

Numerieke simulatie van differentiaalvergelijkingen

Giovanni Samaey

Les 2

Lineaire multistapmethodes (H2)
Foutenschatting (H6)

Recap: De voorwaartse Eulermethode

- Beginwaardeprobleem:

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad t \geq t_0, \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$$

- We zoeken een benaderende oplossing op tijdstip $t > t_0$

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

- Voorwaartse Euler berekent die benadering als

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

- Vaststelling:

- \mathbf{y}_{n-1} wordt weggegooid !

- Methode is van orde 1: $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}(t_n) + \mathcal{O}(h)$

De methode van Adams-Bashforth (1)

- Veronderstel gegeven (tekening op bord!)

$$\mathbf{y}_m = \mathbf{y}(t_m) + O(h^{s+1}), \quad m = 0, 1, \dots, n+s-1$$

- We zoeken een benaderende oplossing op tijdstip t_{n+s}

$$\begin{aligned}\mathbf{y}(t_{n+s}) &= \mathbf{y}(t_{n+s-1}) + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} \mathbf{y}'(\tau) d\tau \\ &= \mathbf{y}(t_{n+s-1}) + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} \mathbf{f}(\tau, \mathbf{y}(\tau)) d\tau\end{aligned}$$

- Benader $\mathbf{f}(\tau, \mathbf{y}(\tau))$ voor $\tau \in [t_{n+s-1}, t_{n+s}]$ door een interpolerende veelterm op basis van

$$\mathbf{y}_{n+m}, \quad m = 0, 1, \dots, s-1$$

De methode van Adams-Bashforth (2)

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_{n+s}) &= \mathbf{y}(t_{n+s-1}) + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} \mathbf{f}(\tau, \mathbf{y}(\tau)) d\tau \\ &\approx \mathbf{y}(t_{n+s-1}) + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} \mathbf{p}(\tau) d\tau \end{aligned}$$

- Interpolerende veelterm

$$\mathbf{p}(t) = \sum_{m=0}^{s-1} p_m(t) \mathbf{f}(t_{n+m}, \mathbf{y}_{n+m})$$

- Met

$$p_m(t) = \prod_{l=0, l \neq m}^{s-1} \frac{t - t_{n+l}}{t_{n+m} - t_{n+l}}$$

Uitwerking:
kennisclip

$$= \frac{(-1)^{s-1-m}}{m!(s-1-m)!} \prod_{l=0, l \neq m}^{s-1} \left(\frac{t - t_n}{h} - l \right)$$

De methode van Adams-Bashforth (3)

$$\begin{aligned}\mathbf{y}(t_{n+s}) &\approx \mathbf{y}(t_{n+s-1}) + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} \mathbf{p}(\tau) d\tau \\ \mathbf{y}_{n+s} &= \mathbf{y}_{n+s-1} + \sum_{m=0}^{s-1} \left[\int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} p_m(\tau) d\tau \right] \mathbf{f}(t_{n+m}, \mathbf{y}_{n+m}) \\ &= \mathbf{y}_{n+s-1} + h \sum_{m=0}^{s-1} b_m \mathbf{f}(t_{n+m}, \mathbf{y}_{n+m})\end{aligned}$$

with

$$b_m = h^{-1} \int_0^h p_m(t_{n+s-1} + \tau) d\tau$$

Voorbeelden (kennisclips): voorwaartse Euler, tweede orde

Nauwkeurigheid van interpolerende veelterm

- Interpolatorende veelterm

$$\mathbf{p}(t) = \sum_{m=0}^{s-1} p_m(t) \mathbf{f}(t_{n+m}, \mathbf{y}_{n+m})$$

