Numerieke simulatie van differentiaalvergelijkingen

Giovanni Samaey en Stefan Vandewalle

Les 1

Motivatie / Belang van dit vak
Praktische afspraken
Voorwaartse Eulermethode

Het belang van simulatie

- Differentiaalvergelijkingen modelleren systemen die *evolueren in de tijd*, en/of *variëren in de ruimte*.
- Worden gebruikt voor simulatie wanneer een fysisch experiment niet ideaal is (zie Prezi filmpje) :
  - Experiment te duur: bvb. ontwerp van auto's
  - Experiment te gevaarlijk: bvb. bosbrand
  - Experiment onmogelijk: bvb. weersvoorspelling
  - Experiment geeft onvoldoende inzicht: bvb. kanker
  - Experiment onethisch: bvb. medicatie

Werkcyclus bij numerieke simulatie

1) Constructie van model

Gewone/partiële differentiaalvergelijking
Stochastische differentiaalvergelijking
Differentiaal-algebraïsche vergelijking
Integraalvergelijking, …

2) Discretisatie

Discretisatie in ruimte en tijd

3) Oplossingsmethode

Oplossen van grote stelsels vergelijkingen

4) Implementatie

Efficiënte en betrouwbare software
Parallellisatie

5) Oplossing en interpretatie

Optimalisatie, controle
Niet-lineaire systemen

Inhoud van dit vak

- Simulatie van ***gewone*** differentiaalvergelijkingen (**3 stp**.) (woensdag **tweewekelijks** – 5 lessen – Giovanni Samaey)
  - Enkel tijdsdiscretisatie
  - Convergentie en stabiliteit
  - Foutenschatting en efficiëntie
  - Specifieke problemen: stijfheid en geometrische integratie
- Simulatie van ***partiële*** differentiaalvergelijkingen (**3 stp**.) (donderdag – 8 + 2 lessen – Stefan Vandewalle)
  - Combinatie van ruimte- en tijdsdiscretisatie
  - Elliptische, parabolische en hyperbolische problemen

Doelstellingen

- **Theorie en principes van de methodes**
  - *Niet louter gebruik* van de methodes, maar ook ontwerp, en inzicht in hun eigenschappen (convergentie, efficiëntie, nauwkeurigheid).
  - Technische afleiding van methodes en hun eigenschappen heeft belang, *voor zover ze de onderliggende principes verklaart* ! (Geen bewijzen om de bewijzen…)
- **Praktische ervaring met de methodes**
  - *Niet louter theorie*, maar ook uittesten van de methodes in de praktijk.
  - Relateren van praktisch werk met theorie is belangrijk.

Werkvormen gedeelte ODEs

- 5 lessen (deze les inbegrepen) – slechts 1 les per 2 weken
  - Elke les begint met vragen/antwoorden over vorige les - 30’
  - Interactief/discussie – ook potentiële examenvragen!
  - In de les: enkel de grote lijnen (verhaal/samenhang) – 1,5h
- 4 oefenzittingen in de tussenweken – zelf gegeven!
- Vaag onderscheid tussen oefenzittingen en lessen
- <u>Voor thuis</u>: bijkomend materiaal (integraal bij de leerstof)
  - <u>Videomateriaal</u> (kennisclips) met bewijzen/afleidingen
  - <u>Implementatie</u> van alle methodes/figuren in het boek

Concrete lesdata

- 28/09 – les 1 – Inleiding, voorwaartse Eulermethode
- 05/10 – les 2 – Lineaire multistapmethodes
- 19/10 – les 3 – Runge-Kuttamethodes
- 26/10 – oef.zit. 1 – Convergentie van methodes
- 09/11 – les 4 – Stijve differentiaalvergelijkingen
- 16/11 – oef.zit. 2 – Stijve problemen
- 23/11 – les 5 – Geometrische integratie
- 30/11 – oef.zit. 3 – Geometrische integratie

