

LUENTO 5 3.10.

Esim: Harmonisen oskillaattorin ratkaisu eri algoritmeilla

Euler, modifioitu Euler, Verlet, 'nopeus-Verlet'

Yksiaskelmenetelmät vs moniaskelmenetelmät

Ennustus-korjaus –periaate

Animaatio: kultalangan venytyksen simulointi, dynamiikka laskettu nopeus-Verlet –algoritmillä

Runge – Kutta [Haa02 luku 7]

7.3 Yksiaskelmenetelmät alkuarvotehtäville

Edellä esitetyt Eulerin menetelmä ja implisiittinen Eulerin menetelmä kuuluvat niin sanottuihin *yksiaskelmenetelmiin*. Samaan luokkaan kuuluvat myös Rungen ja Kuttan menetelmät.

Yksiaskelmenetelmät ovat yleisesti muotoa

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_{k+1} &= \mathbf{y}_k + h_{k+1} \Phi_{\mathbf{f}}(t_k, \mathbf{y}_k, t_{k+1}, \mathbf{y}_{k+1}; h_{k+1}), \\ t_{k+1} &= t_k + h_{k+1},\end{aligned}$$

missä funktiosta $\mathbf{f}$ ja argumenteista t_k , t_{k+1} , $\mathbf{y}_k$, $\mathbf{y}_{k+1}$ ja h_{k+1} riippuvaa funktiota $\Phi_{\mathbf{f}}$ kutsutaan lisäysfunktioksi. Uuden approksimaation $(t_{k+1}, \mathbf{y}_{k+1})$ laskemiseen tarvitaan siis vain edellinen piste $(t_k, \mathbf{y}_k)$.

7.3.1 Rungen ja Kuttan menetelmät

Integroimalla (7.1) saadaan

$$\mathbf{y}(t_{k+1}) = \mathbf{y}(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathbf{f}(\tau, \mathbf{y}(\tau)) d\tau.$$

Rungen ja Kuttan menetelmiin päädytään korvaamalla edellisen yhtälön integraali sopivilla approksimaatioilla. Yleinen s-vaiheinen Rungen ja Kuttan menetelmä on muotoa

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_{k+1} &= \mathbf{y}_k + h \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{k}_i, \\ \mathbf{k}_i &= \mathbf{f}(t_k + c_i h, \mathbf{y}_k + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \mathbf{k}_j),\end{aligned}$$

missä

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}. \quad (7.30)$$

Menetelmää karakterisoivat painot b_i , solmut c_i ja matriisialkiot a_{ij} määritetään haluttujen ominaisuuksien, kuten suurimman mahdollisen tarkkuuden, perusteella.

Jos $a_{ij} = 0$, kun $j \geq i$, menetelmä on eksplisiittinen eli avoin, ja

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_k, \mathbf{y}_k), \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}(t_k + c_2 h, \mathbf{y}_k + c_2 h \mathbf{k}_1), \\ \mathbf{k}_3 &= \mathbf{f}(t_k + c_3 h, \mathbf{y}_k + (c_3 - a_{32}) h \mathbf{k}_1 + h a_{32} \mathbf{k}_2), \\ &\vdots \end{aligned}$$

Tässä käytettiin hyväksi yhtälöä (7.30). Muussa tapauksessa on kyse implisiittisestä menetelmästä.

Varsinkin eksplisiittiset Rungen ja Kuttan menetelmät voidaan tulkita myös seuraavasti. Otetaan pisteestä $(t_k, \mathbf{y}_k)$ yksi Eulerin askel pituudeltaan $c_2 h$. Derivaatta saadussa pisteessä on $\mathbf{k}_2$. Palataan alkuun ja otetaan uusi Eulerin askel (pituus $c_3 h$) käyttäen derivaattojen $\mathbf{k}_1$ ja $\mathbf{k}_2$ painotettua keskiarvoa, jolloin saadaan $\mathbf{k}_3$. Näin lasketaan derivaatalle joukko approksimaatioita, joiden painotettua keskiarvoa käytetään viimeisessä Eulerin askeleessa pisteestä $(t_k, \mathbf{y}_k)$ pisteeseen $(t_{k+1}, \mathbf{y}_{k+1})$. Voidaan siis sanoa, että ennen lopullisen askeleen ottamista Rungen ja Kuttan menetelmät "tunnustelevat" derivaatan arvoa.