- Indien

$$\mathbf{y}_m = \mathbf{y}(t_m) + O(h^{s+1}), \quad m = 0, 1, \dots, n+s-1$$

- Dan is een interpolerende veelterm voor de afgeleide

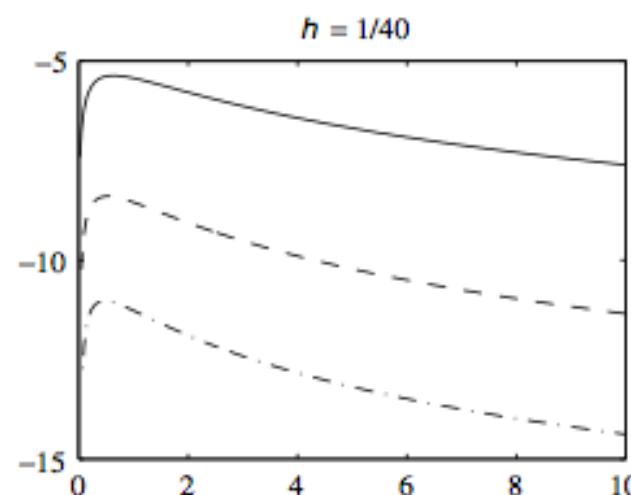
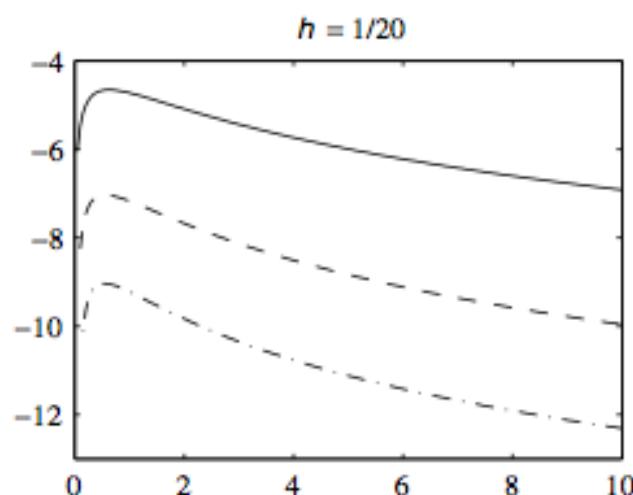
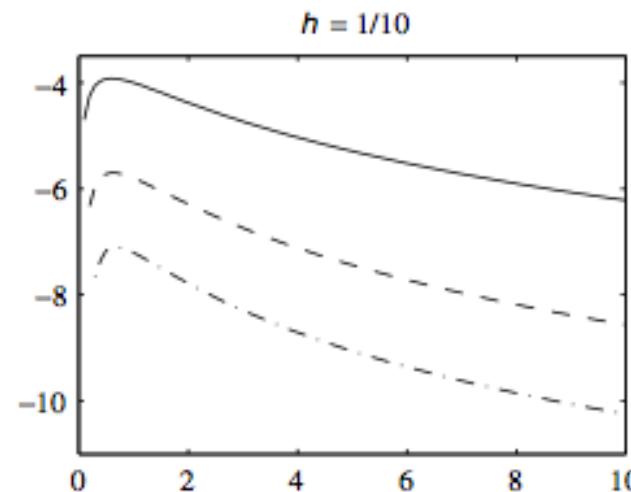
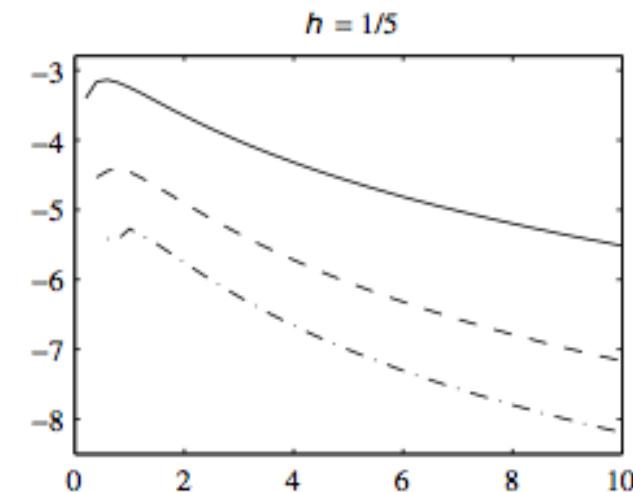
$$\mathbf{p}'(t) = \mathbf{y}'(t) + \mathcal{O}(h^s)$$

- Bij tijdsintegratie over een interval van lengte h verwachten we een lokale fout van $\mathcal{O}(h^{s+1})$, en dus een orde

$$p = s$$

Numerieke illustratie

$$y' = -y^2, \quad y(0) = 1$$



- FE
- AB2
- AB3
- Betere figuur mogelijk?

