Enačbe hoda

23. 3. 2022

6. naloga: Enačbe hoda

Med najpreprostejše fizikalne modele sodijo enačbe, ki povezujejo vrednosti spremenljivk sistema z njihovimi časovnimi spremembami. Tak primer je enačba za časovno odvisnost temperature majhnega, dobro prevodnega telesa, ko lahko zanemarimo krajevno odvisnost: enačbo hoda dobimo iz energijskega zakona. Vzemimo primer žarilne nitke, ki jo grejemo s tokom, pri čemer bomo uporabili tokovni sunek iz kondenzatorja:

$$mc \cdot \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = RI_0^2 \cdot \exp\left(-\frac{2t}{RC}\right) - \sigma S T^4.$$

Z vpeljavo brezdimenzijskih spremenljivk dobimo enoparametrično enačbo

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} = a \cdot \exp(-2x) - u^4. \tag{1}$$

Zanemarili smo sevalni tok, ki ga nitka prejema iz okolice, zato se bo temperatura po dovolj dolgem času poljubno približala absolutni ničli: to pomeni, da rešitve ne kaže vleči predolgo. Da se izognemo tudi preračunavanju začetne temperature, nas bodo zanimali samo zelo močni tokovni sunki, ko lahko začetno notranjo energijo nitke zanemarimo. K enačbi (1) sodi torej začetni pogoj $u(x=0)=0$.

Preiskali bomo uporabnost različnih metod za reševanje enačbe (1). Sledeč fizikalnemu občutku lahko v najbolj grobi inačici zapišemo (Eulerjeva metoda). To je v bistvu le prepisana aproksimacija za prvi odvod $y' \approx (y(x+h) - y(x))/h$, torej

$$y(x+h) = y(x) + h \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_x . \tag{2}$$

Diferencialno enačbo smo prepisali v diferenčno: sistem spremljamo v ekvidistantnih korakih dolžine h. Metoda je večinoma stabilna, le groba: za večjo natančnost moramo ustrezno zmanjšati korak. Za izboljšanje metode zapišimo odvod kot:

$$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_x = f(x,y)$$

ter

$$x_{n+1} = x_n + h, \quad y_n = y(x_n)$$

Heunova metoda ($\mathcal{O}\left(h^3\right)$ lokalno) je boljši približek z:

$$\hat{y}_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n) \tag{3}$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \hat{y}_{n+1})\right] \tag{4}$$

Izvedenka tega je nato Midpoint metoda (tudi $\mathcal{O}\left(h^3\right)$ lokalno):

$$K_1 = h \cdot f(x_n, y_n) \tag{5}$$

$$K_2 = h \cdot f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}K_1) \tag{6}$$

$$y_{n+1} = y_n + K_2 \tag{7}$$

Le-to lahko potem izboljšamo kot modificirano Midpoint metodo itd...

V praksi zahtevamo natančnost in numerično učinkovitost, ki sta neprimerno boljši kot pri opisanih preprostih metodah. Uporabimo metode, zasnovane na algoritmih prediktor-korektor, metode višjih redov iz družine Runge-Kutta (z adaptivnimi koraki), ali ekstrapolacijske metode. Lotimo se jih, če je zahtevana spodobna natančnost (pod 1 %): tedaj tudi ne skoparimo, izberemo večinoma četrti red (globalna natančnost je reda $\mathcal{O}\left(h^4\right)$).

Brez dvoma ena najbolj priljubljenih je metoda RK4,

$$\begin{aligned} k_1 &= f\left(x,\, y(x)\right) \;, \\ k_2 &= f\left(x + \tfrac{1}{2}h,\, y(x) + \tfrac{h}{2}k_1\right) \;, \\ k_3 &= f\left(x + \tfrac{1}{2}h,\, y(x) + \tfrac{h}{2}k_2\right) \;, \\ k_4 &= f\left(x + h,\, y(x) + hk_3\right) \;, \\ y(x+h) &= y(x) + \tfrac{h}{6}\,\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right) + \mathcal{O}(h^5) \;. \end{aligned} \tag{8}$$

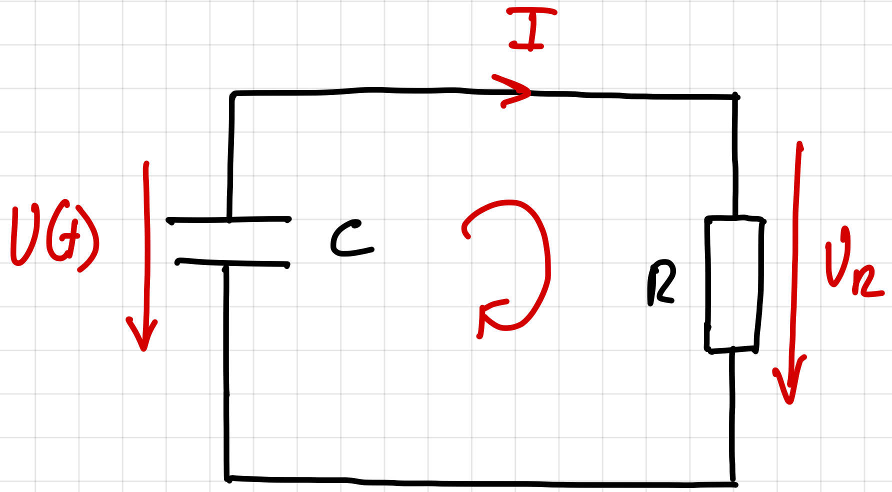
Naloga:

- za $a = 10$ v enačbi (1) preskusi čim več metod: Eulerjevo, Midpoint, Runge-Kutto 4. reda, Runge-Kutta-Fehlberg, Adams-Bashfort-Moultonov prediktor-korektor ter še katero od boljših metod, ki jih najdete vgrajene v različna programska orodja. Kakšen korak je potreben? Izberi metodo (in korak) za izračun družine rešitev pri a=2 do a=18 v korakih (vsaj) po 4! *V premislek*: kakšno metodo bi uporabil, če bi posebej natančno želel določiti maksimalne temperature in trenutke, ko nastopijo?

- Z reševanjem navadne diferencialne enačbe $dy/dt = y^2 + 2t^2$ primerjaj Eulerjevo metodo, Midpoint metodo, klasično Runge-Kutto 4. reda, Runge-Kutta-Fehlberg in Adams-Bashford-Moultonovo prediktor-korektor metodo. Privzemi, da je ob t=0, y(0)=1. Korak naj bo v vseh uporabljenih metodah enak (po vrsti) h=0.1,0.01 in 0.001.

Zgled: Praznenje kondenzatorja s kapacitivnostjo C in napetostjo U_0 skozi upornik z upornostjo R.

$U(t=0) = U_0$



Uporabimo Ohmov in II. Kirchhoffov zakon in izpeljemo:

$$U(t) = U_R = IR$$

Upoštevamo še povezavo med tokom in nabojem v kondenzatorju:

naboj izteka iz kondenzatorja

$$Q(t) = C\,U(t)\ ; \quad I(t) = -\frac{dQ}{dt} = -C\frac{dU}{dt}$$

$$U(t) = -\overbrace{CR}^{=\tau}\frac{dU}{dt}$$

Vpeljemo razpadni čas $\tau = RC$ in brezdimenzijski spremenljivki:

$$x = \frac{t}{\tau} \quad \text{in} \quad y = \frac{U}{U_0}$$

Dobimo diferencialno enačbo prvega reda:

$$\frac{dy}{dx} = \boxed{y'(x) = -y}$$

Ta enačba je preprosta in jo znamo hitro rešiti.
Ločimo spremenljivke:

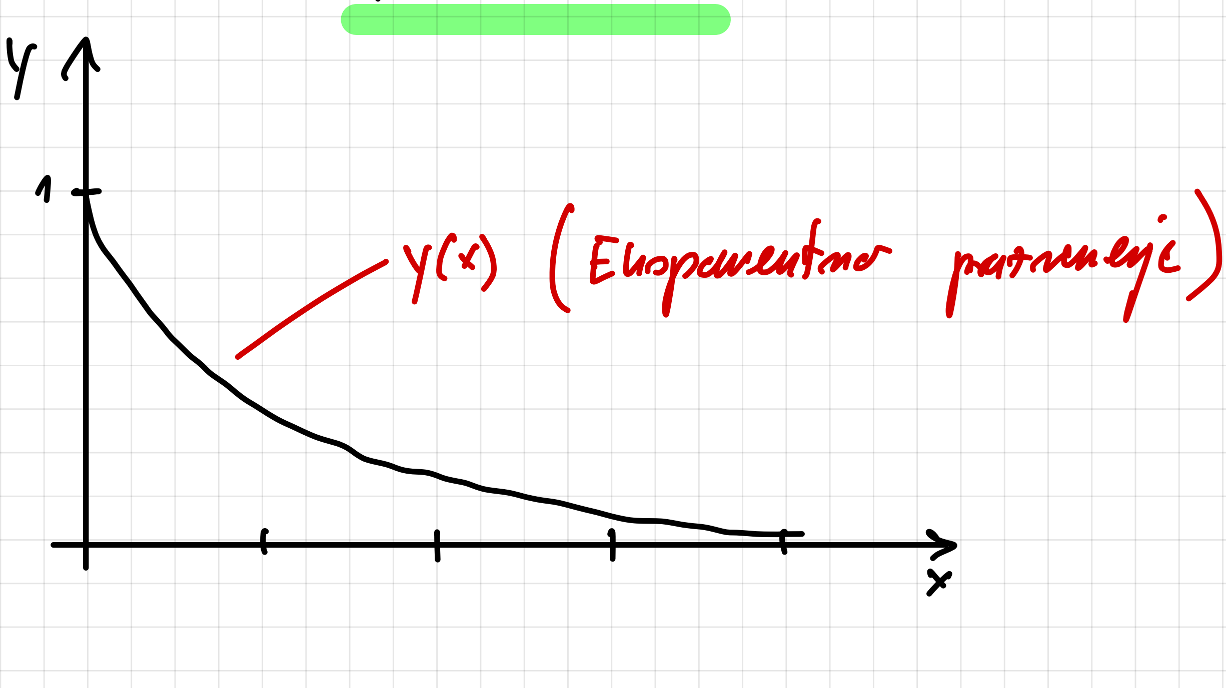
$$\frac{dy}{y} = -dx \quad \Big/ \int$$

$$\int_1^{y(x)} \frac{dy}{y} = -\int_0^x dx$$

Dobimo:

$$\ln y(x) = -x$$

$$y(x) = e^{-x}$$



Če v vezje dodamo še kakšno elektronsko komponento enačba za napetost hitro postane tako zapletena, da je ne znamo več rešiti analitično.

Takrat si pomagamo z numeričnim reševanjem diferencialnih enačb – takšnih – prvega reda, ki jih v splošnem zapišemo v obliki:

$$\boxed{y' = \underbrace{f(x,y)} \quad \text{in} \quad y(x_0) = y_0}$$

Odvod je v splošnem funkcija neodvisne in odvisne spremenljivke.

