Př: Ukázka určení řádu metody numericky:

Uvažujeme CÚ $u'(t) = -u(t)$, $u(0) = 1$.
Počítáme $u(1) = ?$ Je možné určit přesné řešení $u^*(t) = e^{-t}$.

Odhad velikosti kroku pro metodu řádu p je

$$1 \cdot h^p < \varepsilon$$

, tj. např. pro Eulerovu metodu (1. řád) pro $\varepsilon = 10^{-2}$ dostáváme $h_{max} = 10^{-2}$.

Výsledky Eulerovy metody:

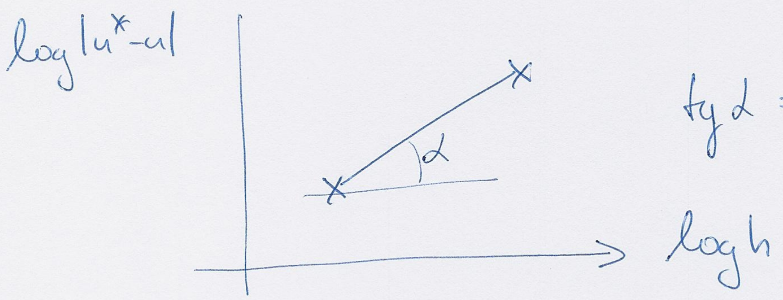
h	N	u^N	$\lvert u^N - u^*(1) \rvert$	$\lvert u_h^N - u_{0{,}0001}^{10000} \rvert$
0,01	100	0,36603234	$1{,}8 \cdot 10^{-3}$	$1{,}8 \cdot 10^{-3}$
0,001	1000	0,36769542	$1{,}8 \cdot 10^{-4}$	$1{,}8 \cdot 10^{-4}$
0,0001	10 000	0,36786104	$1{,}8 \cdot 10^{-5}$	—

Vidíme, že změna kroku h o 1 řád vyvolá změnu chyby o 1 řád $\Rightarrow$ metoda 1. řádu.

Lze znázornit i graficky

$$|u^* - u| \doteq h^p$$

$$\log|u^* - u| \doteq p \cdot \log h$$



$$\operatorname{tg} \alpha = p$$

Metoda polovičního kroku

Uvažujme CÚ $u'(t) = f(t,u)$, $u(t_0) = u_0$ a její přesné řešení $u^*(t)$. Nechť $u(t,h)$ je numerické řešení CÚ metodou p-tého řádu v čase t s krokem h. Je-li řešení CÚ dostatečně hladké, lze globální chybu vyjádřit ve formě Taylorova rozvoje, tj.

(77)

$$e(t,h) = u(t,h) - u^*(t) = a_0(t)\,h^p + a_1(t)\,h^{p+1} + \dots$$

Uvažujme dva numerické výsledky v čase t získané s kroky $\frac{h}{2}$ a h, pak lze psát

$$-\left|\begin{array}{l} u(t,h) - u^*(t) = a_0(t)\,h^p + O(h^r), \quad r \geq p+1 \\ u(t,\tfrac{h}{2}) - u^*(t) = a_0(t)\left(\tfrac{h}{2}\right)^p + O\left(\left(\tfrac{h}{2}\right)^r\right) \end{array}\right.$$

$$u(t,\tfrac{h}{2}) - u(t,h) = a_0(t)\left[h^p - \left(\tfrac{h}{2}\right)^p\right] + O(h^r) \quad (*)$$

z druhé rovnice vyjádříme $a_0(t)$ jako

$$a_0(t) = \left(\frac{2}{h}\right)^p \underbrace{\left[u(t,\tfrac{h}{2}) - u^*(t)\right]}_{=e(t,\frac{h}{2})} + O\left(\left(\tfrac{h}{2}\right)^q\right)$$

$$q \geq 1$$

a dosadíme do $(*)$

$$u(t,\tfrac{h}{2}) - u(t,h) = e(t,\tfrac{h}{2})\,(2^p - 1) + O(h^r)$$

a konečně

$$\boxed{e(t,\tfrac{h}{2}) = \frac{u(t,\frac{h}{2}) - u(t,h)}{2^p - 1} + O(h^r)}$$

Př.: Uvažujeme CÚ $u'(t) = -u(t)$, $u(0)=1$.