Lineaire multistapmethodes: definitie

- Algemene formule

$$\sum_{m=0}^s a_m \mathbf{y}_{n+m} = h \sum_{m=0}^s b_m \mathbf{f}(t_{n+m}, \mathbf{y}_{n+m})$$

- Implicit/expliciet; conventie: $a_s = 1$
- Twee belangrijke veeltermen

$$\rho(w) := \sum_{m=0}^s a_m w^m \quad \sigma(w) := \sum_{m=0}^s b_m w^m$$

Lineaire multistapmethodes: orde (1)

- Definitie: Orde is p als en slechts als de lokale fout

$$\begin{aligned}\psi(t, \mathbf{y}) &:= \sum_{m=0}^s a_m \mathbf{y}(t + mh) - h \sum_{m=0}^s b_m \mathbf{y}'(t + mh) \\ &= \mathcal{O}(h^{p+1})\end{aligned}$$

- Stelling: Een multistapmethode is van orde p iff

$$\rho(w) - \sigma(w) \ln(w) = c(w - 1)^{p+1} + \mathcal{O}(|w - 1|^{p+2})$$

- Bewijs enkel overlopen. Tussenresultaat: ordecondities

$$\sum_{m=0}^s a_m = 0, \quad \sum_{m=0}^s m^k a_m = k \sum_{m=0}^s m^{k-1} b_m, \quad k = 1, \dots, p$$

$$\sum_{m=0}^s m^{p+1} a_m \neq (p+1) \sum_{m=0}^s m^p b_m$$

Uitwerking:
kennisclip

Lineaire multistapmethodes: orde (2)

- Een methode is van orde p als en slechts als ze exact is voor veeltermen van t.e.m. graad p
- Orde afleiden voor de daarnet gegeven methode van tweede orde (zie kennisclip).

Orde is niet genoeg voor multistapmethodes !

- Beschouw een 2-de orde methode

$$\mathbf{y}_{n+2} - 3\mathbf{y}_{n+1} + 2\mathbf{y}_n = h \left[\frac{13}{12} \mathbf{f}(t_{n+2}, \mathbf{y}_{n+2}) - \frac{5}{3} \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}) - \frac{5}{12} \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) \right]$$

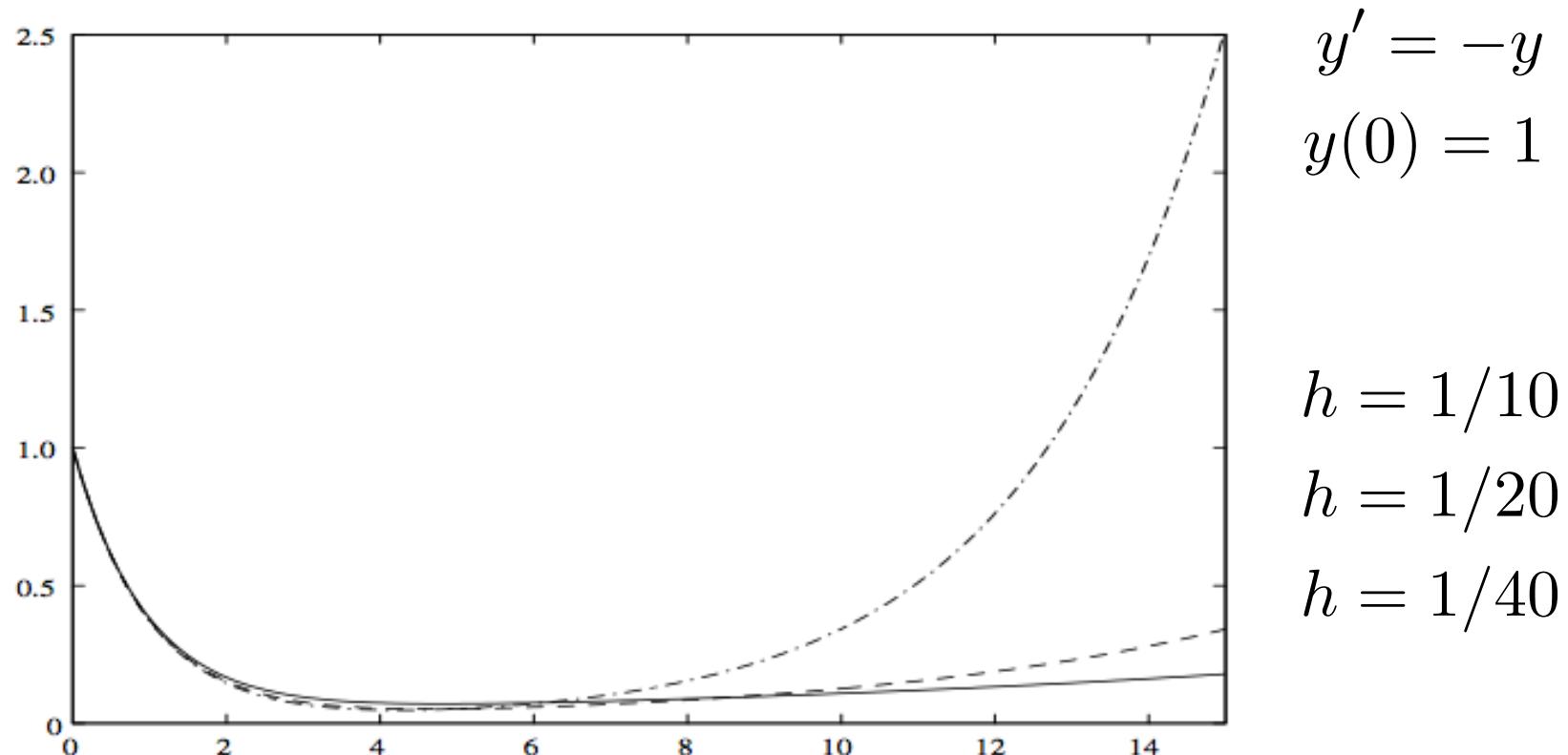
- Los hiermee op $y' = 0, \quad y(0) = 1$
- Enkele stap $y_{n+2} - 3y_{n+1} + 2y_n = 0$
- Algemene oplossing $y_n = c_1 + c_2 2^n$
- Als $c_2 \neq 0$, bv. door afrondingsfouten, dan gaat