Da bo problem v celoti določen, moramo podati še robni pogoj. Če podamo vrednost funkcije ob $x = x_0$ temu rečemo začetni problem 1. reda.

(angl.: IVP = "Initial value problem")

Opomba: Mi se bomo ukvarjali z reševanjem 1D problema, kjer bosta y in x skalarja, a enake metode delujejo tudi za sisteme linearnih enačb: $\vec{y}\,' = \vec{f}(x, \vec{y})$; $\vec{y}(x_0, \vec{y})$

Numerična rešitev: Numerično rešitev problema sestavlja zaporedje točk $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ in pripadajoče zaporedje vrednosti $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$, ki jih dobimo z izbranim numeričnim postopkom, in predstavljajo približke za rešitev začetnega problema v točkah x_i, oziroma:

$$y_i \approx y(x_i) \quad ; \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

Kjer je $y(x_i)$ točna vrednost rešitve v x_i.

Numerične metode za reševanje IVP delimo na:

- enokorakske metode: y_{i+1} izračunamo iz y_i
- večkorakske metode: y_{i+1} izračunamo iz $y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_{i-k+1}$; $k \geq 2$

Te pa se še dalje delijo na:

- eksplicitne metode: imamo direktno formulo za y_{i+1}
- implicitne metode: y_{i+1} dobimo z (numeričnim) reševanjem nelinearne enačbe.

Eulerjeva metoda (eksplicitna, enokoračna metoda)

Iz matematike vemo, da je: (definicija odvoda)

$$y'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{y(x+h) - y(x)}{h}$$

Če izberemo dovolj majhen h, lahko odvod aproksimiramo s končno diferenco!

$$y'(x) \approx \frac{y(x+h) - y(x)}{h},$$

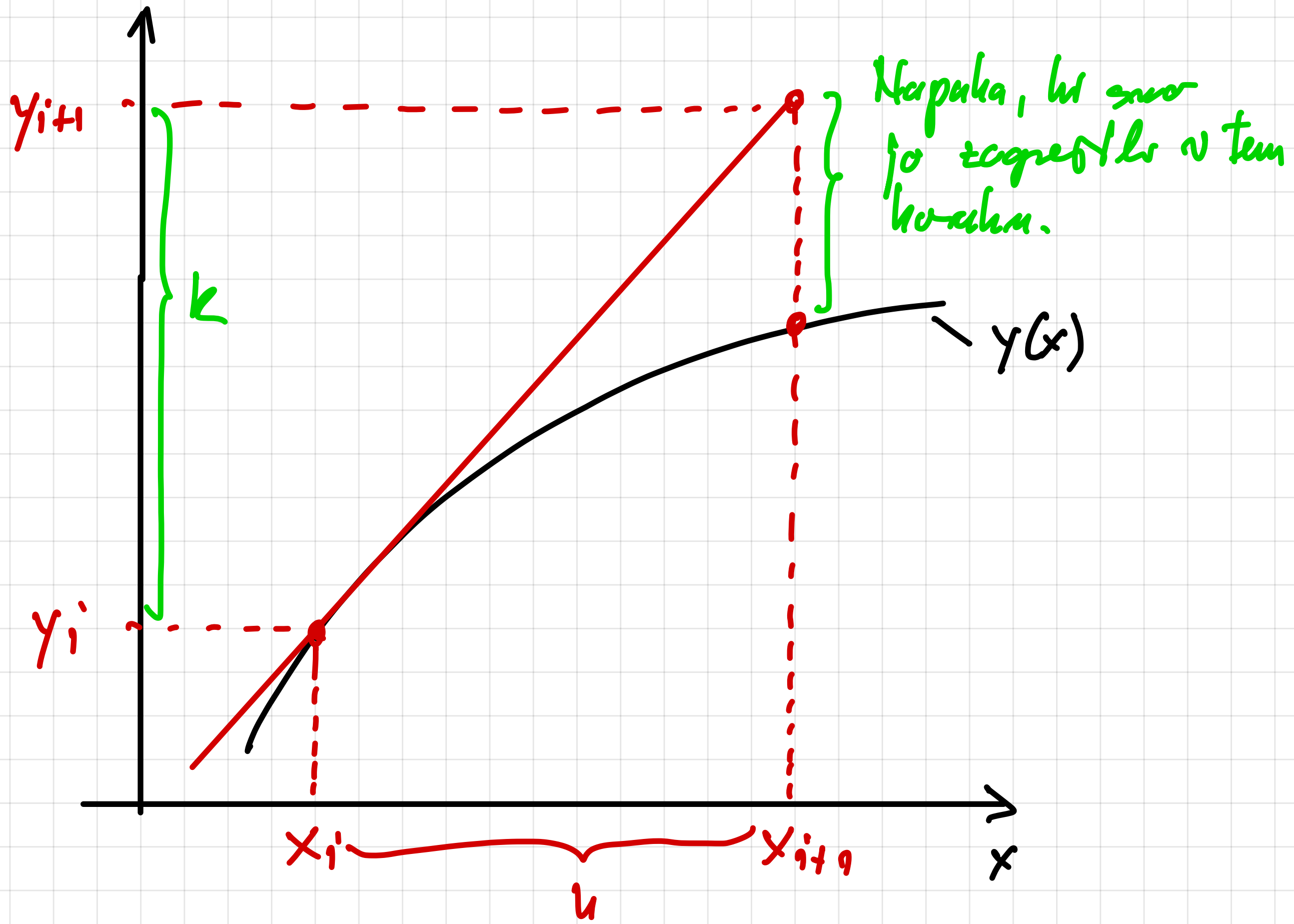
od koder lahko izrazimo $y(x+h)$:

$$y(x+h) \simeq y(x) + h \underbrace{y'(x)}_{=f} = y(x) + h f(x,y)$$

Če rečemo, da je h premik med dvema zaporednima točkama $x_{i+1} = x_i + h$, lahko zapišemo:

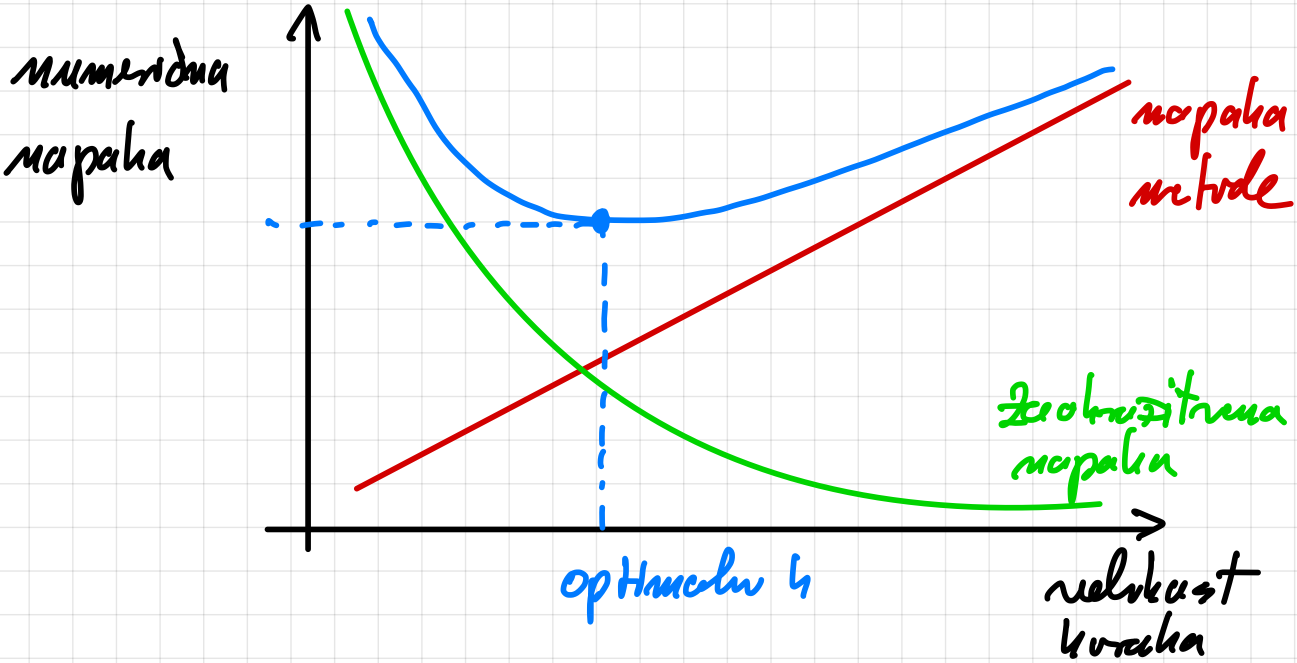
(xx)
$$\boxed{\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \underbrace{h f(x_i, y_i)}_{\text{koeficient k. ali premik.}} \\ x_{i+1} &= x_i + h \end{aligned}}$$

Dobili smo eksplicitno Eulerjevo metodo.



Ugotovitev:

- Natančnost metode je odvisna od velikosti koraka.
- Manjši korak h vodi do boljšega numeričnega približka a to pomeni tudi več in daljše računanje.
- Teoretično v limiti $h \to 0$ oziroma $N \to \infty$ rešitev konvergira k pravi vrednosti, a pri računanju v aritmetiki s plavajočo vejico moramo paziti na zaokrožitveno napako.



Pri numeričnem reševanju koraka ne moremo poljubno zmanjšati. Hkrati ne želimo, da reševanje predolgo traja!

Ali se da več izboljšati?

Pri Eulerjevi metodi smo rešitev le aproksimirali s tangento $\times h$ v točki x_i. Kaj pa Taylorjev razvoj in uporaba višjih odvodov?

Razvijmo $y(x)$ v Taylorjevo vrsto:

(xxx)

$$y(x+h) \simeq y(x) + h\, y'(x) + \underbrace{\frac{h^2}{2!} y''(x) + \frac{h^3}{3!} y'''(x) + \dots}_{(*)}$$

Primer za odvode reda:

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

f_x ,, f_y (Parcialni odvod)

$$y'' = \frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\cdot y' = f_x + f_y f$$

$$y''' = f_{xx} + 2 f_{xy} f + f_{yy} f f + f_y (f_x + f_y f)$$

$\vdots$

(*) Z upoštevanjem višjih odvodov si lahko izboljšamo natančnost pri dani velikosti koraka. To le redko uporabljamo, ker moramo analitično računati odvode višjih redov, kar postaja zapleteno!

Ocena lokalne napake metode:

Iz primerjave (xx) in (xxx) lahko ocenimo lokalno napako metode. Eulerjeva metoda in Taylorjev razvoj se začneta razlikovati pri členu $\frac{h^2 y''(x_0)}{2}$, kar pomeni, da je metoda $O(h^2)$ ≡ Drugega reda! (Globalna je potem $O(h)$)

Metoda točna za premice, parabole pa ne več!

