Pokročilé numerické metody II
6. přednáška

Metody zpětného derivování
Tuhé problémy

Jiří Zelinka

Obecná vícekroková metoda

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{s} a_j y_{i-j} + h \sum_{j=-1}^{s} b_j y'_{i-j},$$

$y_0, \ldots, y_s$ – počáteční hodnoty.

$b_{-1} = 0$: explicitní metoda, $b_{-1} \neq 0$: implicitní metoda

Konzistence:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{s} a_j &= 1 \\ -\sum_{j=0}^{s} j a_j + \sum_{j=-1}^{s} b_j &= 1 \end{aligned}$$

D–stabilita

Metoda se nazývá **D–stabilní** (stabilní podle Dahlquista, 'zero stability'), jestliže pro všechna řešení z_l charakteristické rovnice (kořeny charakteristického polynomu)

$$z^{s+1} = \sum_{j=1}^{s} a_j z^{s-j}$$

platí $|z_l| \le 1$ a pokud $|z_l| = 1$, je z_l jednoduchý.

Věta

Metoda je konvergentní právě tehdy, když je konzistentní a D–stabilní.

Řád konvergence D–stabilních metod

Pro k–krokové D–stabilní metody platí pro jejich řád konvergence p (tzv. **první Dahlquistova bariéra**):

$p \leq k$	pro explicitní metody
$p \leq k+1$	pro implicitní metody, k liché
$p \leq k+2$	pro implicitní metody, k sudé

Stabilita

Testovací úloha: $y' = \lambda y$, $y(0) = 1$, řešení: $y(x) = e^{\lambda x}$.

Obecná $s+1$ kroková formule:

$$y_{i+1}(1 - h\lambda b_{-1}) = \sum_{j=0}^{s} (a_j + h\lambda b_j) y_{i-j}$$

Charakteristická rovnice:

$$(1 - h\lambda b_{-1}) z^{s+1} = \sum_{j=0}^{s} (a_j + h\lambda b_j) z^{s-j}$$

Řešení charakteristické rovnice: $z_j = z_j(h)$, $j = 0, \ldots s$, pro jednoduchost předpokládejme, že jsou jednoduchá.

Numerické řešení:

$$y_i = \sum_{j=0}^{s} c_j z_j^i, \; c_j = c_j(h)$$

Pro $h \to 0$ má charakteristická rovnice tvar $z^{s+1} = \sum_{j=0}^{s} a_j z^{s-j}$,
vzhledem k 1. podmínce konzistence je jedno řešení rovno 1, označme ho z_0.

Z 2. podmínky konzistence dostaneme $z_0(h) = 1 + \lambda h + O(h^2)$.

Protože $1 + \lambda h = e^{\lambda h} + O(h^2)$, platí

$$z_0^i = (1 + \lambda h + O(h^2))^i = e^{\lambda h i} + O(h^2) = e^{\lambda x_i} + O(h^2).$$

Takže pro malá h výraz $c_0 z_0^i$ aproximuje přesné řešení, platí $c_0(h) \to 1$.
Ostatní řešení pro $z_1, \ldots, z_s$ jsou tzv. parazitní řešení, $c_j(h) \to 0$ pro $j = 1, \ldots, s$.

Protože je řešení lineární kombinací z_j^i, musí platit $|z_j| < 1$ pro všechna řešení a parazitní řešení nesmí převážit z_0.

Oblast stability:

Oblast stability je množina komplexních čísel $\tilde{h} = h\lambda$, pro které $|z_j| < 1$, $j = 0, \ldots, s$ a $|\frac{z_j}{z_0}| \leq 1$, $j = 1, \ldots, s$, přičemž pro $|z_j| = |z_0|$ je z_j jednoduchý kořen.

Absolutně stabilní metoda je taková, jejíž oblast stability obsahuje všechna komplexní čísla se zápornou reálnou složkou. (Někdy se požaduje, aby obsahovala zápornou část reálné osy.)

Explicitní vícekrokové metody nemohou být absolutně stabilní, implicitní vícekrokové metody, které jsou absolutně stabilní mají řád přesnosti maximálně 2 (tzv. **druhá Dahlquistova bariéra**).

Metody prediktor–korektor

Kombinace explicitní (prediktor) a implicitní (korektor) metody stejných řádů přesnosti.

Příklad 1:

prediktor	$y_{i+1}^{(0)} = y_i + \frac{h}{2}(3f_i - f_{i-1})$	AB metoda
korektor	$y_{i+1}^{(r+1)} = y_i + \frac{h}{2}(f_{i+1}^{(r)} + f_i)$	LM

Příklad 2:

prediktor	$y_{i+1}^{(0)} = y_i + \frac{h}{24}(55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3})$	AB
korektor	$y_{i+1}^{(r+1)} = y_i + \frac{h}{24}(9f_{i+1}^{(r)} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2})$	AM

Metody prediktor–korektor se zpravidla používají s proměnnou délkou kroku, který se mění na základě odhadu lokální chyby.