$$\lim_{h \rightarrow 0, nh=t} y_n \rightarrow \infty$$

Nog een niet-convergente methode

- Kies methode aan de hand van veeltermen

$$\rho(w) = w^2 - 2.01w + 1.01, \quad \sigma(w) = 0.995w - 1.005$$



Convergentie van lineaire multistapmethodes

Theorem 2.2 (The Dahlquist equivalence theorem) *Suppose that the error in the starting values y_1, y_2, \dots, y_{s-1} tends to zero as $h \rightarrow 0+$. The multistep method (2.8) is convergent if and only if it is of order $p \geq 1$ and the polynomial ρ obeys the root condition.* ■

- Niet enkel idiote, gefabriceerde voorbeelden falen !
- Methodes van maximale orde $2s$ falen voor $s \geq 3$
- Maximale orde van convergente methode (eerste barrière van Dahlquist):
 - Implicit : $2\lfloor(s+2)/2\rfloor$, in praktijk kiest men $s+1$
 - Explicit : s
- Adams-Bashforth methodes zijn OK: $\rho(w) = w^{s-1}(w-1)$

Constructie van lineaire multistapmethodes

- Kies eerst $\rho(w)$ van graad s
 - Moet voldoen aan ‘root condition’
 - Moet voldoen aan $\rho(1) = 0 \quad \left(\sum_{m=0}^s a_m = 0 \right)$
- Bereken dan $\sigma(w) = \frac{\rho(w)}{\ln w} + \mathcal{O}(|w - 1|^p)$
 - Delen door logaritme vermindert macht in restterm met eenntje
 - Taylorexpansie van logaritme.
- Voorbeelden overlopen (Adams-Bashforth/Adams-Moulton)

Achterwaartse differentiatieformules (BDF) (1)

- Een methode is een BDF-methode als en slechts als

$$\sigma(w) = \beta w^s, \quad \text{for some } \beta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$$

- Dit betekent dat ze eruit ziet als

$$\sum_{m=0}^s a_m \mathbf{y}_{n+m} = h\beta \mathbf{f}(t_{n+s}, \mathbf{y}_{n+s})$$

- We kunnen bewijzen dat (NIET overlopen)

$$\beta = \left(\sum_{m=1}^s \frac{1}{m} \right)^{-1} \quad \rho(w) = \beta \sum_{m=1}^s \frac{1}{m} w^{s-m} (w-1)^m$$

Achterwaartse differentiatieformules (BDF) (2)

- Voorbeelden, zie boek
- We kunnen convergentie van BDF-methodes niet garanderen (waarom niet?)
- BDF-formules zijn convergent voor $s \leq 6$
- Alternatieve methode om BDF-formules af te leiden
 - Gebruik punten \mathbf{y}_{n+m} , $m = 0, \dots, s$
 - Construeer interpolerende veelterm $P(t)$ voor $\mathbf{y}(t)$
 - Eis dat $P'(t_{n+s}) = f(t_{n+s}, \mathbf{y}_{n+s})$

Waarom/wanneer BDF-formules? (1)

- Lagere orde dan zou kunnen (s i.p.v. $s + 1$)
- Wel betere stabiliteitseigenschappen (zie hoofdstuk 4)
- Beschouw een **stijve** lineaire differentiaalvergelijking (zie later in H4!)

