Wykład 7: Nieliniowe zagadnienie brzegowe dla równań różniczkowych zwyczajnych

Celem wykładu jest nieformalna prezentacja trzech podstawowych podejść stosowanych dla brzegowych zagadnień nieliniowych. Zademonstrujemy je na następującym zagadnieniu przykładowym

$$\begin{cases} y'' - ay + by^3 = f & x \in (0,1) \\ y(0) = y(1) = 0 & a, b, \text{ - stałe} \end{cases}$$

① Metoda bezpośredniej dyskretyzacji

W zasadzie - metody! Dyskretyzacja, czyli proces konstrukcji zagadnienia algebraicznego aproksymującego rozważane zagadnienie różniczkowe, może być bowiem wykonana na wiele sposobów (metoda różnic skończonych, metoda elementów skończonych, metody spektralne itd.) Użyjemy metody różnicowej. Załóżmy, że w przedziale $[0,1]$ wprowadzono równomierną siatkę różnicową

$$\{0 = x_0, x_1, \ldots, x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, \ldots, x_{M+1} = 1\}$$

$$h = x_{j+1} - x_j, \quad h = 1.0/(M+1), \quad x_j = j \cdot h$$

Postać różnicowa r-nia różniczkowego:

$$\frac{1}{h^2}(y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1}) - ay_j + by_j^3 = f_j \qquad j = 1, \ldots, M$$

oraz w-nki brzegowe: $y_0 = 0$ i $y_{M+1} = 0$

Po pomnożeniu przez $-h^2$, otrzymamy:

$$-y_{j-1} + (2 + ah^2)y_j - bh^2 y_j^3 - y_{j+1} = -h^2 f_j \ , \quad j = 1, .., M$$

Otrzymaliśmy nieliniowy układ algebraiczny. Uwzględniając w-nki brzegowe, możemy zapisać go tak

$$\mathbf{T}y - \mathcal{N}(y) = r,$$

gdzie $\mathbf{T}$ oznacza macierz trójdiagonalną

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 2+ah^2 & -1 & & & & 0 \\ -1 & 2+ah^2 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & -1 & 2+ah^2 & -1 \\ & & & & -1 & 2+ah^2 \end{bmatrix},$$

$\mathcal{N}(y)$ - człony nieliniowe

$$\mathcal{N}(y) = \begin{bmatrix} bh^2 y_1^3 \\ bh^2 y_2^3 \\ \vdots \\ bh^2 y_M^3 \end{bmatrix}$$

oraz r - wektor prawej strony $(r_j = -h^2 f_j)$

Sprowadziliśmy zadanie do algebry. Mamy układ NIELINIOWY - metoda rozwiązania jest ITERACYJNA.

Możemy użyć ITERACJI PROSTEJ. Piszemy

$$T y^{(n+1)} = r + N(y^{(n)}) \qquad n = 0, 1, .., \text{aż do zbieżności}$$

W każdej iteracji należy wyznaczyć rozwiązanie układu równań LINIOWYCH z macierzą trójdiagonalną.
Jeżeli **T** spełnia odpowiednie warunki (wystarczy, że $a > 0$) to jest to łatwe i bardzo szybkie (algorytm przegaszania)
Ilość potrzebnych iteracji może być znaczna - zbieżność jest co najwyżej liniowa i może być dość powolna
Startowy $y^{(0)}$ może być w zasadzie dowolny. Rozsądnie jest przyjąć np., że $y^{(0)}$ jest rozwiązaniem zadania liniowego:

$$T y^{(0)} = r$$

Jest to dobry pomysł szczególnie, gdy nieliniowość jest słaba (u nas: współczynnik b jest mały). W ogólnym przypadku mogą wystąpić kłopoty z zbieżnością.
Niezłym remedium może być kontynuacja po parametrze b
(vide Wykład 6)