Stabilnost metode: Glej Širca, RMF, Dodatek F.

Če ima začetni problem stabilno rešitev, pričakujemo, da bo rešitev pri zmotenem začetnem pogoju ostala blizu točne rešitve.

Zgled: Numerično rešujemo enačbo:

$$y'(x) = -\lambda y \quad \text{za} \quad \lambda > 0$$

Vemo, da je rešitev enačbe $y(x) = y_0 e^{-\lambda x}$, in da posledično velja $\lim_{x\to\infty} y(x) = 0$.

Z Eulerjevo metodo dobimo:

$$y_1 = y_0 - \lambda h y_0 = (1-\lambda h) y_0$$

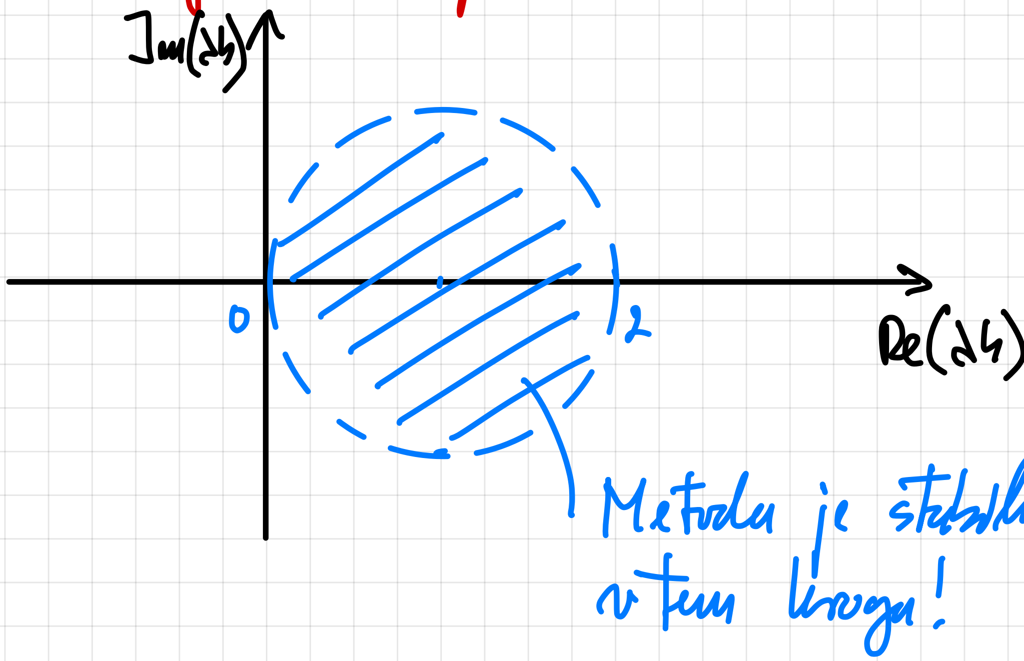
$$y_2 = y_1 - \lambda h y_1 = (1-\lambda h) y_1 = (1-\lambda h)^2 y_0$$

$$\vdots$$

$$y_n = \underbrace{(1-\lambda h)^n}\, y_0$$

Če hočemo, da reš. konvergira, ko bo $n \to \infty$, potem mora biti $|1-\lambda h| < 1$.

To bo res, če bo $0 < \lambda h < 2$. Če dovolimo, da je $\lambda \in \mathbb{C}$, potem območje stabilnih rešitev definira krog v kompleksni ravnini:



Sledi: Če bo $h > \frac{2}{\lambda}$, potem rešitev ne bo stabilna!

Splošno: Vpeljemo faktor rasti $S(\lambda h)$, kot

$$\boxed{\frac{y_{i+1}}{y_i} = S(\lambda h)} \quad \left(= (1 - \lambda h)\right)$$

Metoda je stabilna za tiste λh, za katere velja $|S(\lambda h)| < 1$.

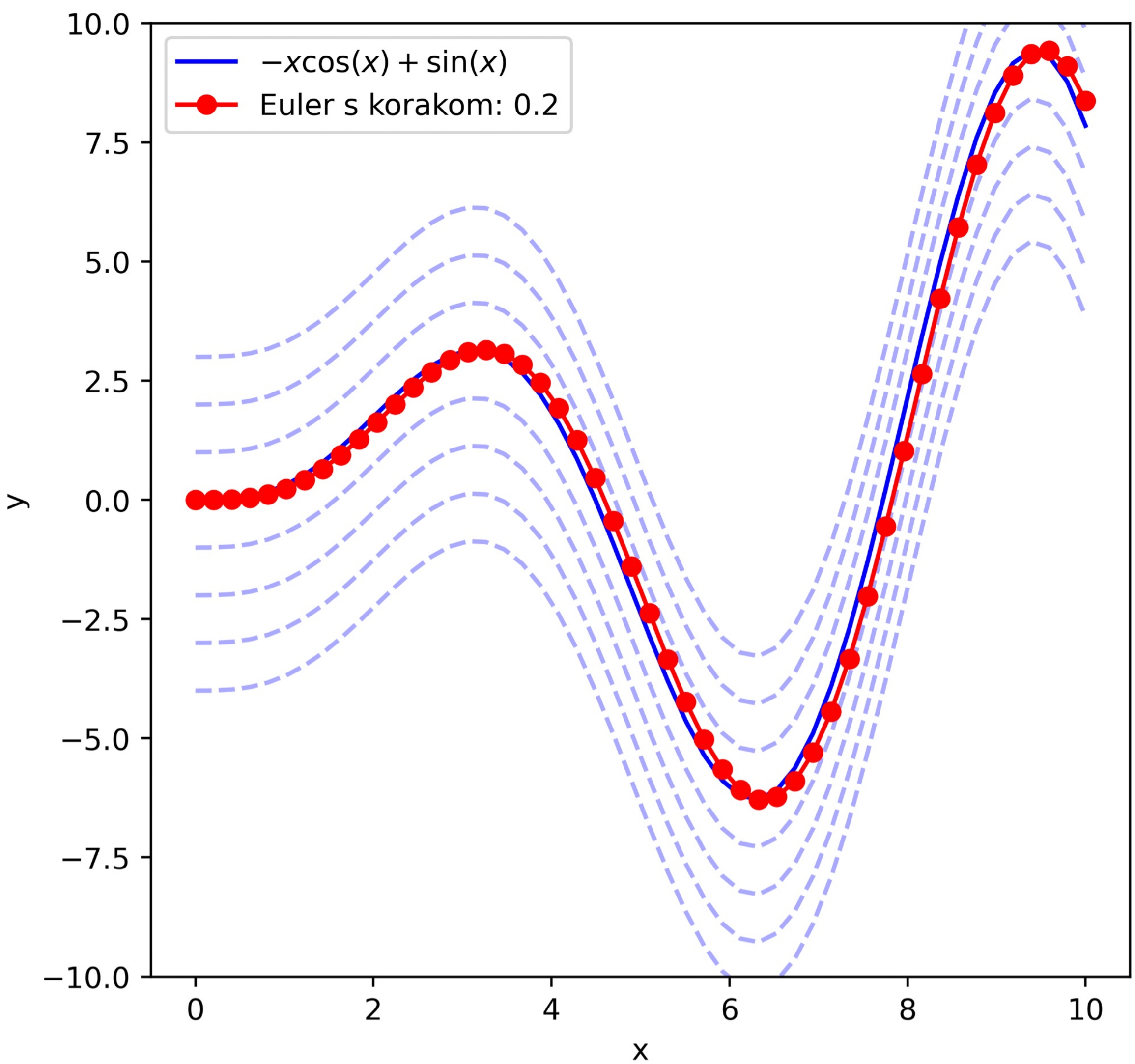
Posledica: Velikost koraka je treba prilagoditi problemu.

Zgled za Eulerjevo metodo:

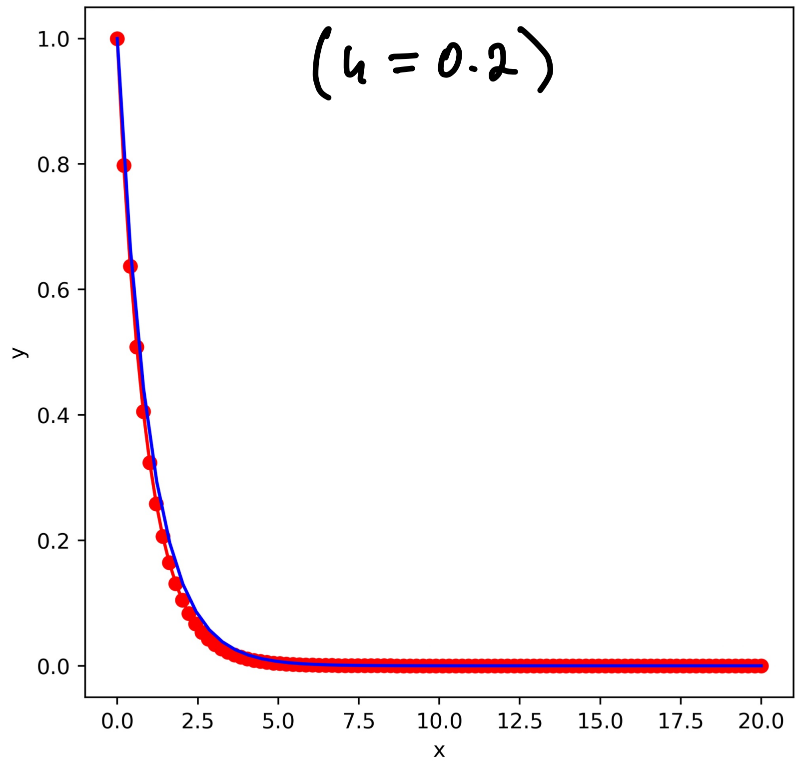
Reši diferencialno enačbo:

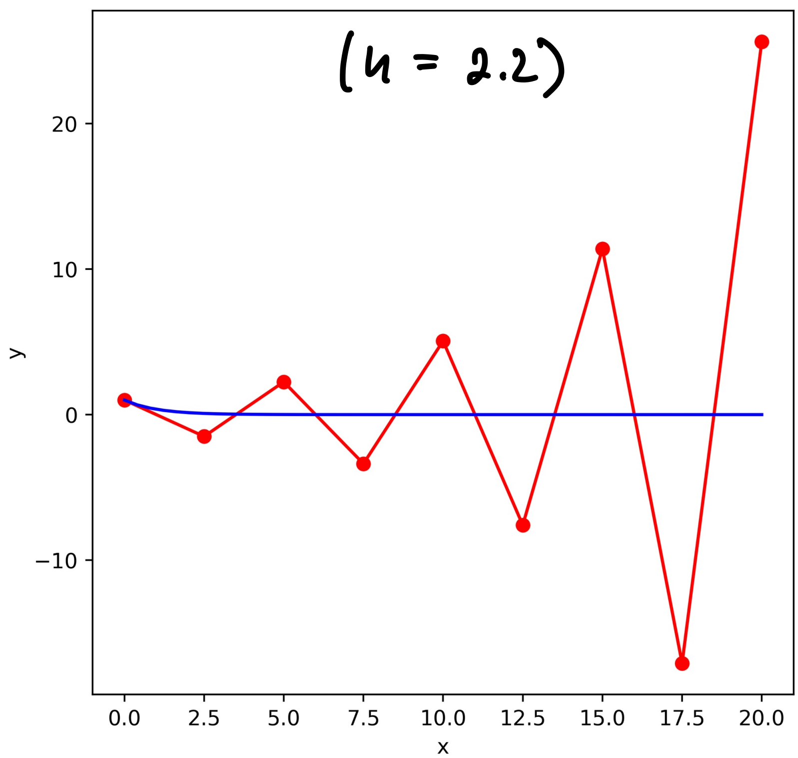
$$y'(x) = x \cdot \sin(x) \quad ; \quad y(0) = a$$