$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} -20 & 10 & 0 & \cdots & 0 \\ 10 & -20 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -20 & 10 \\ 0 & \cdots & 0 & 10 & -20 \end{bmatrix} \mathbf{y}, \quad \mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Een probleem voor Adams-Bashforth

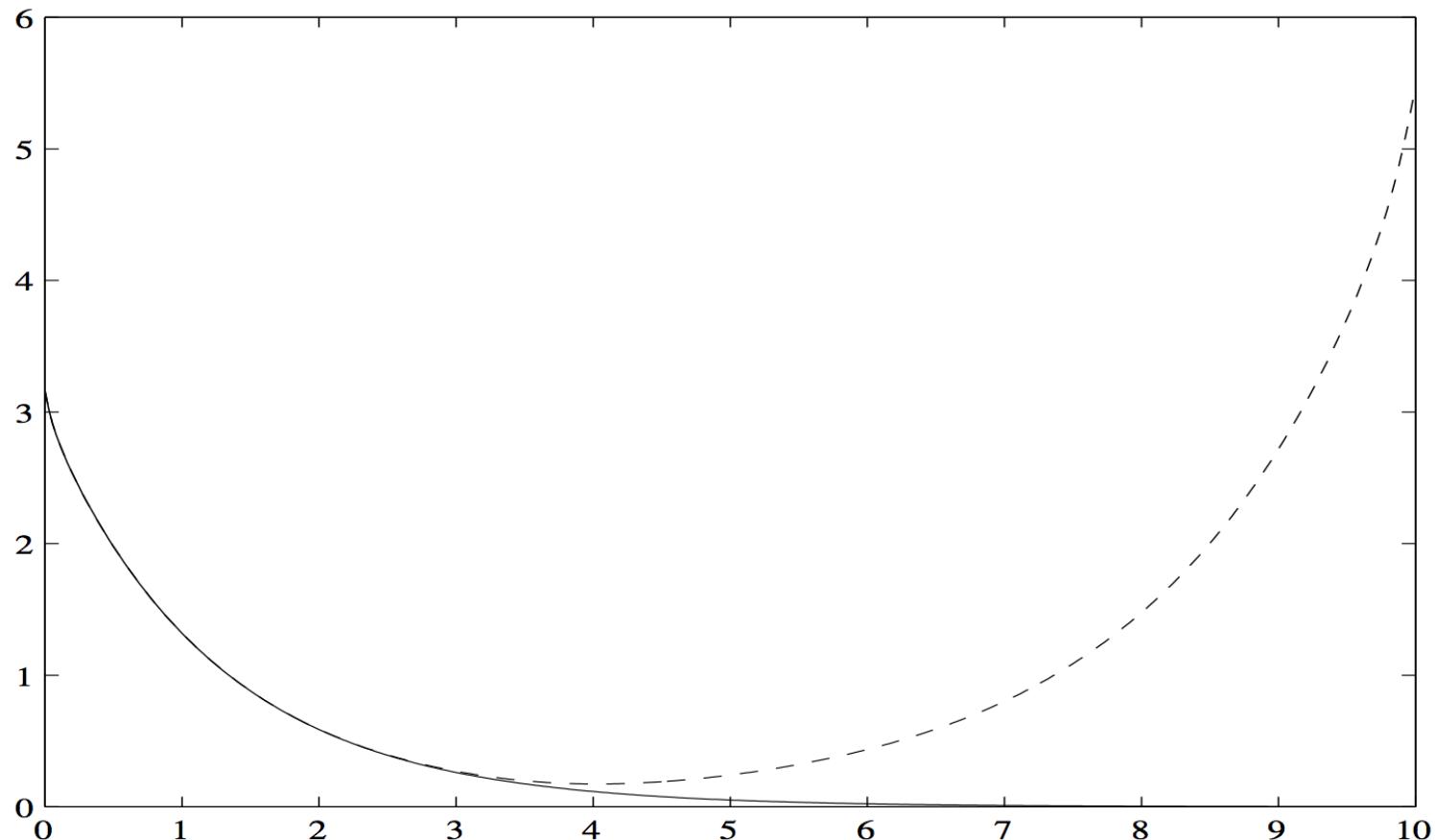
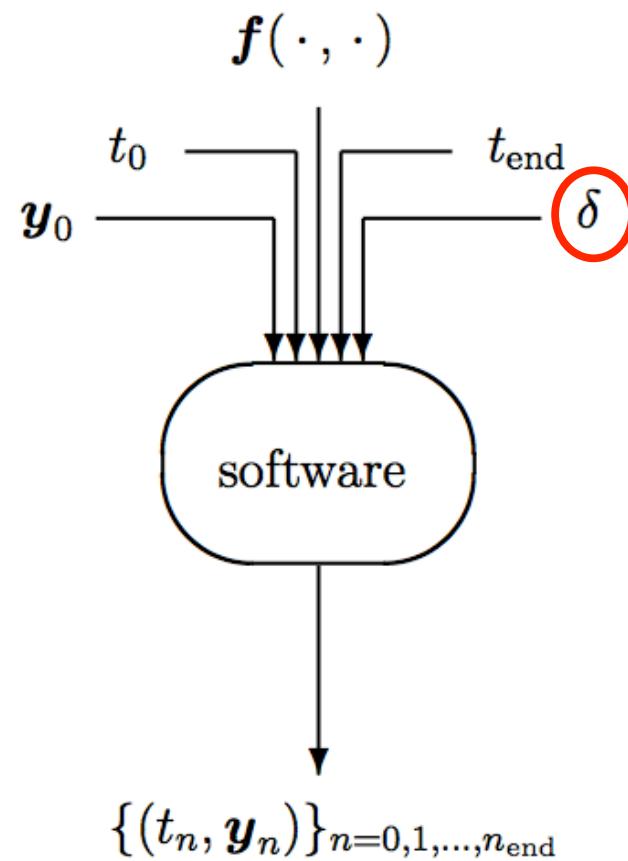


