
- Βασική ιδέα: α) Επιλύουμε με «δύο τρόπους», β) εκτιμούμε το σφάλμα διακριτοποίησης συνδυάζοντας τα αποτελέσματα, γ) προσαρμόζουμε το βήμα.

Χρήσιμο θωρητικό αποτέλεσμα: Αν $f(t, u)$ είναι «αρκετά ομαλή σε κατάλληλο πεδίο ορισμού» και $U(t, h)$ συμβολίζει τη λύση που υπολογίζεται από την εφαρμογή μονοβηματικής μεθόδου τάξης p με βήμα h στο $u' = f(t,u), u(t_0) = u_0$, τότε για κάθε $h_n = (t-t_0)/n$, $n = 1, 2, ...$, ισχύει το ασυμπτωτικό ανάπτυγμα:

$$U(t,h) = u(t) + h^p e_p(t) + \cdots + h^N e_N(t) + h^{N+1} E_{N+1}(t;h),$$

όπου $e_k(t_0) = 0$ για $k = p, p+1, ..., N$. Οι συναρτήσεις e_k είναι ανεξάρτητες του h και ο όρος $E_{N+1}(t;h)$ είναι φραγμένος για κάθε t και όλα τα h_n.

Μια ιδέα Αν χρησιμοποιήσουμε εμπρός Euler με δύο διαφορετικά βήματα $h, h/2$, επειδή γνωρίζουμε ότι η μέθοδος είναι 1ης τάξης, ισχύει συμβολίζοντας με $U_{n,h}$ το U_n υπολογισμένο με βήμα h,

$$\begin{aligned} U_{n,h} &= u(t_n) + \alpha h + O(h^2) \\ U_{n,h/2}(t) &= u(t_n) + \alpha\frac{h}{2} + O(h^2) \end{aligned}$$

όπου το α εξαρτάται από την εξίσωση, όχι από το h.

$$U_{n,h} - U_{n,h/2} = \alpha\frac{h}{2} + O(h^2)$$

Άρα το $\mathrm{err} := 2\|U_{n,h} - U_{n,h/2}\|$ είναι ένδειξη για το σφάλμα διακριτοποίησης και μπορεί να καθοδηγήσει την επιλογή του h. π.χ. θα μπορούσαμε να απαιτήσουμε $\mathrm{err} \leq \delta$.

Ιδέα παρεκβολής: Προσέξτε επίσης ότι

$$U_{n,h} - 2U_{n,h/2} = -u(t_n) + O(h^2)$$

επομένως η προσέγγιση

$$\hat{U} := 2U_{n,h/2} - U_{n,h}$$

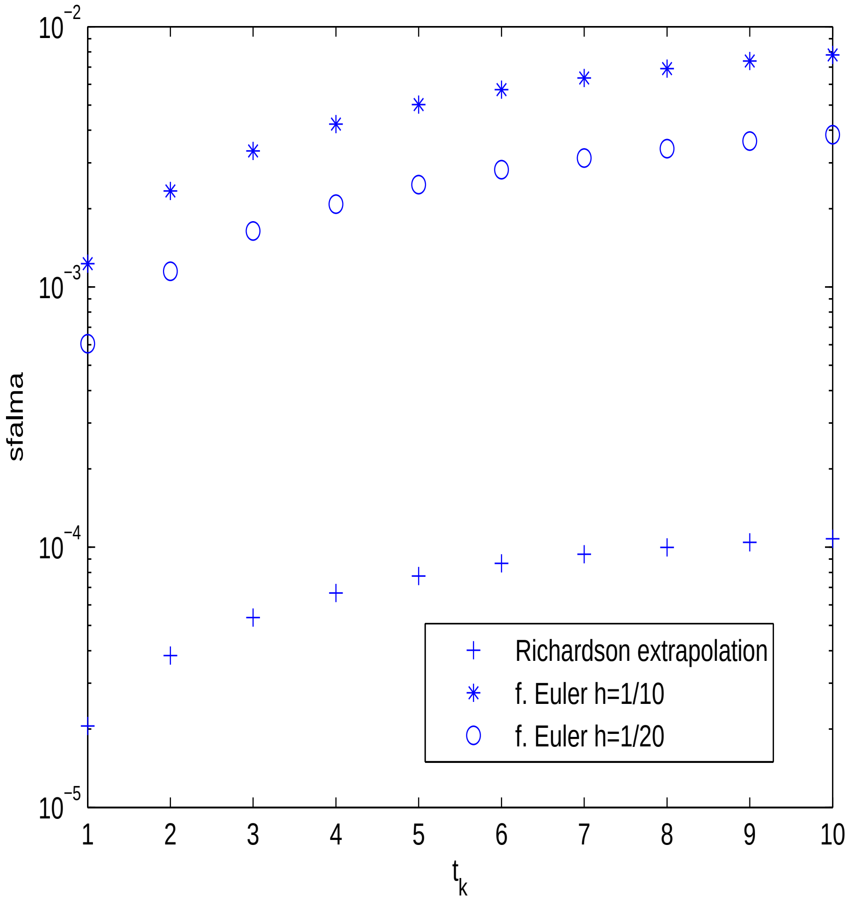
έχει τάξη ακρίβειας κατά 1 μεγαλύτερη της Euler.