Cursusmateriaal

- **Cursustekst** (gedeelte gewone differentiaalvergelijkingen)
  - Hoofdstukken uit boek: Iserles, *A first course in the numerical analysis of differential equations (2nd ed.)*, Cambridge
  - Teksten worden verspreid via Toledo
- **Videomateriaal** (kennisclips)
  - Bevatten bewijzen van belangrijkste stellingen
  - Gemaakt met LiveScribe smartpen (zo meteen demonstratie)
- **Software-implementatie** van methodes en testen
  - Code is geschreven in Python (Installeer “Anaconda”)
  - Objectgericht en modulair opgesteld

Evaluatie

- Examen (16 punten)
  - Aparte ondervraging voor beide onderdelen
  - Vragen ODE-gedeelte mikken op kennis, inzicht en verbanden
  - Vragen PDE-gedeelte zijn vrij theoretisch
  - Voorbeelden van examenvragen komen in de les en op Toledo

- Practica voor gedeelte PDEs (4 punten)

Gewone differentiaalvergelijkingen

- Beginwaardeprobleem:

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y}), \qquad t \geq t_0, \qquad \boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0$$

- Oplossing geeft aan hoe functie $\boldsymbol{y}(t)$ evolueert vanuit beginvoorwaarde $\boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0$ (Figuur op bord.)

- Functie $\boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y})$ moet voldoende 'braaf' zijn
  - Lipschitz continu eigenlijk voldoende

$$\|\boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{x}) - \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y})\| \leq \lambda \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|, \quad \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d, \quad t \geq t_0$$

  - Analytisch (oneindig veel continue afgeleiden) vaak handiger

De voorwaartse Eulermethode (1)

- Beginwaardeprobleem:

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y}), \qquad t \geq t_0, \qquad \boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0$$

- We zoeken een benaderende oplossing op tijdstip $t > t_0$
- Integreer linker- en rechterlid
- Benader dan de integraal via *het enige punt* waar we de integrand kennen, met name $\tau = t_0$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}(t) &= \boldsymbol{y}(t_0) + \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{f}(\tau, \boldsymbol{y}(\tau))d\tau \\ &\approx \boldsymbol{y}(t_0) + (t - t_0)\boldsymbol{f}(t_0, \boldsymbol{y}(t_0))\end{aligned}$$

De voorwaartse Eulermethode (2)

$$\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{y}(t_0) + \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{f}(\tau, \boldsymbol{y}(\tau))d\tau$$
$$\approx \boldsymbol{y}(t_0) + (t - t_0)\boldsymbol{f}(t_0, \boldsymbol{y}(t_0))$$