Figure 2.3 The norm of the numerical solution of (2.17) by the Adams–Bashforth method (2.6) for $h = 0.027$ (solid line) and $h = 0.0275$ (broken line).

Numerieke software vs. numerieke wiskunde

- Ook het ontwerp van snelle en nauwkeurige software is een intellectuele (wiskundige) uitdaging.
- Software is meer dan een tijdsdiscretisatie:
 - Foutcontrole, stapgroottecontrole
 - Oplossen van niet-lineaire stelsels
 - Startwaarden en initiële stapgrootte
 - Visualisatie van de oplossing
- De gebruiker wil niet gestoord worden ...

Hoe wil de gebruiker de software hanteren ?



- Eenvoudigste model.
- Naast probleem ook tolerantie opgegeven.
- Software zou ook kunnen vragen of probleem stijf is (zie H4).
- Visualisatie van de oplossing
- Schrijven van dergelijke software is een taak op zich.

Foutenschatting en controle van stapgrootte

- Foutenschatting
 - Lokale foutenschatter – meeste courante software
 - Globale foutenschatter – huidig onderzoek
- Stapgrootte aanpassen op basis van geschatte fout
 - Geschatte fout te groot: halveer de tijdstap
 - Geschatte fout te klein: verdubbel de tijdstap

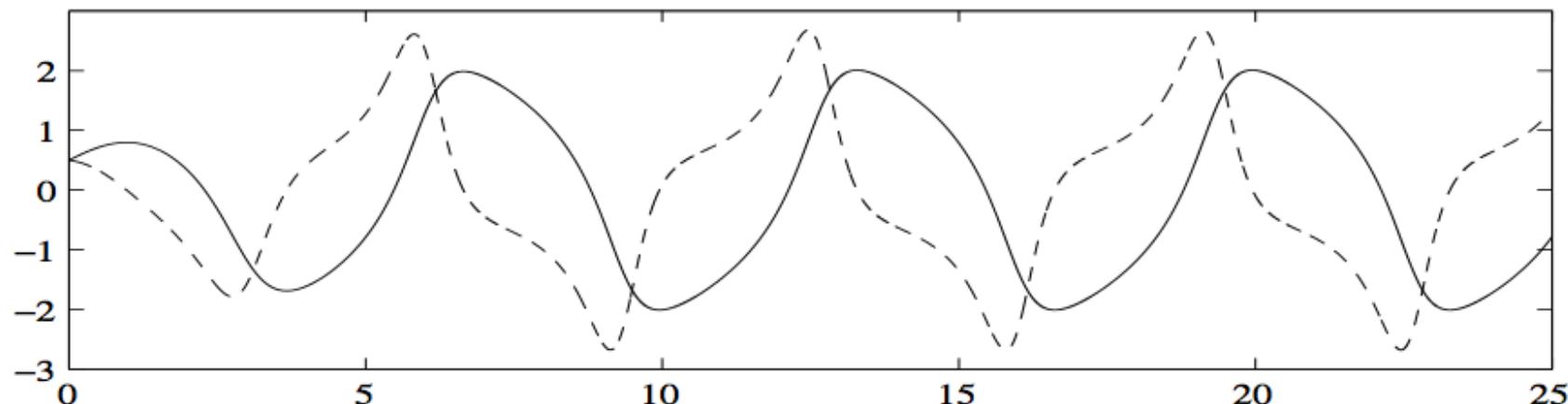
Modelvergelijking 1: van der Pol vergelijking