Chceme vypočítat $u(1) = ?$

Eulerova metoda (1. řád)

$$u^{n+1} = u^n + f(t_n, u^n), \quad \text{kde} \quad f = -u$$

Heunova metoda (2. řád)

$$u^{n+1} = u^n + h\, f\left(t_n + \frac{h}{2},\ u^n + \frac{h}{2} f(t_n, u_n)\right)$$

h	N	u^N (Eulerova m.)	u^N (Heunova m.)
0,002	500	0,3675112548	0,367879686792
0,001	1000	0,3676954247	0,367879502530

Odhad globální chyby pomocí metody polovičního kroku

Eulerova m.

$$e(1; 0{,}001) \doteq \frac{0{,}3676954247 - 0{,}3675112548}{2^1 - 1} =$$

$$= 1{,}8417 \cdot 10^{-4}$$

(přesně $u - u^* = 1{,}8 \cdot 10^{-4}$)

79

Heunova metoda

$$e(1;0{,}001) \doteq \frac{0{,}367879502530 - 0{,}367879686792}{2^2 - 1} =$$

$$= -6{,}1 \cdot 10^{-8}$$

$$\left(u^*(1) = e^{-1} \rightarrow u^{1000} - u^*(1) = -6 \cdot 10^{-8} \right)$$

Adaptivní volba kroku jednokrokové metody

Uvažujeme metodu $u^{n+1} = u^n + h\,\Phi_n$, p. řádu a maximální globální chybu ξ v čase $t = T$. Víme, že

$$\xi \approx \frac{T}{h} \cdot O(h^{p+1}) = O(h^p) \rightarrow$$

$\rightarrow$ odsud odhadneme velikost kroku a nastavíme max. chybu jednoho kroku ε_{max} jako konst. $\cdot\, h^{p+1}$

Předpokládejme, že $u_h^n = u^*(t_n)$ a určíme chybu $u_h^{n+1} - u^*(t_n+h)$ pomocí metody polovičního kroku, tj.

$$\left| u_h^{n+1} - u^*(t_n+h) \right| = \left| \frac{u_{h/2}^{n+1} - u_h^{n+1}}{2^p - 1} \right| = \varepsilon^{n+1}$$

je-li $\varepsilon^{n+1} > \varepsilon_{max} \longrightarrow$ zmenšit krok h

$\varepsilon^{n+1} \doteq \varepsilon_{max} \longrightarrow$ OK

$\varepsilon^{n+1} < \varepsilon_{max} \longrightarrow$ OK nebo zvětšit krok h

Poznámka k řešení nelineární rovnice, vzniklé při použití implicitní metody

V každém kroku implicitní metody je třeba řešit rovnici ve tvaru

$$u^{n+1} = \varphi(u^{n+1})$$

(81)

a) <u>prostá iterační metoda</u>

$$u^{n+1}_{(k+1)} = \varphi\left(u^{n+1}_{(k)} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

$$u^{n+1}_{(0)} = u^n$$

je třeba najít vhodné kritérium pro zastavení iteračního procesu, např.

$$\left| u^{n+1}_{(k+1)} - u^{n+1}_{(k)} \right| < \underset{\text{chyba}}{\text{max.}}$$

<u>Pozn.:</u> Teoreticky platí $\lim\limits_{k\to\infty} u^{n+1}_{(k)} = u^{n+1}$

je-li zobrazení $u^{n+1}_{(k+1)} = \varphi\left(u^{n+1}_{(k)}\right)$ kontraktivní!

(Zobrazení $u = \varphi(u)$ je kontraktivní, jestliže pro lib u, v platí $|\varphi(u) - \varphi(v)| < |u - v|$, to je splněno např. je-li $\varphi(u)$ dostatečně hladká funkce a platí-li $|\varphi'(u)| < 1$).

b) Newtonova metoda (rychlejší než prostá iterační metoda)

Uvažujeme nelineární rovnici ve tvaru

$$\Psi(u^{n+1}) = 0 ,$$

pak Newtonova metoda je

$$u^{n+1}_{(k+1)} = u^{n+1}_{(k)} - \frac{\Psi(u^{n+1}_{(k)})}{\Psi'(u^{n+1}_{(k)})} , \quad k = 0, 1, \ldots$$

$$u^{n+1}_{(0)} = u^n$$

Pozn.: Hodnotu $u^{n+1}_{(0)}$ je možné napočítat explicitní metodou – přesnější než zadat u^n. → metody typu prediktor-korektor

Metody typu prediktor-korektor

Tj.: startovací hodnotu $u_{(0)}^{n+1}$ pro implicitní metodu napočítáme explicitní metodou, např.