Παράδειγμα Στην ΣΔΕ εξίσωση που ήδη συναντήσαμε (ακριβής λύση $u(t) = \exp(-t/2)u(0)$:

$$u'(t) = -u/2, u(0) = 1$$

Χρησιμοποιούμε εμπρός Euler με βήματα $h = 1/10, 1/20$ και συνδυάζουμε τα αποτελέσματα στα σημεία $t = 0.1, 0.2, ..., 1$ με τον τύπο της παρεκβολής, $\hat{U}(t) := 2U_{h/2}(t) - U_h(t)$.

Στο σχήμα παρουσιάζονται τα απόλυτα σφάλματα για α) εμπρός Euler, $h = 0.1$, β) εμπρός Euler, $h = 0.05$, γ) παρεκβολή Richardson των παραπάνω. Επομένως επιβεβαιώνονται οι θεωρητικές προβλέψεις για την παρεκβολή.



Μια άλλη ιδέα Εφαρμόζουμε δύο μεθόδους με ίδιο βήμα αλλά διαφορετική τάξη και εκτιμούμε το ΤΣΔ από τη διαφορά των υπολογισμένων τιμών. Π.χ. αν U_{n+1} είναι η τιμή από RK τάξης p και V_{n+1} από RK τάξης $q > p$ τότε

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= \tilde{u}(t_{n+1}) + \alpha h^{p+1} + O(h^{p+2}) \\ V_{n+1} &= \tilde{u}(t_{n+1}) + O(h^{p+2}) \end{aligned}$$

όπου $\tilde{u}(t_{n+1})$ είναι η ακριβής λύση της ίδιας ΣΔΕ αλλά στο $[t_n, t_{n+1}]$ με αρχική συνθήκη $u(t_n) = U_n$. Όπως πριν, το α δεν εξαρτάται από το h. Επομένως

$$U_{n+1} - V_{n+1} = \alpha h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

και το $\|U_{n+1} - V_{n+1}\|$ μπορεί να εκληφθεί ως ένδειξη του ΤΣΔ.
Σχόλια

- Οι παραπάνω ιδέες φαίνεται να δουλεύουν, είναι όμως ακριβές γιατί μοιάζει ότι χρειάζονται την εφαρμογή δύο μεθόδων για ένα αποτέλεσμα. Μάλιστα, αν χρησιμοποιήσουμε υποδιπλασιασμό βήματος, πρέπει να κάνουμε και διπλάσια βήματα...