$$y'' - \epsilon(1 - y^2)y' + y = 0 \quad \epsilon = 1 \quad 0 \leq t \leq 25$$

$$y'_1 = y_2$$

$$y'_2 = (1 - y_1)^2 y_2 - y_1$$

$$y_1(0) = y_2(0) = 1/2$$



Verband met randwaardeproblemen (zie laatste les) en met vak 'Niet-lineaire systemen' (tweede semester).

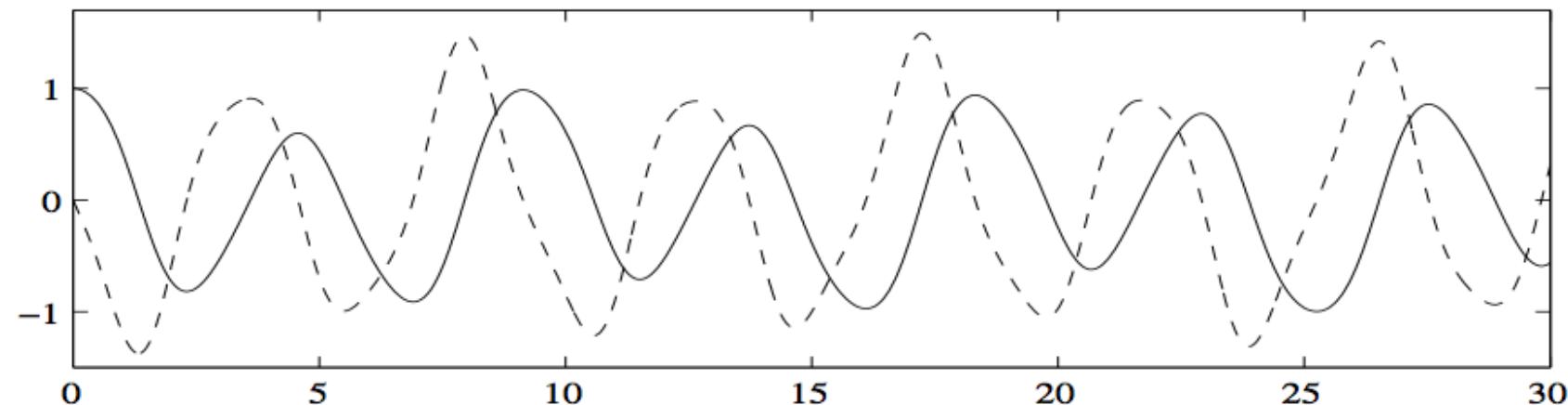
Modelvergelijking 2: Mathieuvergelijking