- Deze benadering leidt tot een recursiebetrekking voor

$$\boldsymbol{y}_n \approx \boldsymbol{y}(t_n), \qquad t_n = t_0 + n\,h$$

- We noemen h de <u>tijdstap</u>

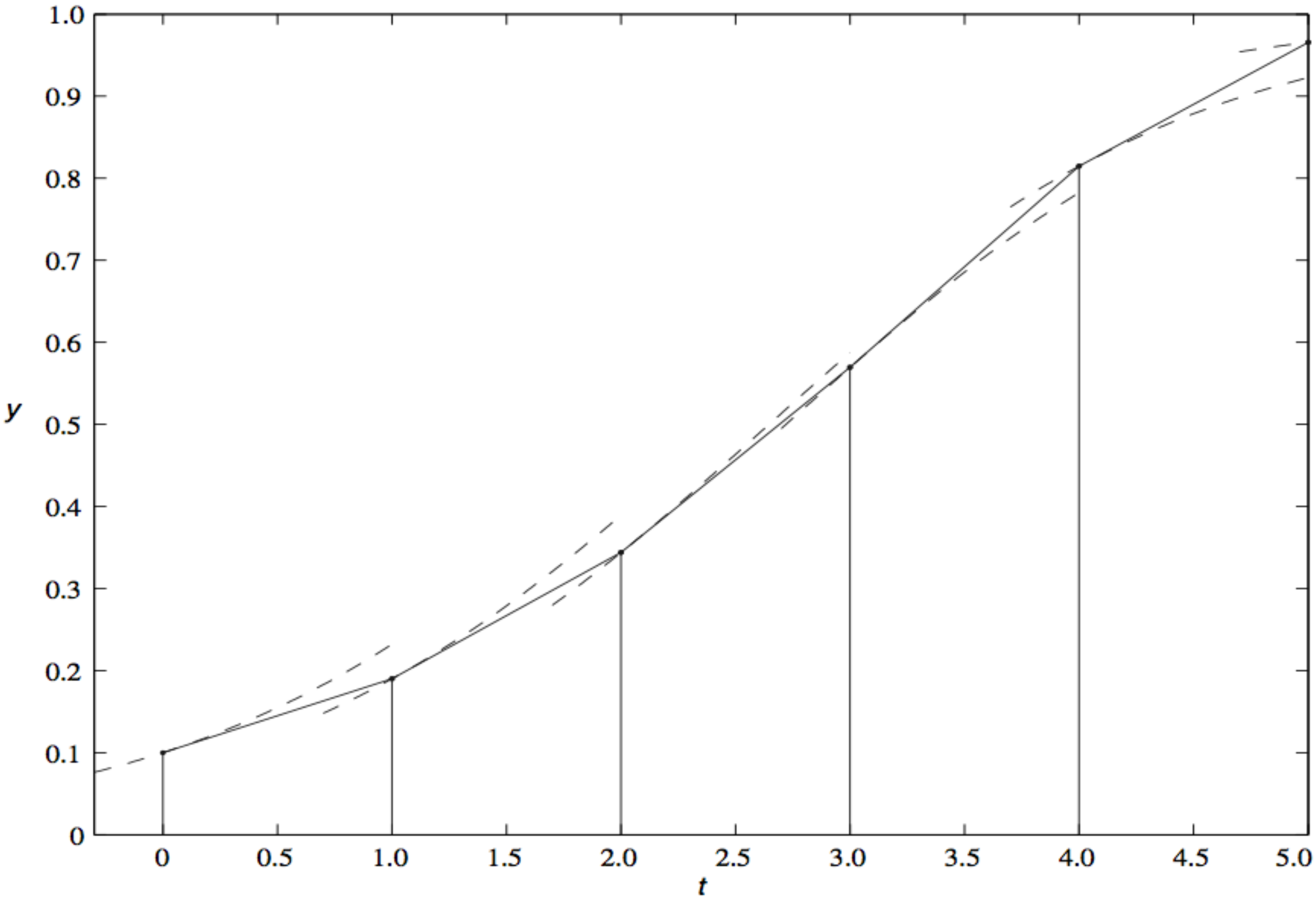
- De voorwaartse Eulermethode is dan

$$\boxed{\boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n + h\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}_n),} \qquad n = 0, 1, \ldots$$