- Κανένας χρήστης δεν ενδιαφέρεται για εκτιμητές σφάλματος που στοιχίζουν πολύ… υπάρχουν έξυπνα τρυκ για οικονομική υλοποίηση!
- Στην περίπτωση που τρέχουμε διαφορετικές μεθόδους διαφορετικής τάξης, να τις σχεδιάσουμε ώστε η μία να «επαναχρησιμοποιεί» τα αποτελέσματα της άλλης
- Ενσωματωμένες μέθοδοι Runge-Kutta (embedded RK methods)

Ενσωματωμένες Runge-Kutta: Μια μέθοδος RK(2,3) Στην πράξη, χρησιμοποιούνται μέθοδοι που επιτρέπουν την εκτίμηση του ΤΣΔ

$$
\begin{aligned}
K_1 &= f(t_n, U_n) \\
K_2 &= f(t_n + \frac{h}{2}, U_n + \frac{h}{2}K_1) \\
K_3 &= f(t_n + \frac{3h}{4}, U_n + \frac{3h}{4}K_2) \\
t_{n+1} &= t_n + h \\
U_{n+1} &= U_n + \frac{h}{72}(16K_1 + 24K_2 + 32K_3) \\
K_4 &= f(t_{n+1}, U_{n+1}) \\
V_{n+1} &= U_n + \frac{h}{72}(21K_1 + 18K_2 + 24K_3 + 9K_4) \\
E_{n+1} &= \frac{h}{72}(-5K_1 + 6K_2 + 8K_3 - 9K_4)
\end{aligned}
$$

Ο όρος E_{n+1} χρησιμοποιείται για εκτίμηση του ΤΣΔ και προσαρμογή του βήματος ενώ δεν χρειάζεται να υπολογίσουμε τον V_{n+1}.

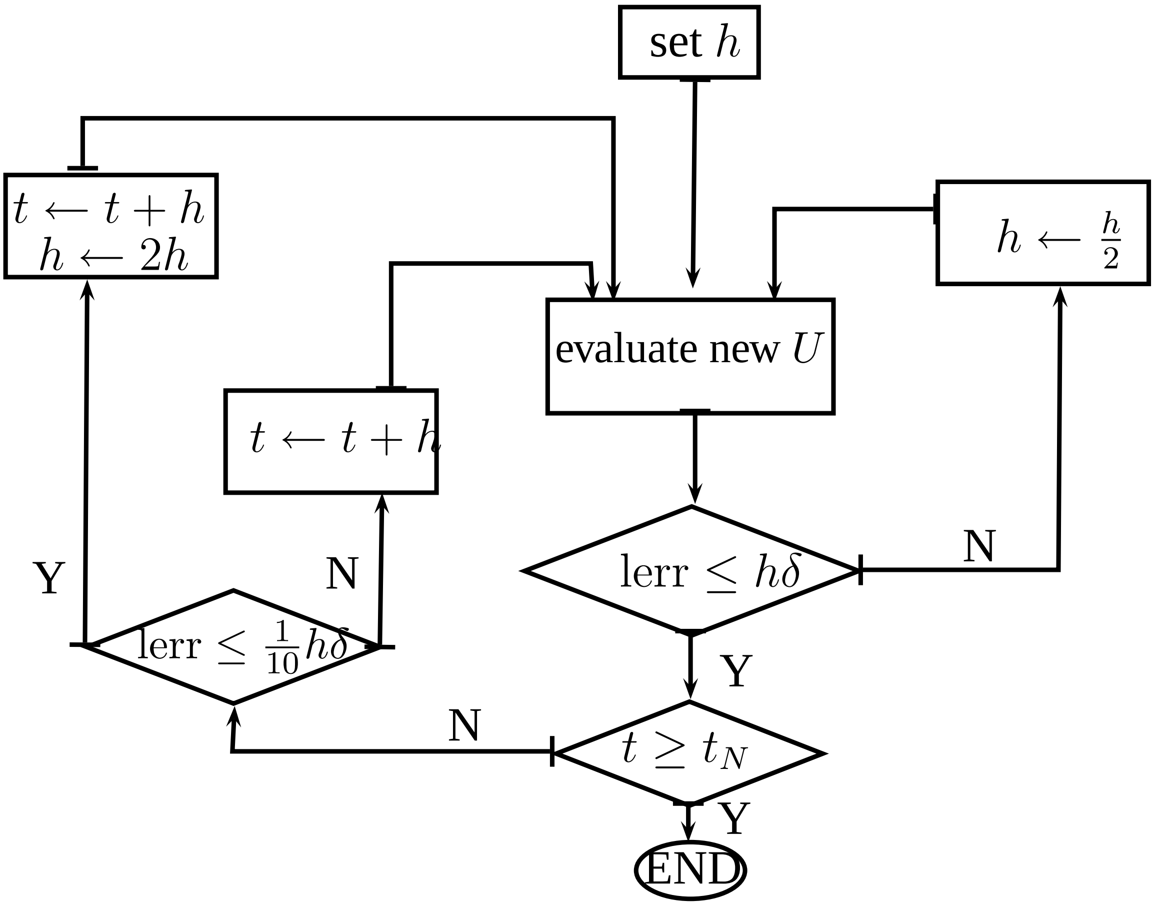
Παρατηρήσεις Τα παραπάνω αποτελούν συνδυασμό δυο μεθόδων RK, τάξης 2 και τάξης 3, που επιτρέπουν την εκτίμηση του σφάλματος.