Esimerkki kaksivaiheisesta Rungen ja Kuttan menetelmästä on *Heunin menetelmä*:

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + \frac{h}{2} [\mathbf{f}(t_k, \mathbf{y}_k) + \mathbf{f}(t_{k+1}, \mathbf{y}_k + h \mathbf{f}(t_k, \mathbf{y}_k))].$$

Heunin menetelmä on toista kertalukua eli paikallinen virhe on $\mathcal{O}(h^3)$.

Tunnetuin Rungen ja Kuttan menetelmä on klassinen nelivaiheinen menetelmä

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + \frac{h}{6} (\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4),$$

jonka apuderivaatat ovat

$$\begin{cases} \mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t_k, \mathbf{y}_k), & \mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(t_k + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_k + \frac{h}{2} \mathbf{k}_1), \\ \mathbf{k}_3 = \mathbf{f}(t_k + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_k + \frac{h}{2} \mathbf{k}_2), & \mathbf{k}_4 = \mathbf{f}(t_{k+1}, \mathbf{y}_k + h \mathbf{k}_3). \end{cases}$$

Menetelmän kertaluku on neljä eli paikallinen virhe on $\mathcal{O}(h^5)$.

7.3.3 Yksiaskelmenetelmien vertailu

Seuraavassa käytämme esittelemiämme yksiaskelmenetelmiä tehtävän

$$y' = -5ty^2 + \frac{5}{t} - \frac{1}{t^2}, \quad y(1) = 1 \quad (7.32)$$

ratkaisemiseen välillä $(1, 10)$. Tarkka ratkaisu on $y(t) = 1/t$, jonka avulla saamme laskettua menetelmien virheet.

Taulukossa 7.2 on kunkin menetelmän tuottaman ratkaisun maksimipoikkeama oikeasta vastauksesta eli arvo $\max(|1/t_i - y_i|)$. Taulukossa 7.3 on annettu virheet välin päätepisteessä eli arvot $|1/10 - y_N|$.

Taulukko 7.2: Yksiaskelmenetelmien maksimivirheet.

h	<i>Euler</i>	<i>Impl. Euler</i>	<i>Trapetsi</i>	<i>RK2</i>	<i>RK4</i>
0.2	3.33e-2	9.23e-3	1.39e-3	1.39e-3	5.34e-3
0.1	9.09e-3	5.21e-3	2.83e-4	2.83e-4	2.04e-4
0.05	3.43e-3	2.80e-3	7.01e-5	7.01e-5	9.65e-6
0.02	1.27e-3	1.17e-3	1.11e-5	1.11e-5	2.09e-7
0.01	6.20e-4	5.97e-4	2.77e-6	2.77e-6	1.23e-8
0.005	3.08e-4	3.01e-4	6.92e-7	6.92e-7	7.47e-10
0.002	1.22e-4	1.21e-4	1.11e-7	1.11e-7	1.88e-11

Taulukko 7.3: Yksiaskelmenetelmien virheet välin päätepisteessä.

h	<i>Euler</i>	<i>Impl. Euler</i>	<i>Trapetsi</i>	<i>RK2</i>	<i>RK4</i>
0.2	1.13e-2	1.98e-5	1.92e-7	1.56e-2	1.01e-5
0.1	9.90e-6	1.01e-5	5.00e-8	1.01e-5	3.35e-7
0.05	5.13e-6	5.18e-6	1.30e-8	1.71e-6	1.70e-8
0.02	2.05e-6	2.05e-6	2.07e-9	2.26e-7	3.74e-10
0.01	1.03e-6	1.03e-6	5.19e-10	5.36e-8	2.23e-11
0.005	5.15e-7	5.16e-7	1.30e-10	1.31e-8	1.36e-12
0.002	2.06e-7	2.06e-7	2.08e-11	2.07e-9	3.47e-14