$$u_{(0)}^{n+1} = \sum_{j=0}^{\tilde{p}} \tilde{a}_j u^{n-j} + h \sum_{j=0}^{\tilde{p}} \tilde{b}_j f_{n-j} \qquad (P)$$

$$f_{n+1}^{(0)} = f(t_{n+1}, u_{(0)}^{n+1}) \qquad (E)$$

$$u_{(1)}^{n+1} = \sum_{j=0}^{p} a_j u_{(0)}^{n-j} + h \sum_{j=0}^{p} b_j f_{n-j} + h\, b_{-1} f_{n+1}^{(0)} \qquad (C)$$

kde (P) je tzv. prediktor, (E) výpočet pravé strany a (C) korektor (zde zapsaný ve formě prosté iterační metody).

Kroky (E) a (C) je možné m× opakovat, pak hovoříme o tzv. $P(EC)^m$ metodě.

84

Pozn: Přesnost metody prediktor - korektor

Je-li přesnost (P) řádu $\tilde{q}$ a přesnost (C) řádu q, pak platí, že pro

a) $\tilde{q} > q$

b) $\tilde{q} < q$ a $m = q - \tilde{q}$

má metoda $P(EC)^m$ přesnost i hlavní člen chyby aproximace stejný jako metoda (C), tj. má přesnost řádu q.

Stiff úlohy (úlohy s velkým tlumením)

Motivace: Uvažujeme modelovou soustavu ODR 1. řádu $U' = AU + B(t)$, kde

$$U = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_m(t) \end{pmatrix}$$ a A je reálná matice $m \times m$.

Nechť A má m různých vlastních čísel, pro která platí

$$\operatorname{Re}\lambda_1 \le \operatorname{Re}\lambda_2 \le \dots \le \operatorname{Re}\lambda_m < 0.$$

Obecné řešení má pak tvar

$$U = \sum_{i=1}^{m} c_i e^{\lambda_i t} + U_p \qquad (1)$$

Pro $t \to \infty$ je $U \to U_p$. Řešení (1) je tzv. přechodové řešení (rapid or short transient) a U_p je ustálené řešení.

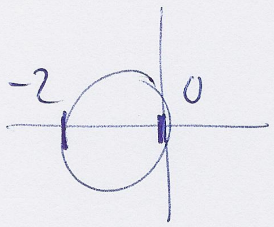
Je-li poměr $\dfrac{\max|\lambda_i|}{\min|\lambda_i|}$ (tzv. stiffness ratio) velký, obsahuje řešení velký rozsah časových měřítek. Uvažujme např. $m = 2$, $\lambda_1 = -10^6$ a $\lambda_2 = -1$.

Chceme vypočítat U_p, tj. vypočítat numerické řešení pro takové t, aby

$$\underline{e^{-t} < \varepsilon} \quad \text{a} \quad e^{-10^6 t} < \varepsilon \quad (\varepsilon \text{ např. } 10^{-4})$$

$$e^{-t} = 10^{-4}$$
$$e^{t} = 10^{4}$$
$$t = 4 \ln 10 = 9{,}2 \rightarrow \text{uvažujme pro jednoduchost } t = 10$$

Použijeme-li explicitní metodu s oblastí stability



, pak $\lambda_i h \in \langle -2; 0 \rangle$

tj.
$$-2 \leq -10^6 h \leq 0$$
$$2 \cdot 10^{-6} \geq h \geq 0$$

$\Rightarrow$ krok např. 10^{-6} a výpočet do $t = 10$

$\Rightarrow$ $\underline{10^7 \text{ kroků metody}}$

87

Zvýšení řádu metody nepomůže, potřebujeme metodu s "velkou" oblastí stability →

→ nejlépe A stabilní metodu.

(pro ještě menší h než 10^{-6} bychom mohli mít problém i se zaokrouhlovací chybou).

Př: příklad úlohy s velkým tlumením (viz Leveque str. 107)

CÚ: $u'(t) = \lambda(\cos t - u) - \sin t \; , \; u(t_0) = \eta$

analytické řešení CÚ je:

$$u^*(t) = e^{\lambda(t-t_0)}(\eta - \cos(t_0)) + \cos t$$

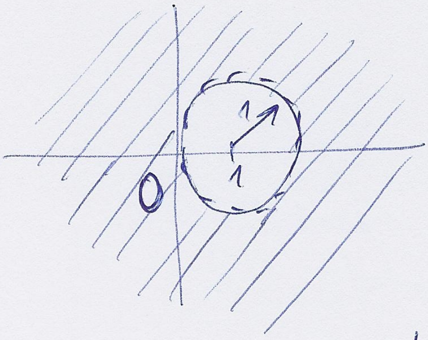
Uvažujeme případ s $\lambda = -10^6$. Použijeme dvě A-stabilní metody:

1) implicitní Eulerovu metodu

$$u^{n+1} = u^n + h \cdot f(t_{n+1}, u^{n+1})$$

88

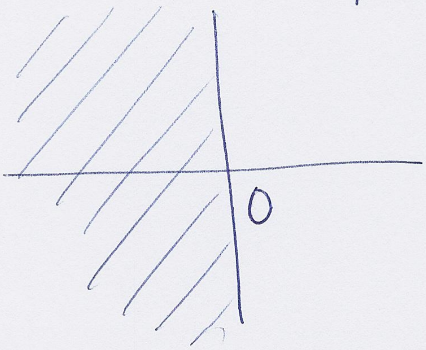
s oblastí stability



2) Crank-Nicholsonova metoda

$$u^{n+1} = u^n + \frac{h}{2}\left(f(t_n, u^n) + f(t_{n+1}, u^{n+1}) \right)$$

s oblastí stability



Uvažujeme-li počáteční podmínku $u(0) = 1$ (tj. $u^* = \text{const}$), řešení neobsahuje homogenní část a obě metody souhlasí s u^*. Ale pro poč. podmínku $u(0) = 1{,}5$ Crank-Nicholsonova metoda osciluje

89

(viz Le Veque, str. 112, obr. 10.4)

<u>Vysvětlení:</u> dosadíme-li do vzorečků metod $f = \lambda \cdot u$, pak implicitní Eulerova metoda je $u^{n+1} = \dfrac{1}{1+h\lambda} u^n$

a Crank-Nicholsonova metoda $u^{n+1} = \dfrac{2+h\lambda}{2-h\lambda} u^n$

Pro např. $h\lambda = -10^5$ je

$u^{n+1} = -10^{-5} \cdot u^n$ pro impl. E. metodu

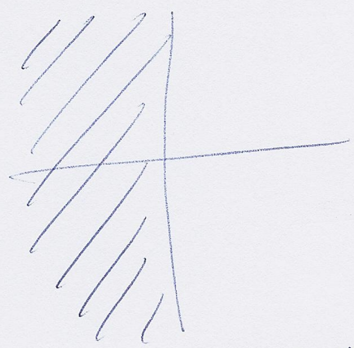
a $u^{n+1} = -u^n$ pro C-N metodu

$\Longrightarrow$ impl. Eulerova metoda dobře tlumí a C-N metoda osciluje (nemá tlumení)

Je vidět, že vlastnost <u>A-stability</u> nestačí pro úspěšné řešení stiff úlohy.

Zavádí se pojem <u>L-stabilní metody</u>, to je metoda, jejíž oblast absolutní stability obsahuje bod ∞.

OK



není L-stabilní

Uvažujme vícekrokovou metodu. Má-li bod ∞ ležet v oblasti abs. stability, musí mít kořeny char. polynomu

$$\Pi(\xi, z) = \rho(\xi) - z\sigma(\xi) = 0$$

$|\xi_i| < 1$ pro $|z| \to \infty$.

Můžeme psát

$$\frac{1}{z}\Pi(\xi, z) = \underbrace{\frac{\rho(\xi)}{z} - \sigma(\xi) = 0}$$

(91)

Kde pro $|z| \to \infty$ je $\frac{1}{z}\rho(\xi) \to 0$

a zbývá rovnice $\sigma(\xi) = 0$.

Def: Lineární vícekroková metoda (LVM) je <u>L-stabilní</u>, leží-li všechny kořeny rovnice $\sigma(\xi) = 0$ uvnitř jednotkového kruhu, tj $|\xi_i| < 1$.

Pozn: U předchozího příkladu má Eulerova impl. metoda kořen $\sigma(\xi)=0$ $\xi = 0$ a C–N metoda kořen $\xi = 1$.

BDF metody

Jsou to metody ve tvaru

$$\underbrace{a_0 u^n + a_1 u^{n+1} + \dots + a_r u^{n+r}} = h \beta f_{n+r}$$

tj. $\sigma(\xi) = \beta \xi^r \Rightarrow$ kořeny jsou nulové

92

$\Rightarrow$ BDF metody jsou L-stabilní!

(BDF metody jsou stabilní pouze pro $r \leq 6$, viz Dahlquistova stabilita).