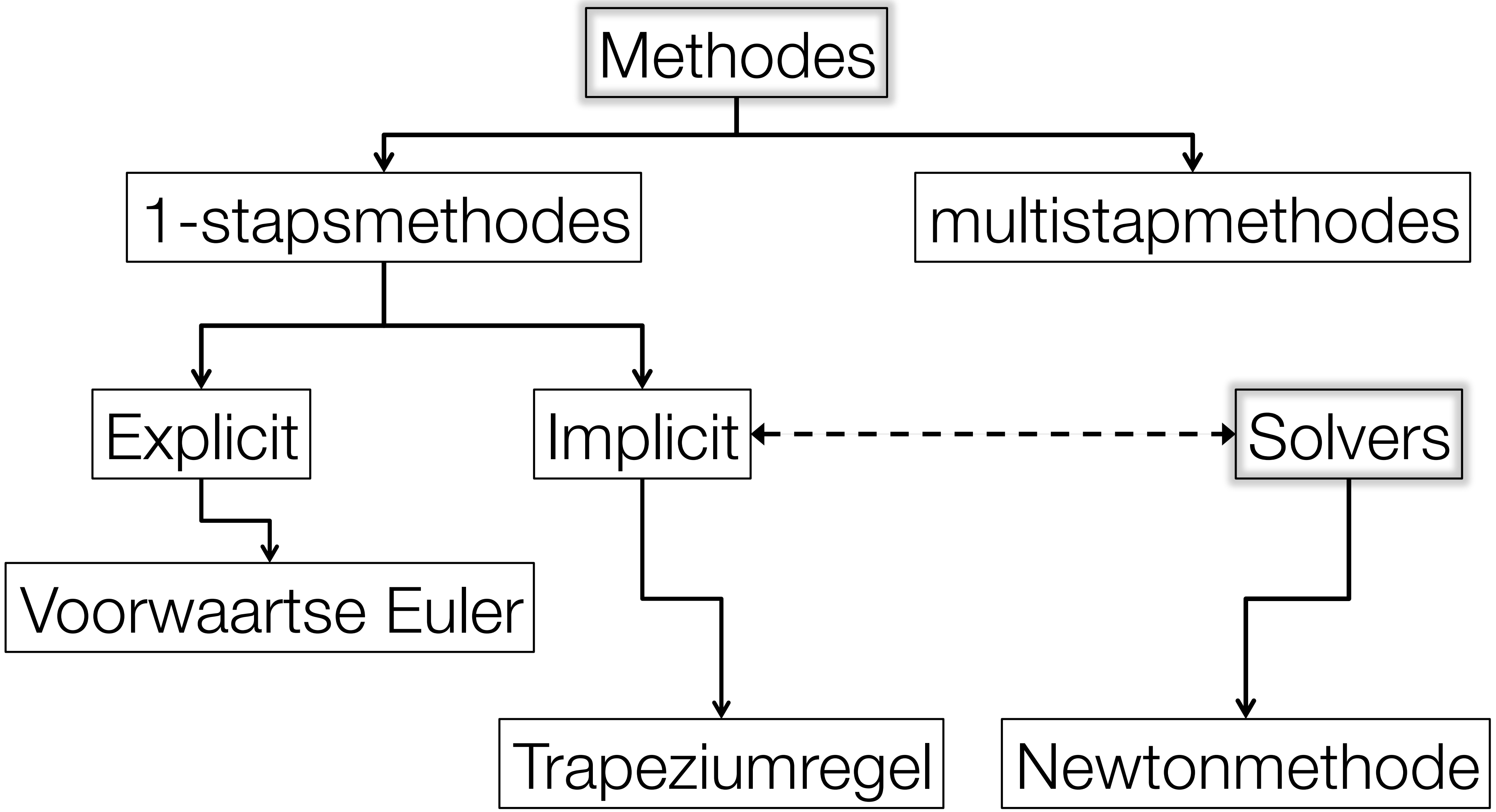
- Alles wat volgt, is een veralgemening van dit principe !

Numeriek voorbeeld

$$y' = y(1-y) \qquad t \geq t_0, \qquad y(0) = 1/10, \qquad h = 1$$



Software: structuur



Convergentie van voorwaartse Euler

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n + h\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}_n), \qquad n = 0, 1, \ldots$$

- Hoe goed is de voorwaartse Eulermethode ?
- Eigenschap 1 : Een methode is convergent als

$$\lim_{h \to 0+} \max_{n=0,1,\ldots,\lfloor t^*/h \rfloor} \|\boldsymbol{y}_{n,h} - y(t_n)\| = 0.$$

- Dit is niet zomaar een gewenste eigenschap, ze is absoluut noodzakelijk (en niet triviaal !)
- Stelling : De methode van Euler is convergent.
- Foutenschatter zeer pessimistisch

$$\|\boldsymbol{e}_{n,h}\| \leq \frac{c}{\lambda}(e^{t^*\lambda} - 1)\ h$$

Kennisclip (bewijs van convergentie)