Analitična rešitev je: $y(x) = a - x\cos(x) + \sin(x)$

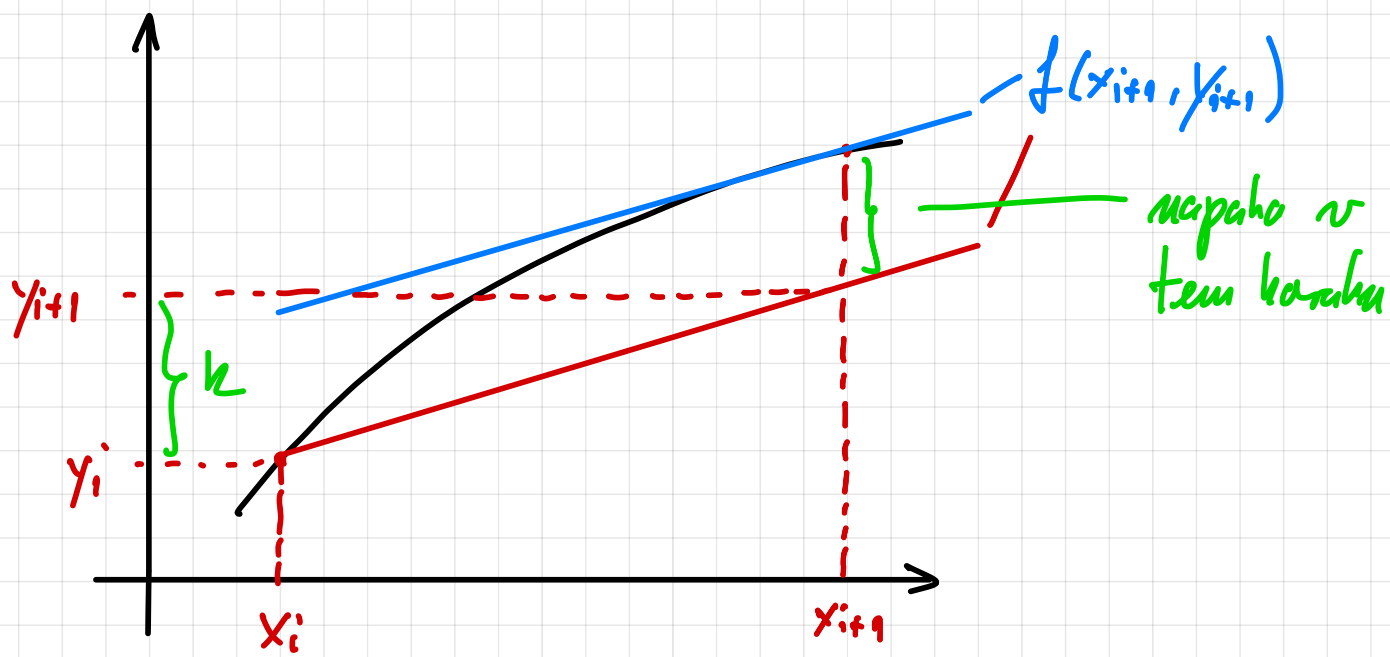


Izgled za stabilnost Eulerjeve metode:





Implicitna Eulerjeva metoda: (implicitna, enokoračna)



Pri implicitni metodi namesto odvoda v točki (x_i, y_i) upoštevamo odvod v točki (x_{i+1}, y_{i+1}), ki je še ne poznamo!

$$\underline{y_{i+1}} = y_i + h f(x_{i+1}, \underline{y_{i+1}}) + O(h^2)$$

y_{i+1} nastopa na obeh straneh enačbe, zato moramo v vsakem koraku reševati nelinearno enačbo:

$$y_{i+1} - y_i - h f(x_{i+1}, y_{i+1}) = 0$$

(To rešujemo npr. z Bisekcijo)

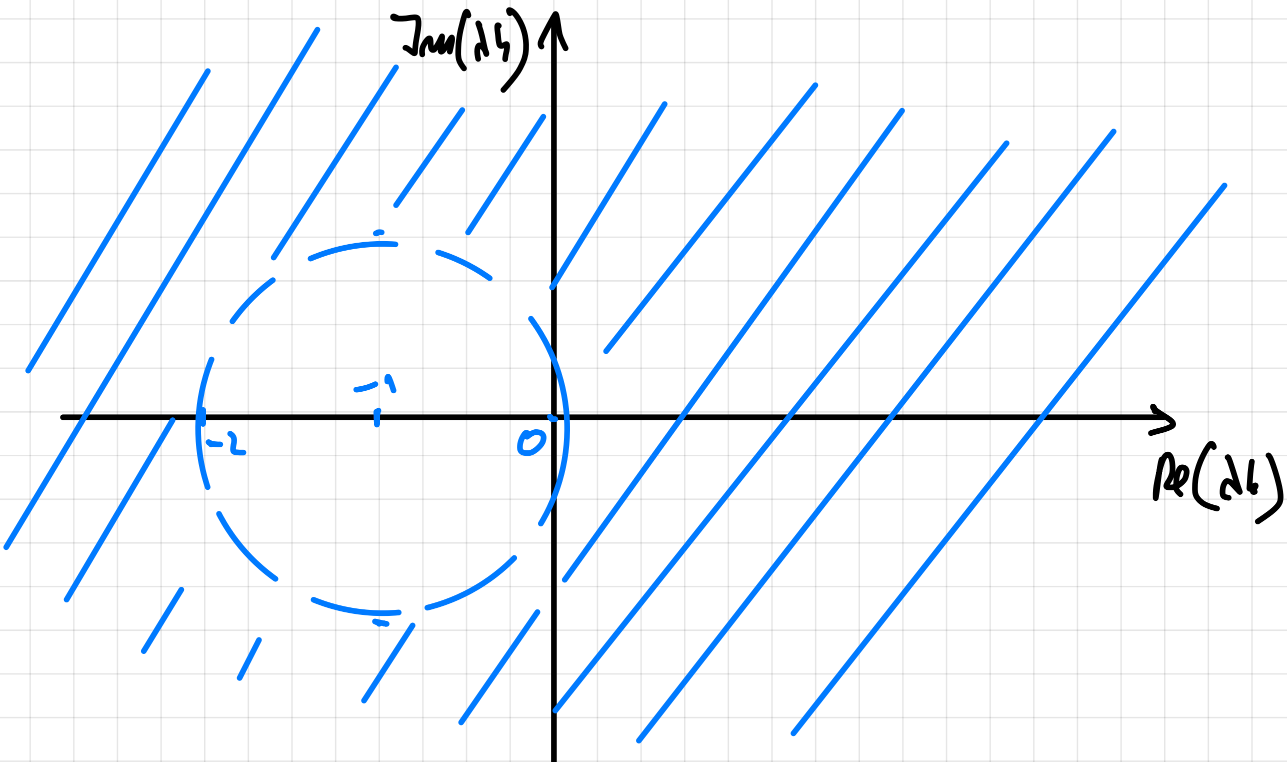
Stabilnost implicitne metode: (gledamo: $y' = -\lambda y$)

$$y_{i+1} = y_i - \lambda h\, y_{i+1}$$

$$y_{i+1}(1+\lambda h) = y_i$$

$$y_{i+1} = \underbrace{\frac{1}{(1+\lambda h)}}_{= S(\lambda h)} y_i$$

$$|S(\lambda h)| = \left|\frac{1}{1+\lambda h}\right| \overset{?}{<} 1$$



Ugotovitev: Metoda je stabilna povsod razen znotraj premaknjenega enotskega kroga!

Heunova metoda:

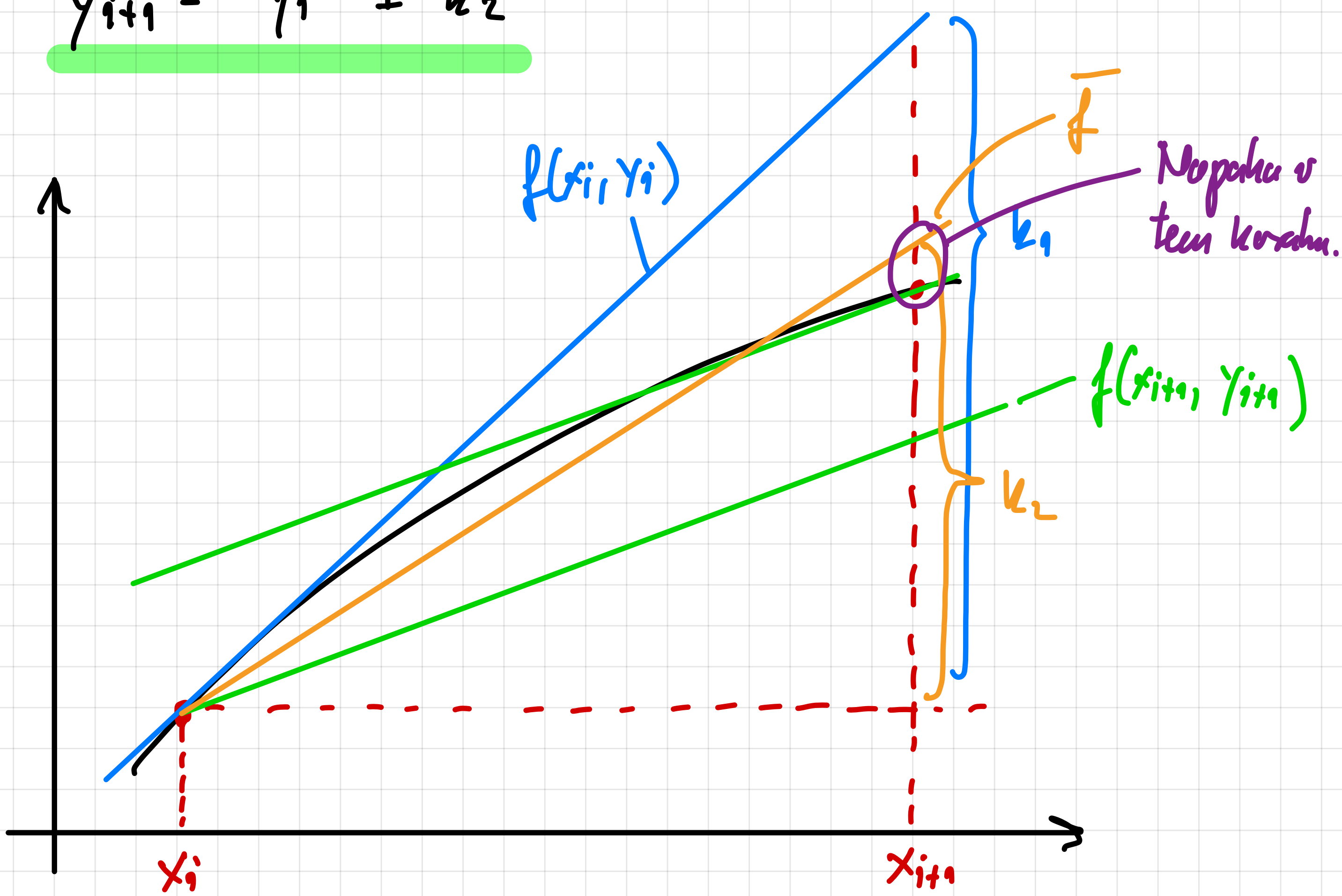
Ideja: Odvod poskusimo dodatno popraviti tako, da upoštevamo približno povprečje odvodov v obeh točkah. Ker točke (x_{i+1}, y_{i+1}) še ne poznamo, zato si pomagamo s približkom:

$$k_1 = h \cdot f(x_i, y_i)$$

Naredili smo 1 vmesni korak.

$$k_2 = h \cdot \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \underbrace{y_i + k_1}_{\text{približek za } y_{i+1}})}{2}$$

$$y_{i+1} = y_i + k_2$$



Ocena lokalne napake:

Razvijemo k_2 do prvega reda:

$$k_2 = \frac{h}{2}\left(f + f + h f_x + \overbrace{f_y \cdot k_1}^{f_y \cdot f h}\right)$$

Dobimo:

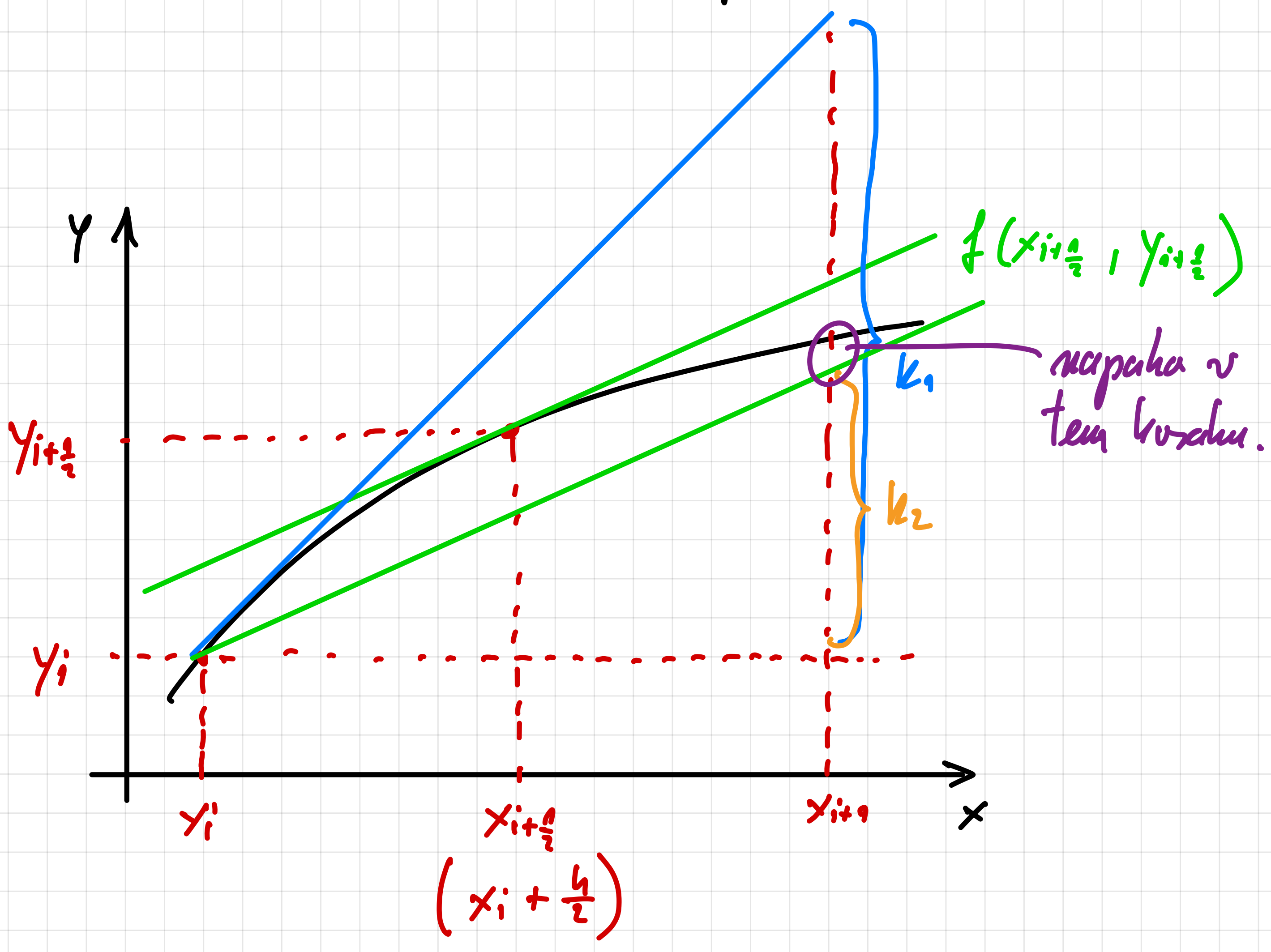
$$y_{i+1} = y_i + hf + \frac{h^2}{2!}\underbrace{\left(f_x + f_y \cdot f\right)}_{y''} + O(h^3)$$

Ugotovimo, da shema metode ustreza Taylorjevem razvoju do 2. reda, kar pomeni, da ima metoda lokalno napako $O(h^3)$ oziroma globalno $O(h^2)$ (en red manj)

Z dodatnimi koraki smo pridobili en red v lokalni napaki!

Modificirana Eulerjeva metoda: (ang. Mid-point metoda)

Podobna ideja kot pri Heunovi metodi. Za izboljšanje ocene odvoda uporabimo oceno odvoda na sredini intervala. — Mid point.



Metoda:

Vmesna točka!

$$k_1 = h\, f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = h\, f\left(x_i + \frac{h}{2},\ y_i + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$y_{i+1} = y_i + k_2 \qquad + O(h^3)$$

Lokalna napaka: Kot prej k_2 razvijemo do 1. reda in primerjamo rezultat s Taylorjevim razvojem:

$$k_2 = h\Big(f + \underbrace{\tfrac{h}{2} f_x}_{\text{Razvoj po } x} + \tfrac{1}{2} \overset{f \cdot h}{k_1} f_y\Big) = hf + \frac{h^2}{2}\underbrace{\left(f_x + f_y f\right)}_{y''}$$

Ugotovimo, da se rezultat ujema s členi Taylorjevega razvoja do 2. reda. Metoda je zato $O(h^3)$.

Ugotovitev: Heunova metoda in Modificirana Eulerjeva metoda nam pokažeta, da za višji red metode ni nujno računati odvode, pač pa to lahko dosežemo tako, da Eulerjevo metodo uporabimo v več vmesnih točkah, ki ležijo med $(x_i, y(x_i))$ in $(x_{i+1}, y(x_{i+1}))$. To zahteva nekaj dodatnega računanja, a se splača.

To je osnovna ideja metod Runge-Kutta.

Metode Runge-Kutta: (enokoračne, eksplicitne)

Osnovna ideja: Natančnost pridobivamo z računanjem vrednosti funkcije f v več točkah:

Metoda:

Trenutna točka

$$k_i = h f\Big(\underbrace{x_n+\alpha_i h}_{\xi_i}, \underbrace{y_n + \sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}k_j}_{\eta_i}\Big) \qquad i=1,\dots,m$$

koeficienti k_i so prirastki eksplicitne metode v vmesnih točkah (ξ_i, η_i)

(ξ_i, η_i) je točka na intervalu med (x_n, y_n) in (x_{n+1}, y_{n+1})

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} \gamma_i k_i$$

Število koeficientov k_i rečemo stopnja metode!

Koeficiente α_i, β_{ij} in γ_i določimo tako, da je lokalna napaka $O(h^n)$ čim višjega reda n.

V ta namen zahtevamo:

$$\sum_{i=1}^{m} \gamma_i = 1 \quad \text{in} \quad \alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} \quad \text{za} \quad i = 1, \dots, m.$$

Runge-Kutta 2. stopnje:

$$k_1 = h \cdot f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f(x_n + \alpha h, y_n + \beta k_1)$$

$$y_{n+1} = y_n + \gamma_1 k_1 + \gamma_2 k_2$$

Pri določitvi parametrov α, β, γ_1 in γ_2 si pomagamo s primerjavo s Taylorjevim razvojem.

$$y_{n+1} = y_n + \gamma_1 \cdot h f + \gamma_2 h (f + f_x \alpha h + f_y \beta h f)$$

$$= y_n + h f(\gamma_1 + \gamma_2) + \frac{h^2}{2}(\gamma_2 2\alpha f_x + \gamma_2 2\beta f_y f) + O(h^3)$$

Od tod vidimo, da mora veljati:

$$\gamma_1 + \gamma_2 = 1, \quad 2\alpha\gamma_2 = 1 \quad \text{in} \quad 2\beta\gamma_2 = 1$$

Za izbrani $\gamma_2 \neq 0$ dobimo:

$$\gamma_1 = 1 - \gamma_2 \, , \quad \alpha = \frac{1}{2\gamma_2} \, , \quad \beta = \frac{1}{2\gamma_2}$$

- Če vzamemo $\gamma_2 = 1$ $\left(\gamma_1 = 0, \alpha = \beta = \frac{1}{2}\right.$, dobimo:

$$\left.\begin{aligned} k_1 &= h f(x_n, y_n) \\ k_2 &= h f\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, \, y_n + \tfrac{1}{2}k_1\right) \\ y_{n+1} &= y_n + k_2 + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}\right\}$$

Dobili smo modificirano Eulerjevo metodo!