Szybszą (na ogół) zbieżność uzyskamy stosując metodę Newtona. Należy obliczyć macierz Jacobiego dla funkcji $\mathbf{F}(y)$ zdefiniowanej następująco:

$$\mathbf{F}(y) = \begin{Bmatrix} f_1(y_1, \dots, y_M) \\ \vdots \\ f_M(y_1, .., y_M) \end{Bmatrix}$$

$$f_j(y_1, .., y_M) = -y_{j-1} + (2 + ah^2)y_j - bh^2 y_j^3 - y_{j+1} + h^2 f_j$$

$$j = 1, .., M$$

Biorąc pod uwagę w-nki brzegowe, mamy:

$$\{F'(y)\}_{jk} = \frac{\partial f_j(y_1,..,y_M)}{\partial y_k} \equiv 0 \quad \text{gdy} \quad k \notin \{j-1, j, j+1\}$$

oraz

$$\{F'(y)\}_{11} = 2 + ah^2 - 36h^2 y_1^2$$

$$\{F'(y)\}_{12} = -1$$

$$\{F'(y)\}_{j,j-1} = -1$$

$$\{F'(y)\}_{j,j} = 2 + ah^2 - 36h^2 y_j^2 \qquad j = 2,..,M-1$$

$$\{F'(y)\}_{j,j+1} = -1$$

$$\{F'(y)\}_{M,M-1} = -1$$

$$\{F'(y)\}_{M,M} = 2 + ah^2 - 36h^2 y_M^2$$

Jak widać, macierz Jacobiego jest trójdiagonalna - jest to macierz T ze zmodyfikowaną główną diagonalą. Zauważmy że w każdej iteracji metody Newtona rozwiązać należy układ LINIOWY postaci:

$$F'(y^{(n)}) \cdot \mathcal{E}^{(n)} = - F(y^{(n)})$$

po czym położyć $y^{(n+1)} = y^{(n)} + \mathcal{E}^{(n)}$. Tym razem macierz układu jest zmienna. Ponieważ pozostaje 3-diagonalną układ można (przy spełnieniu odpowiednich warunków) rozwiązać efektywnie metodą przegaiania. Tak będzie, o ile nieliniowość jest dostatecznie słaba.

Ćwiczenie: dopracować szczegóły metody Newtona pod kątem numerycznej implementacji

2) Metoda quasi-linearyzacji

Poprzednio omówione podejście polega na przeprowadzeniu dyskretyzacji bezpośrednio na nieliniowym problemie różniczkowym, a następnie rozwiązaniu ITERACYJNIE otrzymanego problemu ALGEBRAICZNEGO.
Metoda quasi-linearyzacji polega, w pewnym sensie, na odwróceniu tej kolejności.

Niech $y^{(n)}$ oznacza bieżące aktualne przybliżenie rozwiązania problemu brzegowego (jest to zatem funkcja!)
Następne (przypuszczalnie lepsze) przybliżenie poszukujemy w postaci

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + w^{(n)}$$

↳ funkcja-poprawka

W idealnej sytuacji $w^{(n)}$ byłaby taka, że $y^{(n+1)}$ spełniałaby równanie (i w-nki brzegowe). Podstawmy do r-nia:

$$y''^{(n)} + w''^{(n)} - ay^{(n)} - aw^{(n)} + b(y^{(n)}+w^{(n)})^3 = f$$

Jest to oczywiście nieliniowe równanie na w - równie trudne do rozwiązania jak wyjściowe dla y. Dokonajmy jednak linearyzacji tzn. zastąpmy otrzymane równanie równaniem liniowym pomijając w tym pierwszym wszelkie człony nieliniowe względem w. Mamy:

$$(y^{(n)}+w^{(n)})^3 = y^{(n)3} + 3y^{(n)2} w^{(n)} + \underbrace{\ldots}_{\text{odrzucamy!}}$$