- Kennisclip is een “Pencast PDF”
- PDF-bestanden staan op Toledo
- PDF openen en bekijken
  - Op computer: Echo Desktop: http://www.livescribe.com/en-us/support/echo/setup/
  - Op iOS: LiveScribe+ app
  - Op de website van LiveScribe: www.livescribe.com/player

Lokale fout en definitie van orde

- Herschrijf numeriek schema

$$\boldsymbol{y}_{n+1} - [\boldsymbol{y}_n + h\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}_n)] = 0$$

- Vul exacte oplossing in… de restterm heet de lokale fout

$$\boldsymbol{y}(t_{n+1}) - [\boldsymbol{y}(t_n) + h\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}(t_n))] = \mathcal{O}(h^2)$$

- Algemene tijdsdiscretisatie …

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \mathcal{Y}_n(\boldsymbol{f}, h, \boldsymbol{y}_0, \ldots, \boldsymbol{y}_n), \qquad n = 0, 1, \ldots$$

- is van van orde p als

$$\boldsymbol{y}(t_{n+1}) - \mathcal{Y}_n(\boldsymbol{f}, h, \boldsymbol{y}(t_0), \ldots, \boldsymbol{y}(t_n)) = \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

- Voorwaartse Euler is een methode van orde 1

Lokale versus globale fout

- Lokale fout is de fout in een enkele tijdstap.
- Fouten accumuleren zich over een groot aantal tijdstappen.
- We kijken naar een vast tijdstip $t^* = n\,h$ voor $h \to 0+$
- Dan is het aantal tijdstappen gegeven als

$$n = \lfloor t^*/h \rfloor$$

- We maken dus $n = \lfloor t^*/h \rfloor$ keer een fout van grootte $\mathcal{O}(h^{p+1})$
- De geaccumuleerde globale fout is dan

$$\mathcal{O}(h^p)$$

- Let op: de methode moet convergent zijn! (Zie verder)

Op naar hogere orde: trapeziumregel

- Laat ons opnieuw beginnen van de integraalformulering

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}(t) &= \boldsymbol{y}(t_n) + \int_{t_n}^{t} \boldsymbol{f}(\tau, \boldsymbol{y}(\tau))d\tau \\ &\approx \boldsymbol{y}(t_n) + \frac{1}{2}(t - t_n)\left[\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}(t_n)) + \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y}(t))\right]\end{aligned}$$

- Hieruit volgt de trapeziumregel

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n + \frac{1}{2}h\left[\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}_n) + \boldsymbol{f}(t_{n+1}, \boldsymbol{y}_{n+1})\right]$$

- Deze methode is impliciet. Er moet een niet-lineair stelsel opgelost worden in elke tijdstap.