Οφείλονται στους Bogacki & Shampine και είναι η βάση της `ode23` στη MATLAB.

Σύνοψη σε πίνακες Butcher

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
\frac{3}{4} & 0 & \frac{1}{2} & & \\
\hline
 & \frac{2}{9} & \frac{1}{3} & \frac{4}{9} & \\
 & \frac{7}{24} & \frac{1}{4} & \frac{1}{3} & \frac{1}{8}
\end{array}
$$

Προσαρμογή βήματος (από A. Iserles'96) Έστω ότι η εκτίμηση για το ΤΣΔ είναι lerr.

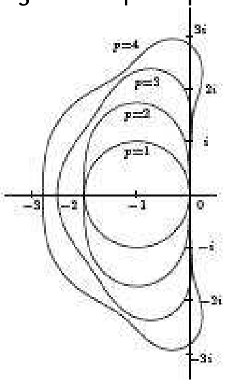


<u>Σύνοψη</u>

- Επανεπίλυση με την ίδια μέθοδο και υποδιπλάσιο βήμα - παρεκβολή
- Επανεπίλυση με τη μέθοδο διαφορετικής τάξης - ενσωματωμένες Runge-Kutta

<u>Διερεύνηση ευστάθειας</u>

Για να εξετάσουμε την ευστάθεια των άμεσων RK $s \leq 4$ σταδίων τις εφαρμόζουμε στο $u' = \lambda h$.



λ που επιτρέπονται ώστε να μην υπάρχει αστάθεια βρίσκονται εντός

$$:= \quad \{z := h\lambda || p_n(z)| \leq 1\}, \quad p_n(z) = \sum_{j=0}^{s} \frac{z^j}{j!}$$

Η εικόνα προέρχεται από τη Scholarpedia[1] υπό την επίβλεψη του John Butcher. Παρατηρούμε

[1] http://www.scholarpedia.org/article/Runge-Kutta$_{m}ethods$

ότι η περιοχή αυστάθειας μεγαλώνει με την τάξη της μεθόδου.

Παρεκβολή Richardson[2] Τι είναι· Γενική μέθοδος για τη βελτίωση προσέγγισης. Έστω ότι θέλουμε να προσεγγίσουμε την άγνωστη ποσότητα $W(0)$ και ότι την προσεγγίζουμε με κάποια μέθοδο που χρησιμοποιεί κάποιο βήμα, έστω h. Έστω ότι μπορούμε να επιλέξουμε το βήμα όπως θέλουμε και ότι ισχύει το «ασυμπτωτικό ανάπτυγμα»:

$$W(h) \; = \; W(0) + \rho_1 h^{p_1} + \cdots + \rho_{p_s} h^{p_s} + O(h^{p_{s+1}})$$