UWAGA: W naszym przykładzie nieliniowość jest wielomianowa toteż rozwinięcie wyrazu nieliniowego może być wykonane zgodnie ze wzorami algebry. W przypadku ogólnym stosujemy rozwinięcie w szereg Taylora. Np.:

$$\sin\left(y^{(n)} + \omega^{(n)}\right) \cong \sin\left(y^{(n)}\right) + \cos\left(y^{(n)}\right)\cdot \omega^{(n)} \underbrace{+\ldots}_{\text{odrzucone człony nieliniowe}}$$

Otrzymaliśmy równanie RÓŻNICZKOWE LINIOWE dla $\omega^{(n)}$:

$$w''^{(n)} - \left(a - 3by^{2(n)}\right)\omega^{(n)} =$$

$$= f - \left(y''^{(n)} - ay^{(n)} + by^{3(n)}\right)$$

Jest to równanie o zmiennych współczynnikach - ale LINIOWE! Dokonajmy jego dyskretyzacji metodą różnic skończonych

$$\frac{w_{j-1}^{(n)} - 2w_j^{(n)} + \omega_{j+1}^{(n)}}{h^2} - \left(a - 3by_j^{2(n)}\right)w_j^{(n)} =$$

$$= f_j - \left(y_j''^{(n)} - ay_j^{(n)} + by_j^{3(n)}\right)$$

Warunki brzegowe zadania są liniowe. Wystarczy zatem, że spełnia je $y^{(0)}$, a kolejne funkcje $w^{(0)}, w^{(1)}, \ldots$ mają w-nki zerowe. Uwzględniając $\omega_0^{(n)} = \omega_{M+1}^{(n)} = 0$, dochodzimy do 3-diagonalnego układu liniowego. Obliczanie prawej strony wymaga wyznaczenia $y_j''^{(n)}$. Można to zrobić na wiele sposobów, lecz zwykle napisalibyśmy

$$y_j''^{(n)} \approx \frac{1}{h^2}\left(y_{j-1}^{(n)} - 2y_j^{(n)} + y_{j+1}^{(n)}\right)$$

Ćwiczenie: Dopracować szczegóły. Porównać układ liniowy otrzymany w opisanej metodzie z układem równań liniowych z iteracji metody Newtona w metodzie bezpośredniej 1.

(3) Metoda strzału

Jest to podejście bazujące na zupełnie odrębnym pomyśle niż dotychczas zaprezentowane. Rozważmy ponownie nasze zadanie brzegowe

$$\begin{cases} y'' - ay + by^3 = f \\ y(0) = 0 \\ y(1) = 0 \end{cases}$$

i następujące zadanie POCZĄTKOWE z parametrem:

$$(*) \quad \begin{cases} y'' - ay + by^3 = f \\ y(0) = 0 \\ y'(0) = \alpha \end{cases}$$

Metoda strzału polega na dobraniu wartości parametru α w taki sposób, aby rozwiązanie zagadnienia początkowego (*) dla $x = 1$ miało własność $y(1) = 0$. Wówczas rozwiązanie to jest jednocześnie funkcją spełniającą oryginalne zadanie brzegowe.

Załóżmy, że dysponujemy procedurą numeryczną rozwiązującą zadanie początkowe (*) w przedziale $x \in [0,1]$, przy dowolnym zadanym α. Szczegóły nie są ważne – – będzie to zapewne solver oparty na metodzie 4 rzędu, być może z adaptacją kroku całkowania i innymi „bajerami". Jego rolą jest wyprodukowanie wartości $y(1)$ dla zadanej α i tylko tyle. Przedstawia to obrazek.

$\alpha \longrightarrow$ [Solver zagadnienia początkowego dla $x \in [0,1]$] $\longrightarrow y(1)$

„Czarna skrzynka"

Zdefiniowaliśmy tym samym przyporządkowanie (funkcję) $\alpha \rightarrow y(1)$; oznaczmy ją $g: g(\alpha) = y(1)$.