Metody zpětného derivování (BDF)

V rovnici $y'(x_{i+1}) = f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))$ nahradíme derivaci funkce y v bodě x_{i+1} derivací interpolačního polynomu v bodech $[x_{i+1}, y_{i+1}]$, $[x_i, y_i]$,...,$[x_{i-s}, y_{i-s}]$.

Příklady: $s = 0$, $s = 1$.

Obecný tvar:

$$\alpha_{s,-1}y_{i+1} + \alpha_{s,0}y_i + \alpha_{s,1}y_{i-1} + \cdots + \alpha_{s,s}y_{i-s} = hf(x_{i+1}, y_{i+1})$$

Tabulka koeficientů:

s	$\alpha_{s,-1}$	$\alpha_{s,0}$	$\alpha_{s,1}$	$\alpha_{s,2}$	$\alpha_{s,3}$	$\alpha_{s,4}$
0	1	-1				
1	3/2	-2	1/2			
2	11/6	-3	3/2	-1/3		
3	25/12	-4	3	-4/3	1/4	
4	137/60	-5	5	-10/3	5/4	-1/5

Alternativní formule:

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{s} a_j y_{i-j} + h b_{-1} f(x_{i+1}, y_{i+1})$$

Tabulka koeficientů:

s	$a_{s,0}$	$a_{s,1}$	$a_{s,2}$	$a_{s,3}$	$a_{s,4}$	$b_{s,-1}$
0	1					1
1	4/3	-1/3				2/3
2	18/11	-9/11	2/11			6/11
3	48/25	-36/25	16/25	-3/25		12/25
4	300/137	-300/137	200/137	-75/137	12/137	60/137

Konzistence, řád metody, D–stabilita, stabilita?

Označení BDFk: k-kroková metoda zpětného derivování, $k = s + 1$

Vztahy mezi koeficienty $\alpha_{s,j}$ a $a_{s,j}$, b_{-1}:

$a_{s,j} = -\frac{\alpha_{s,j}}{\alpha_{s,-1}}$, $b_{-1} = \frac{1}{\alpha_{s,-1}}$ $b_j = 0$ pro $j \geq 0$

První podmínka konzistence:

$$\sum_{j=-1}^{s} \alpha_{s,j} = 0$$

Druhá podmínka konzistence:

$$\sum_{j=-1}^{s} j\alpha_{s,j} = -1$$

Charakteristická rovnice pro D-stabilitu:

$$\alpha_{s,-1}z^{s+1} + \alpha_{s,0}z^{s} + \cdots + \alpha_{s,s} = 0$$

Charakteristika 1.

Počáteční problém je tuhý, když počet kroků potřebných k jeho vyřešení metodou s omezenou oblastí absolutní stability je podstatně větší než počet kroků, který k jeho vyřešení potřebuje metoda s neomezenou oblastní absolutní stability.

Příklad 1:

$$\begin{aligned} y_1' &= y_2 \\ y_2' &= -1000y_1 - 1001y_2 \\ y_1(0) &= -1 \\ y_2(0) &= 1 \end{aligned}$$

Řešení: $y_1(x) = -e^{-x}$, $y_2(x) = e^{-x}$

Stabilní problém

Počáteční problém $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ (může být i systém) se nazývá *stabilní*, jestliže malá změna f a y_0 způsobí malou změnu řešení.
Poznámka: Neplést si se stabilitou metody.

Pro lineární rovnice $y' = Ay$ hrají rozhodující roli vlastní čísla matice A (spektrální poloměr $\rho(A)$), pro nelineární rovnice je jejich lineární složka dána Jacobiovou maticí f_y.

Charakteristika 2.

Počáteční stabilní problém je tuhý, jestliže součin spektrálního poloměru Jacobiovy matice f_y a délky intervalu, na němž hledáme řešení je velký.

$$\max_{x \in [a,b]} \rho(f_y(x, y(x)))(b - a) >> 1$$

Charakteristika 3.

Tuhost problému se projevuje tím, že při numerickém řešení omezuje délku kroku spíš stabilita než přesnost.

Numerické řešení tuhých problémů: absolutně stabilní metody.

Příklad 2:

Při použití běžné metody může numerické řešení oscilovat
$y' = y^2 - y^3,\ y(0) = \delta,\ x \in [0, 2/\delta]$