όπου τα $h, W(h), p_1 < \cdots < p_s$ είναι γνωστά και $p_{s+1} > p_s$. Προσοχή, το $W(0)$ δεν είναι γνωστό, αλλά η τιμή που προσεγγίζουμε μέσω $W(h)$!
Τι ζητάμε· Με συνδυασμό τιμών του $W(\gamma_j h)$ για επιλεγμένα γ_j να υπολογίσουμε

$$\tilde{(}W)(h) \; = \; W(0) + O(h^{p_{s+1}})$$

οπότε έχουμε μια προσέγγιση του $W(0)$ με σφάλμα $O(h^{p_{s+1}})$, δηλ. μικρότερο του αρχικού $O(h^{p_1})$.
ΠΡΟΣΟΧΗ: Η μέθοδος έχει πάρα πολλές εφαρμογές. Αποτελεί μια κλασική τεχνική επιτάχυνσης, ένα θέμα που ενδιαφέρει σε περιοχές πέραν της επίλυσης ΣΔΕ.

Μεθοδολογία Αν ορίσουμε s τιμές $\gamma_j \in (0,1), j = 1, ..., s$ που είναι αποδεκτές (δηλ. όπου υπολογίζεται το $W(\gamma_j h)$, γράφουμε

$$\begin{aligned}
W(h) &= W(0) + \rho_1 h^{p_1} + \cdot \rho_{p_s} h^{p_s} + O(h^{p_{s+1}}) \\
W(\gamma_1 h) &= W(0) + \rho_1 (\gamma_1 h)^{p_1} + \cdot \rho_{p_s} (\gamma_1 h^{p_s}) + O(h^{p_{s+1}}) \\
\vdots \; &\vdots \; \vdots \\
W(\gamma_s h) &= W(0) + \rho_1 (\gamma_s h)^{p_1} + \cdot \rho_{p_s} (\gamma_s h)^{p_s} + O(h^{p_{s+1}})
\end{aligned}$$

επομένως απαλείφοντας το $W(0)$,

$$\begin{aligned}
W(h) - W(\gamma_1 h) &= \rho_1 h^{p_1}(1 - \gamma_1^{p_1}) + \cdots + \rho_{p_s} h^{p_s}(1 - \gamma_1^{p_s}) + O(h^{p_{s+1}}) \\
\vdots \; &\vdots \; \vdots \\
W(h) - W(\gamma_s h) &= \rho_1 h^{p_1}(1 - \gamma_s^{p_1}) + \cdots + \rho_{p_s} h^{p_s}(1 - \gamma_s^{p_s}) + O(h^{p_{s+1}})
\end{aligned}$$

Εξαιρώντας τους όρους $O(h^{p_{s+1}})$, οι παραπάνω σχέσεις συνήθως επιτρέπουν να υπολογίσουμε προσεγγίσεις για τους συντελεστές ρ_j, ας τους ονομάσουμε $\hat{\rho}_1, ..., \hat{\rho}_{p_s}$ (σκεφτείτε το ως γραμμικό σύστημα) και με βάση αυτούς να κατασκευάσουμε καλύτερη προσέγγιση του $W(0)$:

$$\hat{W}(h) \; := \; W(h) - \hat{\rho}_1 h^{p_1} - \cdots - \hat{\rho}_{p_s} h^{p_s}$$

Προσέξτε: Γενικά

$$\hat{W}(h) \; = \; W(0) + O(h^{p_{s+1}})$$

Άκαμπτες ή Δύσκαμπτες (stiff) εξισώσεις

ΣΔΕ $u' = -c(u - \sin t) + \cos t, \qquad u(0) = 1$

Ακριβής λύση $u(t) = e^{-ct} + \sin t$

Αν $c \gg 0$, η λύση περιέχει ένα (συνήθως) παροδικό πολύ γρήγορα μεταβαλλόμενο μέλος και ένα αργά μεταβαλλόμενο μέρος

Περιορισμοί για Δt

- περιορισμός ακρίβειας
- *συνθήκη ευστάθειας*

Το πρόβλημα λέγεται δύσκαμπτο στην περιοχή της λύσης u αν υπάρχει συνιστώσα του u με μεγάλη διακύμανση σε σχέση με το μήκος $(b-a)^{-1}$, όπου $t \in [a, b]$.

Απαιτούνται έμμεσες μέθοδοι ή άμεσες μέθοδοι με μεγάλο χωρίο ευστάθειας