- Če vzamemo $\gamma_2 = \frac{1}{2}$ $\left(\gamma_1 = \frac{1}{2}, \alpha = \beta = 1\right)$, dobimo

$$\left.\begin{aligned} k_1 &= h f(x_n, y_n) \\ k_2 &= h f(x_n + h, \, y_n + h) \\ y_{n+1} &= y_n + \tfrac{1}{2}(k_1 + k_2) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}\right\}$$

Dobili smo Heunovo metodo

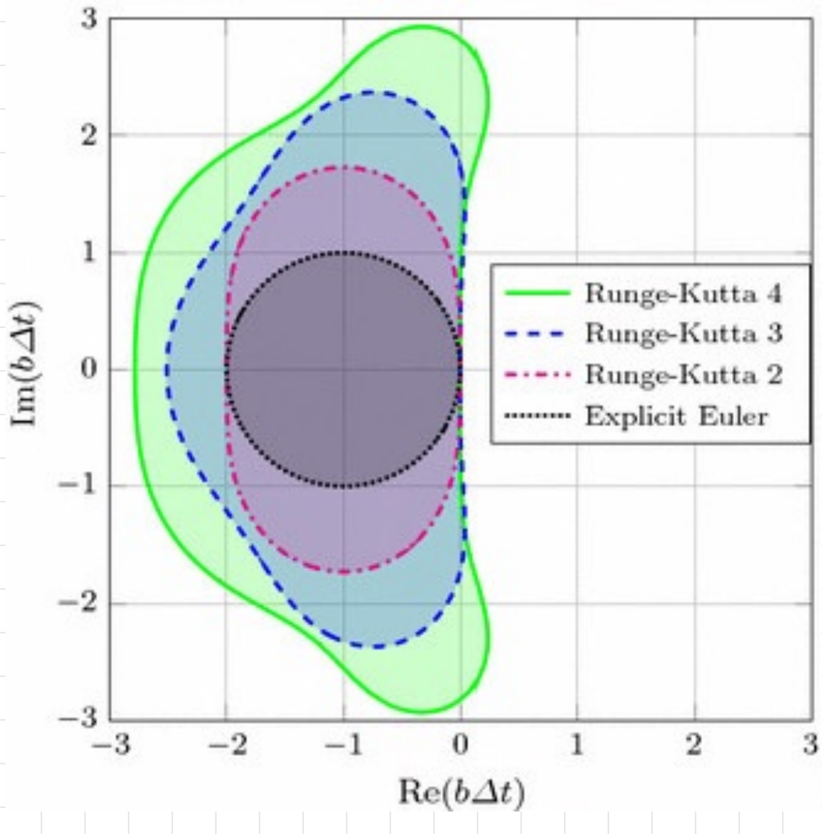
Runge-Kutta 4. stopnje: (točno 4. reda, red $O(h^5)$)

To je najbolj znana različica metode Runge-Kutta.

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$
$$k_2 = h f\left(x_n + \tfrac{1}{2}h,\ y_n + \tfrac{1}{2}k_1\right)$$
$$k_3 = h f\left(x_n + \tfrac{1}{2}h,\ y_n + \tfrac{1}{2}k_2\right)$$
$$k_4 = h f\left(x_n + h,\ y_n + k_3\right)$$
$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right) + O(h^5)$$

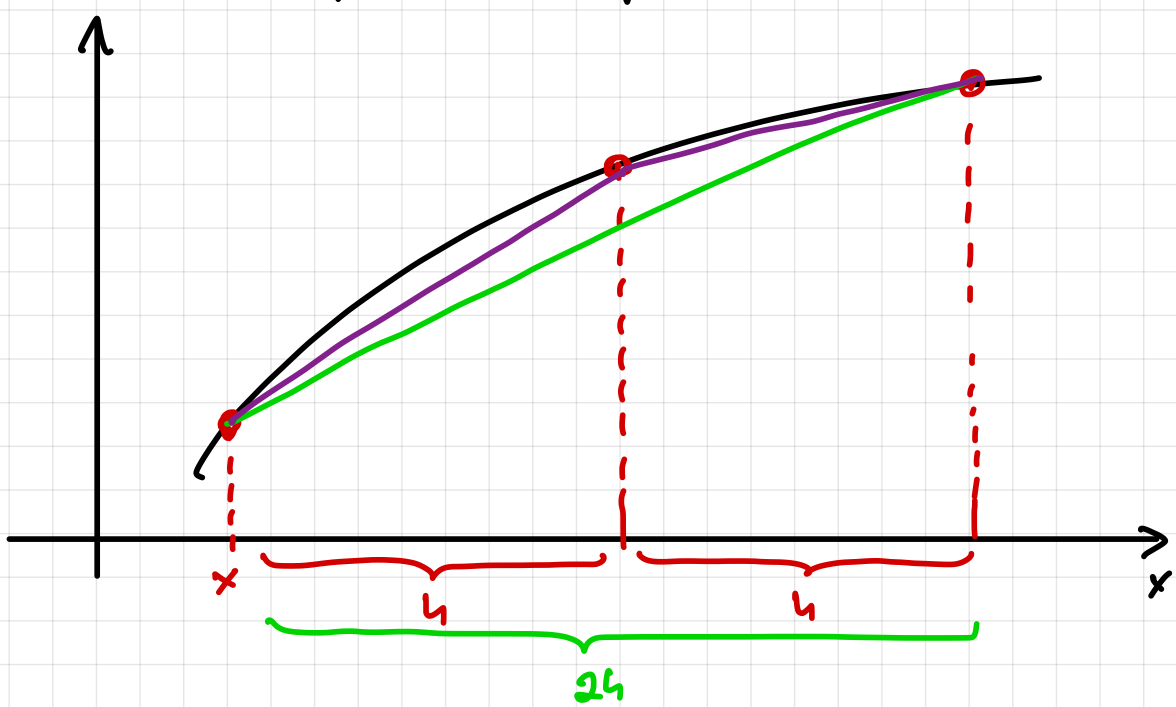
Velja: Lokalna napaka metode je $O(h^5)$, globalna napaka pa je $O_g(h^4)$!

Stabilnost metode:



Ocena lokalne napake metode RK:

Spomnimo se, kako smo določili napako pri numeričnem integriranju! Tu postopamo na enak način: Začnemo v $y(x_n)$ in s 4-stopenjsko RK metodo izračunamo $y(x_n+2h)$ enkrat s korakom h, drugič pa s korakom $2h$. Ker vemo, da je metoda 4. reda, lahko za oba primera napišemo:



1 × 2h: $\underbrace{y(x+2h)}_{\text{To je točna vrednost.}} = \underbrace{y_1}_{\text{Izračunan približek}} + (2h)^5 \underbrace{\phi}_{\text{konstantni del 1. člena napake!}} + O(h^6)$

2 × h: $y(x+2h) = y_2 + 2h^5 \phi + O(h^6)$

Ta približek je boljši.

Vpeljemo razliko med obema približkoma:

$$\Delta = y_2 - y_1 = 32h^5\phi - 2h^5\phi + \dots \simeq 30h^5\phi$$

Oznaka: $\phi = \dfrac{\Delta}{30h^5}$

$$y(x+2h) = y_2 + 2\cancel{h^5}\cdot\frac{\Delta}{30\cancel{h^5}} + O(h^6)$$

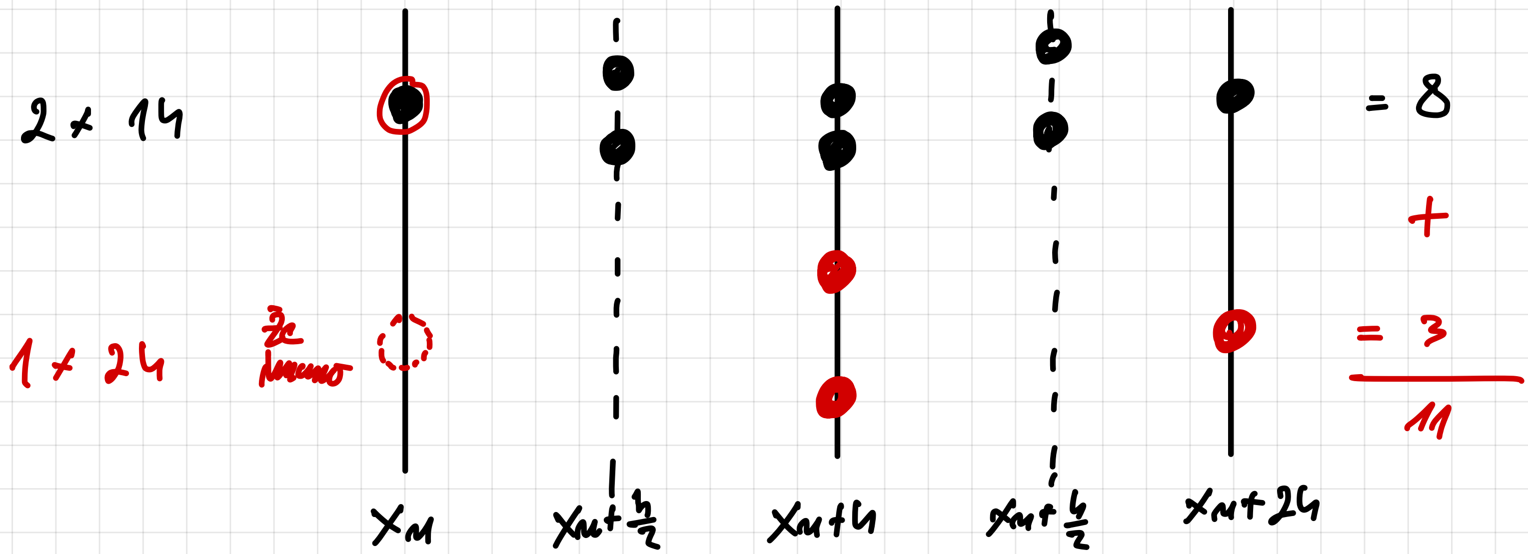
$$= y_2 + \frac{\Delta}{15} + O(h^6)$$

To je naša ocena za napako. Če je napaka prevelika, potem zmanjšamo korak in postopek ponovimo. Če je napaka dovolj majhna, pa lahko korak povečamo!

To je osnovna ideja algoritmov z adaptivno oceno napake.

Opomba: Popravek bi lahko uporabili za povečanje reda metode kot smo to storili pri integraciji, a potem izgubimo oceno napake in tavamo v temi!

Kakšna je računska zahtevnost te metode?



Ugotovimo, da moramo v vsakem koraku 11× izvrednotiti vrednost funkcije f, metoda pa je vseeno le četrtega reda. Boljši pot je Runge-Kutta-Fehlbergova metoda.

Runge – Kutta – Fehlbergova metoda:

Vzamemo eksplicitno 6-stopenjsko metodo Runge-Kutta:

$$k_i = hf\left(x_n + \alpha_i h,\ y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j\right); \quad i = 1, \ldots, 6$$

6x moramo izvrednotiti vrednost funkcije f. Iz istih 6 koeficientov nato sestavimo metodo reda 4 in kontrolno metodo reda 5.