Zadanie polega na znalezieniu $\alpha = \alpha_*$ takiego że

$$g(\alpha_*) \equiv 0 \qquad (**)$$

Równanie (**) to, formalnie, algebraiczne równanie nieliniowe. To, że dla g nie ma JAWNEJ FORMUŁY (wzoru) NIE MA ZNACZENIA! Standardowe algorytmy dla równania nieliniowego jak bisekcja, falsi, czy metoda siecznych zadowalają się całkowicie możliwością obliczenia wartości g dla zadanego α – nie obchodzi ich natomiast JAK to jest zrobione!

Wyjątek stanowi metoda stycznych (Newtona) – tu potrzeba obliczać $g'(\alpha)$! Z braku jawnej formuły, skazani jesteśmy na aproksymację np. tak:

$$g'(\alpha) \cong \frac{g(\alpha + \Delta\alpha) - g(\alpha)}{\Delta\alpha}$$

gdzie $\Delta\alpha$ - mały przyrost α.

Przypomnijmy (kurs TK2), że równanie 2-ego rzędu należy sprowadzić do układu dwóch równań 1-ego rzędu. Mianowicie: $z_1 = y$, $z_2 = y'$ i

$$\begin{cases} z_1' = z_2 \\ z_2' = az_1 - bz_1^3 + f. \end{cases}$$

$$z_1(0) = 0, \quad z_2(0) = \alpha$$

Rozważmy zadanie wyższego (3-ego) rzędu:

$$\begin{cases} y''' - ay + by^3 = f \\ y(0) = 0 \\ y(1) = 0 \\ y'(1) = 1 \end{cases}$$

Teraz zadanie początkowe przyjmie postać

$$\begin{cases} y''' - ay + by^3 = f \\ y(0) = 0 \\ y'(0) = \alpha \\ y''(0) = \beta \end{cases}$$

tj. mamy dwa parametry α i β. Tym samym „czarna skrzynka" zwraca wartości $y(1)$ i $y'(1)$. Mamy zatem dwie funkcje: $g_1(\alpha,\beta) = y(1)$ i $g_2(\alpha,\beta) = y'(1)$ i dwa równania:

$$\begin{cases} g_1(\alpha,\beta) = 0 \\ g_2(\alpha,\beta) - 1 = 0 \end{cases}$$

Można je rozwiązać metodą iteracyjną Newtona-Raphsona pod warunkiem, że macierz Jacobiego obliczymy stosując aproksymację różnicową pochodnych cząstkowych. Np.

$$\frac{\partial g_1}{\partial \beta}(\alpha,\beta) \approx \frac{g_1(\alpha, \beta + \Delta\beta) - g(\alpha,\beta)}{\Delta\beta}$$

„Dwuparametryczność" metody strzału da się w omawianym przypadku uniknąć. Sformułujmy zagadnienie początkowe inaczej.

$$\begin{cases} y''' - ay + by^3 = f \\ y(1) = 0 \\ y'(1) = 1 \\ y''(1) = \alpha \end{cases}$$

i całkujemy je WSTECZ tj. od $x=1$ do $x=0$.
Efektem całkowania będzie $y(0)$, co zapiszemy

$$g(\alpha) = y(0)$$

Stąd pojedyncze równanie $g(\alpha) = 0$ a nie układ.

UWAGA: przy całkowaniu wstecz mogą pojawić się kłopoty ze stabilnością odliczeń „czarnej skrzynki"!

Na zakończenie wypada powiedzieć, że zastosowanie metody strzału do zagadnienia brzegowego jest szczególnym przypadkiem sytuacji, w której niewiadomymi są parametry pewnego zagadnienia początkowego. Ogólniejszym zadaniem jest zagadnienie trafienia w cel (zatem dosłownie zagadnienie „strzału"), szczególnie ruchomy. Parametrem jest np. kąt α ustawienia lufy działa. Warunek trafienia ma zwykle postać uwikłaną i inną:

Dobierz α tak aby współrzędna x pocisku była równa L (aktualne położenie celu) w chwili gdy współrzędna y pocisku wynosi H (cel jest na wysokości H nad ziemią)

Itd. itp....