Orde en convergentie van de trapeziumregel

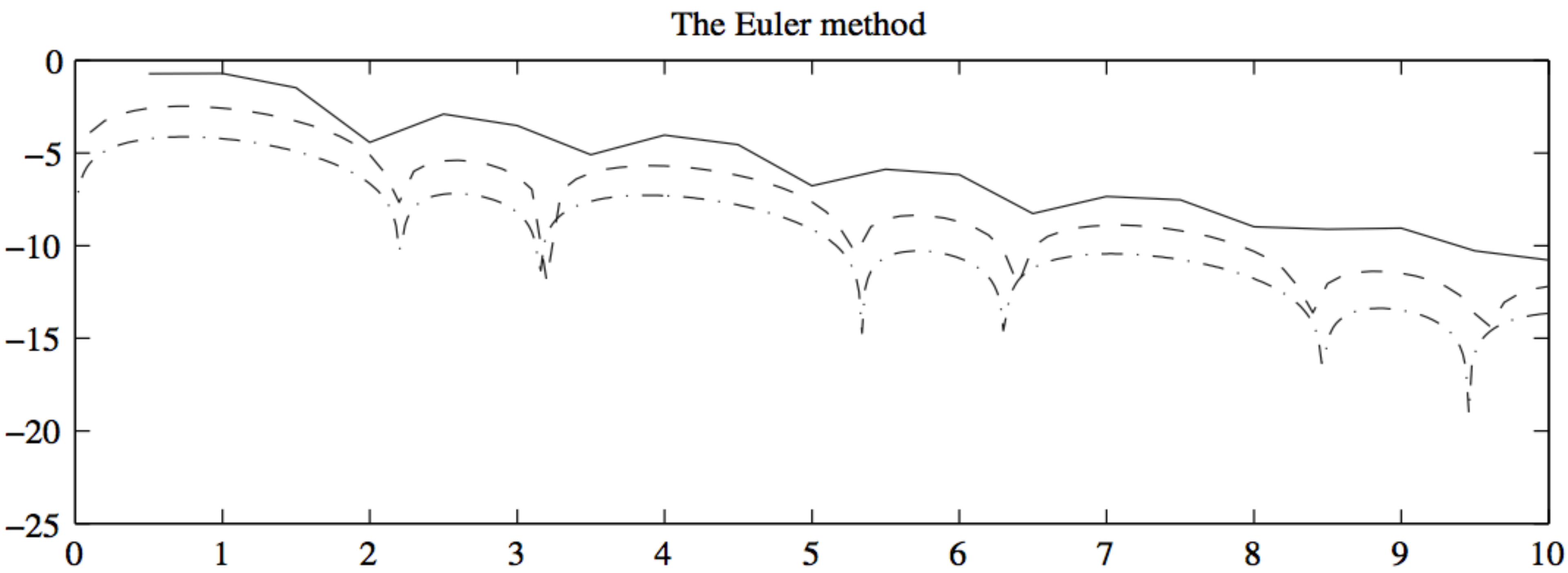
- Stelling: De trapeziumregel is van orde 2.

- Stelling: De trapeziumregel is convergent.

Numeriek voorbeeld: Euler

$$y' = -y + 2e^{-t}\cos(2t), \qquad y(0) = 0$$

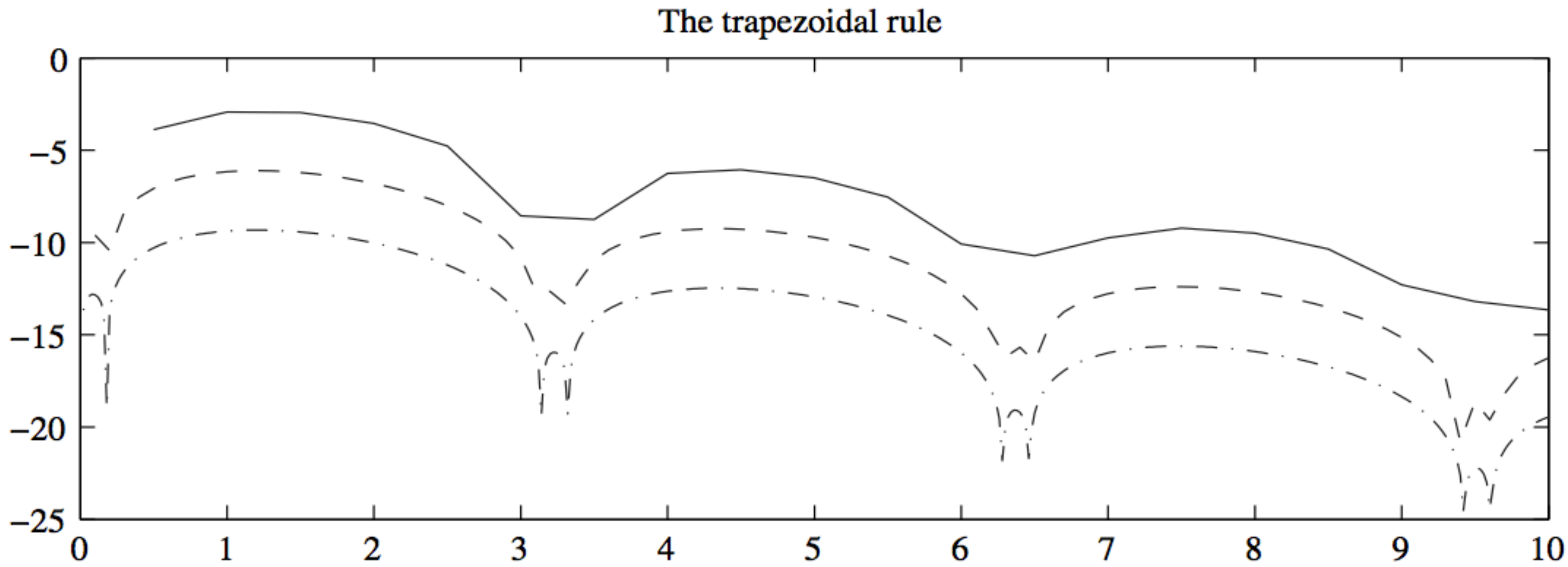
$$h = 1/2, \qquad h = 1/10, \qquad h = 1/50$$