Približek:

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{6} \gamma_i k_i + O(h^5)$$

Kontrola:

$$y_{n+1}^* = y_n + \sum_{i=1}^{6} \gamma_i^* k_i + O(h^6)$$

Ocena za napako pri izračunu y_{n+1} je potem:

$$\Delta = y_{n+1} - y_{n+1}^* = \sum_{i=1}^{6} (\gamma_i - \gamma_i^*) k_i + O(h^5)$$

To je dominanten prispevek.

Opomba: Metoda je mogoča v več različicah z različnimi kombinacijami parametrov $\alpha_i, \beta_{ij}, \gamma_i^*, \gamma_i$.

Formule za Runge-Kutta-Fehlbergovo metodo

Miha Mihovilovič

March 2022

Runge-Kutta-Fehlbergova metoda sloni na eksplicitni 6-stopenjski metodi Runge-Kutta za numerično reševanje diferencialne enačbe $y' = f(x, y)$ s korakom h:

$$k_i = hf\left(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j\right), \qquad i = 1, \ldots, 6\,.$$

Iz koeficientov $k_1, \ldots, k_6$ sestavimo metodo reda 4 za izračun vrednosti y(x) v naslednjem koraku $n + 1$:

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{6} \gamma_i\ k_i + \mathcal{O}(h^5)\,.$$

Iz istih koeficientov sestavimo tudi kontrolno metodo reda 5 za oceno napake metode reda 4:

$$y^*_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{6} \gamma^*_i\ k_i + \mathcal{O}(h^6)\,.$$

Lokalno napako metode ocenimo iz razlike $|y_{n+1} - y^*_{n+1}|$. Metodo je mogoče implementirati z različnimi koeficienti α_i, β_{ij}, γ_i in γ^*_i. Originalni parametri Fehlberga so navedeni v Tabeli 1. Parametri metode Cash-Karp pa so prikazani v Tabeli 2.

Fehlberg								
i	a_i	b_{ij}					γ_i	γ^*_i
1	0						$\frac{25}{216}$	$\frac{16}{135}$
2	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					0	0
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				$\frac{1408}{2565}$	$\frac{6656}{12825}$
4	$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$			$\frac{2197}{4104}$	$\frac{28561}{56430}$
5	1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$		$-\frac{1}{5}$	$-\frac{9}{50}$
6	$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	0	$\frac{2}{55}$
	j	1	2	3	4	5		

Table 1: Parametri Fehlberga za vloženo metodo Runge-Kutta 4(5).

Cash-Karp								
i	a_i	b_{ij}					γ_i	γ_i^*
1	0						$\frac{2825}{27648}$	$\frac{37}{378}$
2	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					0	0
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				$\frac{18575}{48384}$	$\frac{250}{621}$
4	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$-\frac{9}{10}$	$\frac{6}{5}$			$\frac{13525}{55296}$	$\frac{125}{594}$
5	1	$-\frac{11}{54}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{70}{27}$	$\frac{35}{27}$		$\frac{277}{14336}$	0
6	$\frac{7}{8}$	$\frac{1631}{55296}$	$\frac{175}{512}$	$-\frac{575}{13824}$	$\frac{44275}{110592}$	$\frac{253}{4096}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{512}{1771}$
	j	1	2	3	4	5		

Table 2: Parametri Cash-Karp za vloženo metodo Runge-Kutta 4(5).

Naša napaka pri koraku h je Δ, mi pa si želimo napako Δ_0, za katero potem potrebujemo drug korak h_0. Tega izračunamo iz razmerja!

$$\left.\begin{aligned} \Delta &= C \cdot h^5 \\ \Delta_0 &= C\, h_0^5 \end{aligned}\right] \div$$

$$h_0 = h_1 \cdot \underbrace{\left[\frac{\Delta_0}{\Delta}\right]^{\frac{1}{5}}}_{g} = h_1 \cdot g$$

Če ugotovimo, da je $\Delta > \Delta_0$, potem nov korak izračunamo kot $h_0 = h \cdot g$; $|g| < 1$.

Kakšno lokalno napako Δ_0 pa pričakujemo? To želimo povezati z zahtevano relativno natančnostjo ε. Če vemo, da je v koraku x_n sprememba funkcije $h \cdot f(x_n)$, potem vemo, da je lokalna napaka:

$$\Delta_0 = \varepsilon \cdot h\, f(x_n)$$

Prilagajanje korakov pa gre izkoristiti tudi v drugo smer. Če ugotovimo, da je v x_n koraku $\Delta < \Delta_0$, potem lahko korak v naslednji iteraciji povečamo:

$$h \longrightarrow h_0 = (hg) \quad ; \quad |g| > 1.$$

Komentar: Ko spremenimo velikost koraka, se pri skrajnem ε spremeni tudi Δ_0:

$$\Delta_0 \longrightarrow \Delta_0 = \varepsilon h g \cdot f(x_n)$$

Mi hočemo, da je v novem koraku:

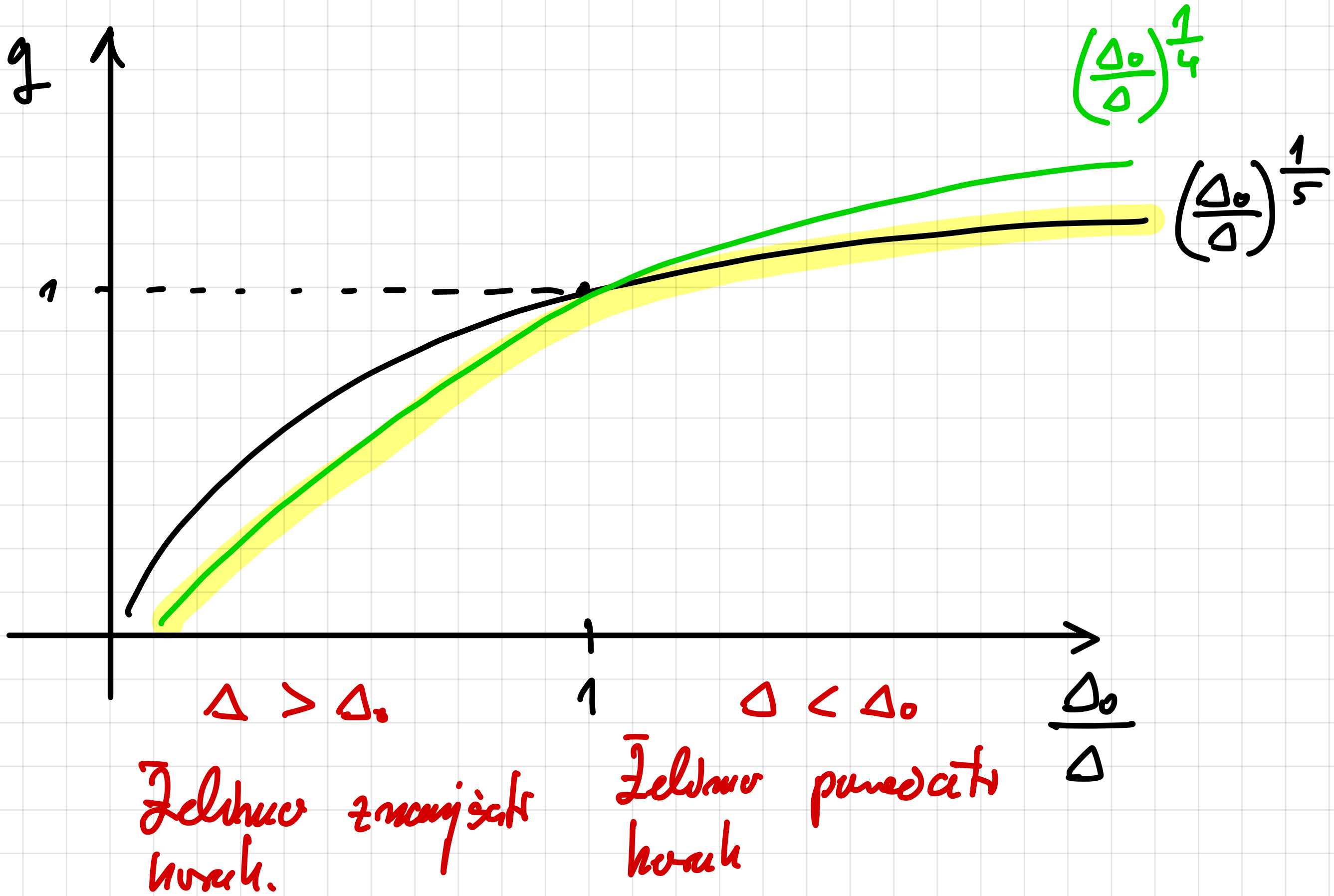
$$\tilde{\Delta} = (g \cdot h)^{\cancel{5}\,4} \underline{C} < \varepsilon \cancel{(hg)} f(x_n)$$

Izrazimo iz prejšnjega koraka

$$C = \frac{\Delta}{h^5}$$

Dobimo oceno za g!

$$g = \left[\frac{\varepsilon h f(x_n)}{\Delta} \right]^{\frac{1}{4}} = \left[\frac{\Delta_0}{\Delta} \right]^{\frac{1}{4}}$$



Uporabimo pragmatičen pristop. Korak povečujemo počasneje, zmanjšujemo ga pa hitreje:

$$
g = \begin{cases} S\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right)^{\frac{1}{5}} & ; \quad \Delta < \Delta_0 \\[2ex] S\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right)^{\frac{1}{4}} & ; \quad \Delta > \Delta_0 \end{cases}
$$

Za vsak slučaj pa dodamo še en "Safety factor": $0 < S < 1$, da korak ne bi preveč narastel!