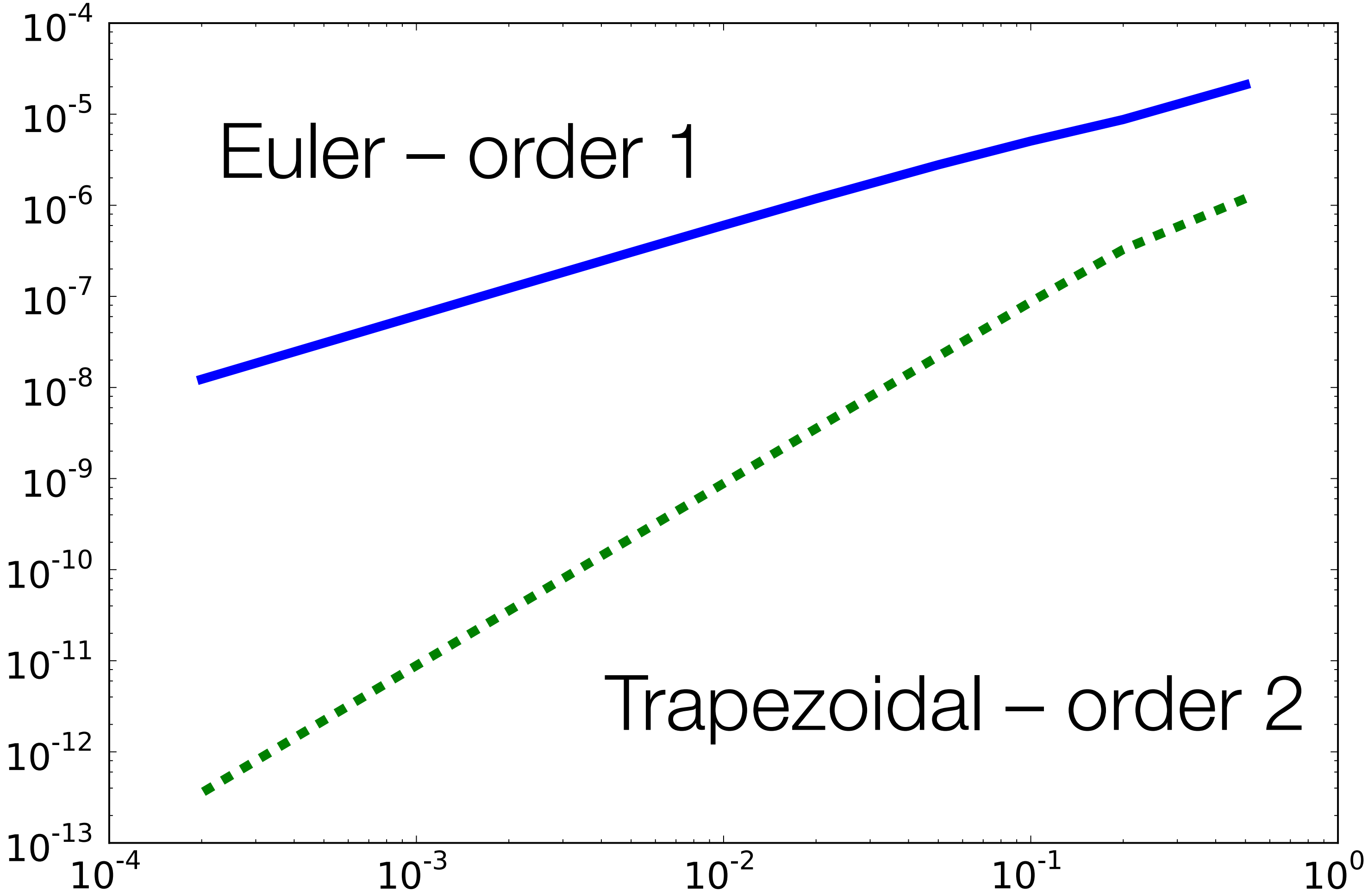
Numeriek voorbeeld: Trapeziumregel

$$y' = -y + 2e^{-t}\cos(2t), \qquad y(0) = 0$$

$$h = 1/2, \qquad h = 1/10, \qquad h = 1/50$$



Orde van voorwaartse Euler en trapeziumregel



Een veralgemening: de theta-methode

- Een algemenere formule waar de vorige twee onder vallen

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n + h\left[\theta \boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}_n) + (1-\theta)\boldsymbol{f}(t_{n+1}, \boldsymbol{y}_{n+1})\right]$$

- Convergent voor alle $\theta \in [0, 1]$

- Speciale gevallen:
  - Voorwaartse Euler: $\theta = 0$
  - Trapeziumregel: $\theta = 1/2$
  - Achterwaartse Euler (wordt belangrijk in les 4) $\theta = 1$

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n + h\boldsymbol{f}(t_{n+1}, \boldsymbol{y}_{n+1})$$

Lokale fout van de theta-methode

- Gelijkaardige Taylorreeksontwikkeling als voordien geeft

$$\boldsymbol{y}(t_{n+1}) - \boldsymbol{y}(t_n) - h\left[\theta \boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}(t_n)) + (1-\theta)\boldsymbol{f}(t_{n+1}, \boldsymbol{y}(t_{n+1}))\right]$$
$$= \left(\theta - \frac{1}{2}\right) h^2 \boldsymbol{y}''(t_n) + \left(\frac{1}{2}\theta - \frac{1}{3}\right) h^3 \boldsymbol{y}'''(t_n) + \mathcal{O}(h^4).$$

- Van orde 2 voor $\theta = 1/2$, anders van orde 1

- (Heel) soms kan het van belang zijn om hogere-orde termen te vernietigen door de keuze van θ

Concrete lesdata

- 28/09 – les 1 – Inleiding, voorwaartse Eulermethode
- 05/10 – les 2 – Lineaire multistapmethodes
- 19/10 – les 3 – Runge-Kuttamethodes
- 26/10 – oef.zit. 1 – Convergentie van methodes
- 09/11 – les 4 – Stijve differentiaalvergelijkingen
- 16/11 – oef.zit. 2 – Stijve problemen
- 23/11 – les 5 – Geometrische integratie
- 30/11 – oef.zit. 3 – Geometrische integratie

Voorbeelden van vragen voor jullie…

- Wat betekent de orde van een methode precies ?
- Wat is de lokale/globale fout? Wat is het verband met de orde ?
- Waarom wil je een methode van hogere orde, en wat staat daar tegenover als kost ?
- Waarom is de trapeziumregel van orde 2, en Euler van orde 1 ?
- Hoe ga je de orde van een methode numeriek na ?
- Waarom geeft een bewijs van convergentie geen goede foutenschatter ?