Izgled: Integriranje Gaussove porazdelitve z adaptivnim korakom (izboljšava integracijske metode iz 2. predavanja)

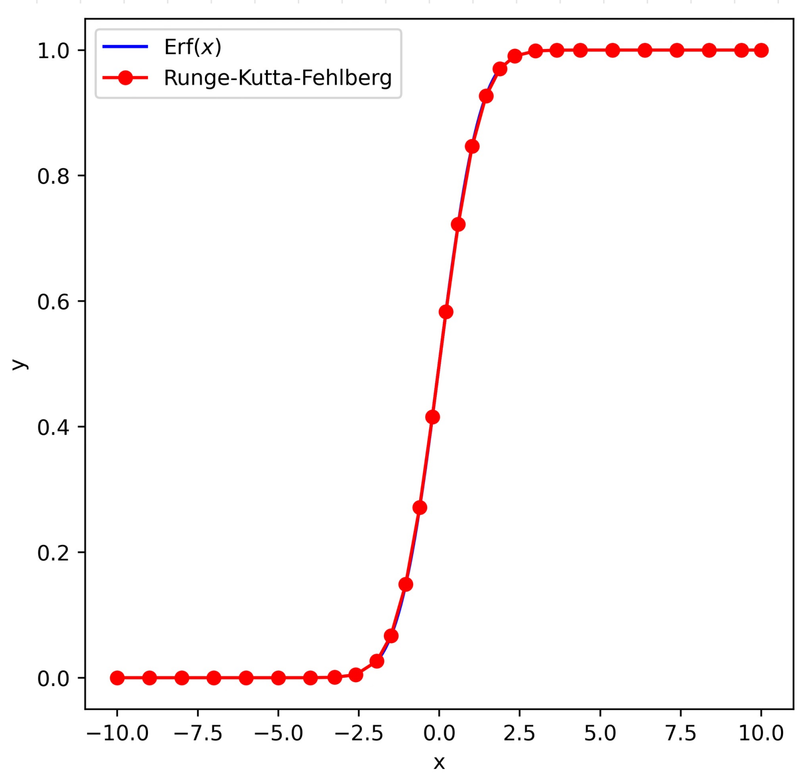
$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Analitična rešitev: $Y(x) = \frac{1}{2}\left[1 + \mathrm{Erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\right]$

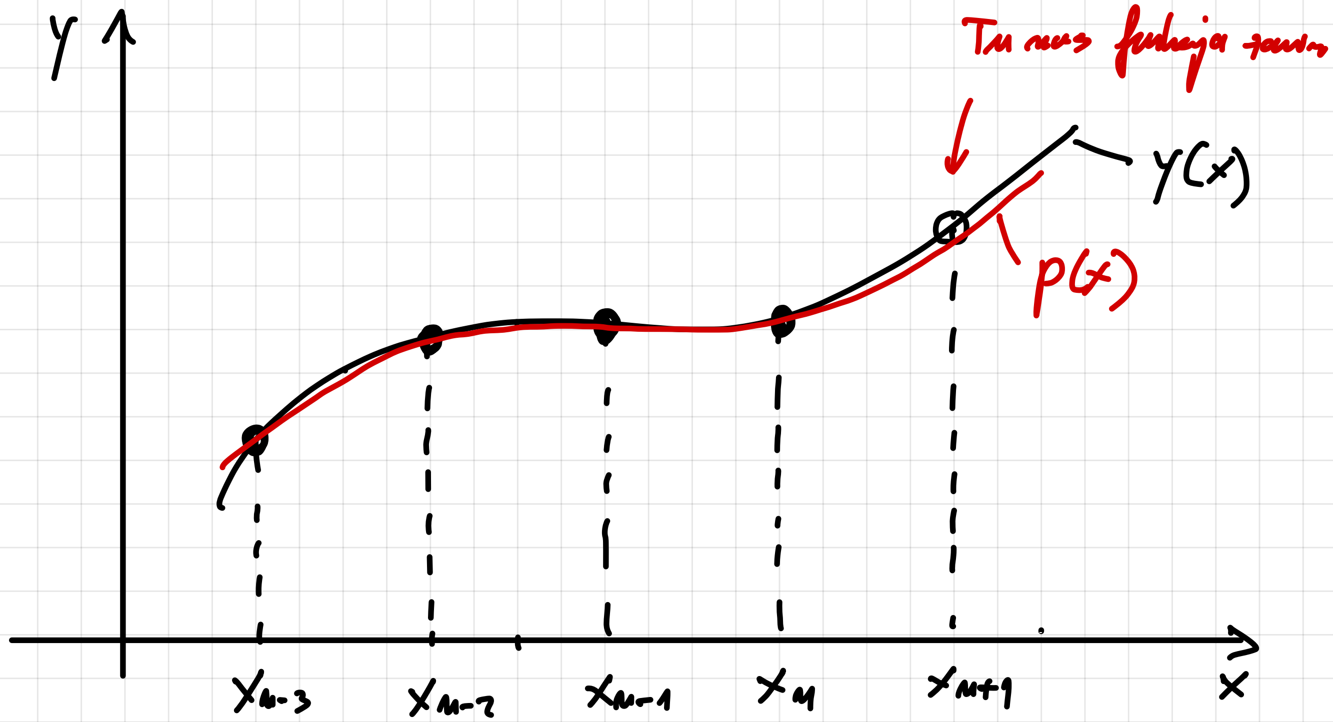
Numerično rešitev lahko dobimo z reševanjem diferencialne enačbe z ustreznim robnim pogojem.

$$y(x) = \int_{-\infty}^{x} g(x')\,dx' \iff y'(x) = g(x);\; y(-\infty) = 0$$

To lahko rešimo z metodo RKF z adaptivnim korakom.



Adamsove veččlenske metode:



Ideja:

$$\underbrace{y'(x) = f(x, y(x))}$$

Diferencialno enačbo prepišemo v integral

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)\,dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)\,dx$$

Funkcijo $f(x,y)$ aproksimiramo interpolacijskim polinomom, ki gre okoliške točke, ki jih vrednost že poznamo, vrednost pa iščemo.

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p'(x)\,dx$$

Stopnja polinoma raste s številom točk, ki jih upoštevamo v interpolaciji. To nam da Adamsove eksplicitne in implicitne metode.

Eksplicitna Adams–Bashforthova metoda 3. reda:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}\Big(23 f(x_n, y_n) - 16 f(x_{n-1}, y_{n-1}) + 5 f(x_{n-2}, y_{n-2})\Big) + O(h^4)$$

Implicitna Adams–Moultonova metoda 3. reda:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}\Big(5 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + 8 f(x_n, y_n) - f(x_{n-1}, y_{n-1})\Big) + O(h^4)$$

Metode Prediktor – korektor:

Združitev Adamsovih eksplicitnih in implicitnih metod.

A.) Eksplicitna metoda se zanaša na ekstrapolacijo interpolacijskega polinoma v točko x_{n+1}.
To imenujemo napoved oziroma prediktor: $y^{(P)}_{n+1}$

B.) Odvod, ki ga iz te vrednosti izračunamo je

$$y'^{(P)}_{n+1} = f\left(x_{n+1}, y^{(P)}_{n+1}\right)$$

Ta korak imenujemo evalvacija. (ang. evaluation)

C.) Uporabimo implicitno metodo in jo rešimo iterativno, kjer za začetni približek funkcije, ki je še ne poznamo vzamemo kar rezultate eksplicitne metode. Popravljeno rešitev po enem koraku imenujemo korektor: $y^{(C)}_{n+1}$.

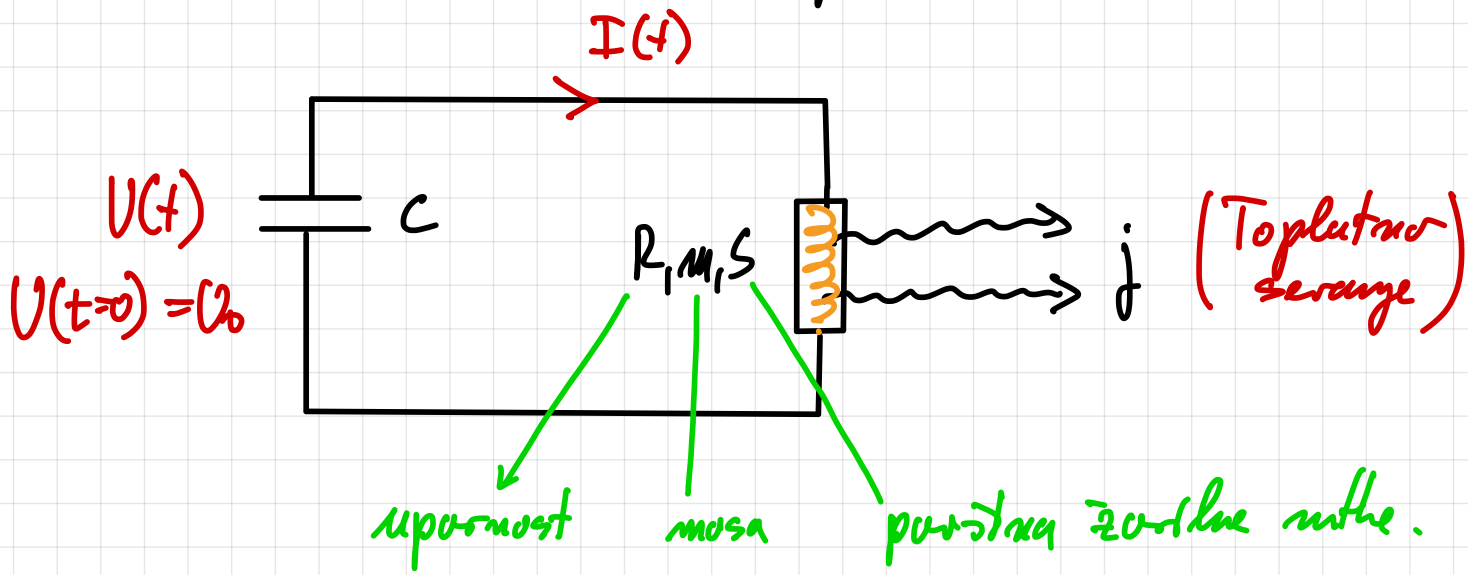
D.) Izračunamo pripadajoči odvod:

$$y'^{(C)}_{n+1} = f\left(x_{n+1}, y^{(C)}_{n+1}\right)$$

Postopek je: A → B → C → D

Koraka C in D ponavljamo, dokler nismo zadovoljni!

Naloga: Žarilno nitko žarnice grejemo s tokovnim sunkom iz kondenzatorja.



Sprememba notranje energije žarilne nitke:

$$\frac{dW}{dt} = P_I - P_s = UI - \sigma T^4 \cdot S$$

$$m \cdot c_v \frac{dT}{dt} = \frac{U^2}{R} - \sigma T^4 S$$

Kondenzator se sprazni skozi upornik.
Odvisnost potenciala: $U(t) = U_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$
$\tau = RC$

$$m c_v \frac{dT}{dt} = \frac{U_0^2}{R^2} e^{-\overbrace{2\frac{t}{\tau}}^{=x}} - \sigma T^2 S$$

Vpeljemo brezdimenzijski čas: $x = \frac{2t}{\tau}$

Vpeljemo še brezdimenzijsko temperaturo:

$$u = \frac{T}{T_0} \quad , \quad \text{kjer je} \quad T_0 = \sqrt[3]{\frac{2mc_v}{S\tau\sigma}}$$

Dobimo:

$$\frac{2mc_v}{\tau} \cancel{T_0} \frac{du}{dx} = \frac{\cancel{T_0}}{T_0}\frac{v_0^2}{R} e^{-x} - \sigma S T_0^{\cancel{4}\,3} u^4 \Big/ : T_0$$

$$\frac{2mc_v}{\tau} \frac{du}{dx} = \frac{v_0^2}{RT_0} e^{-x} - \frac{2mc_v}{\tau} u^4 \Big/ : \frac{2mc}{\tau}$$

$$\frac{du}{dx} = \underbrace{\frac{v_0^2 \tau}{2mc_v RT_0}}_{=a} e^{-x} - u^4$$

$$\boxed{\frac{du}{dx} = a e^{-x} - u^4}$$

Enačbo rešujemo od pogojem $u(0)=0$