$$y'' + (a - b \cos 2t)y = 0 \quad a = 2, b = 1 \quad 0 \leq t \leq 30$$

$$y'_1 = y_2$$

$$y'_2 = -(2 - \cos 2t)y_1$$

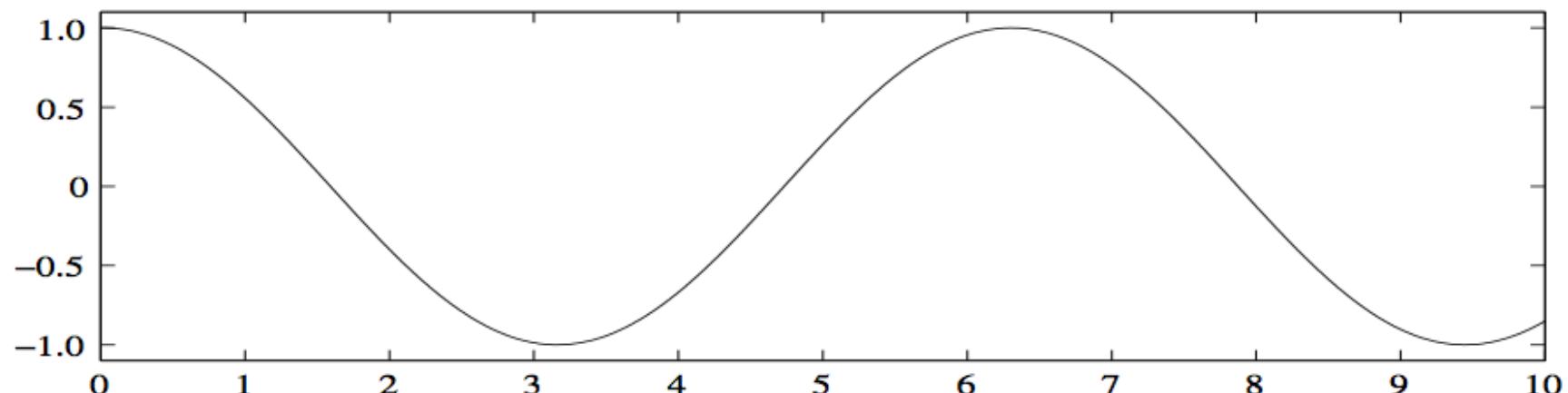
$$y_1(0) = 1, y_2(0) = 0$$



Trillingen van elliptisch membraan/beweging van hemellichamen

Modelvergelijking 3: Curtiss-Hirschfelder

$$y' = -50(y - \cos t) \quad y(0) = 1 \quad 0 \leq t \leq 10$$



$$y(t) = \frac{2500}{2501} \cos t + \frac{50}{2501} \sin t + \frac{1}{2501} \exp(-50t)$$

- Geen fysische betekenis (enkel goede test-case)
- Dit is de enige vergelijking die enigszins stijf is

Foutenschatting bij LMS-methodes

Milne device

- Beschouw een lineaire multistapmethode van orde p

$$\sum_{m=0}^s a_m \mathbf{y}_{n+m} = h \sum_{m=0}^s b_m \mathbf{f}(t_{n+m}, \mathbf{y}_{n+m}), \quad a_s = 1$$

- Alsook een tweede (hulp-) lineaire multistapmethode

$$\sum_{m=q}^s \tilde{a}_m \mathbf{x}_{n+m} = h \sum_{m=0}^s \tilde{b}_m \mathbf{f}(t_{n+m}, \mathbf{x}_{n+m}), \quad \tilde{a}_s = 1$$

- Let op: $q \leq s - 1$, mag ook negatief zijn
- Bemerk dat deze tweede methode slechts een beperkte hoeveelheid meerwerk met zich meebrengt. (Waarom?)

Milne device (2)

- We kiezen $x_{n+m} = y_{n+m}, \quad m \leq s - 1$
- We hebben nu twee uitdrukkingen voor de lokale fout

$$y(t_{n+s}) - y_{n+s} = ch^{p+1} y^{(p+1)}(t_{n+s}) + \mathcal{O}(h^{p+2})$$

$$y(t_{n+s}) - x_{n+s} = \tilde{c}h^{p+1} y^{(p+1)}(t_{n+s}) + \mathcal{O}(h^{p+2})$$

- Wat is onbekend in bovenstaande vergelijkingen ? Wat willen we schatten ?

Milne device (3)

- We hebben nu twee uitdrukkingen voor de lokale fout

$$\mathbf{y}(t_{n+s}) - \mathbf{y}_{n+s} = ch^{p+1} \mathbf{y}^{(p+1)}(t_{n+s}) + \mathcal{O}(h^{p+2})$$

$$\mathbf{y}(t_{n+s}) - \mathbf{x}_{n+s} = \tilde{c}h^{p+1} \mathbf{y}^{(p+1)}(t_{n+s}) + \mathcal{O}(h^{p+2})$$

- Exacte oplossing ongekend, afleiden ook.
- Schat $h^{p+1} \mathbf{y}^{(p+1)}(t_{n+1})$ door vergelijkingen van elkaar af te trekken

$$h^{p+1} \mathbf{y}^{(p+1)}(t_{n+1}) = \frac{1}{c - \tilde{c}} (\mathbf{x}_{n+s} - \mathbf{y}_{n+s})$$

- Dit leidt tot foutenschatter

$$\mathbf{y}(t_{n+s}) - \mathbf{y}_{n+s} \approx \frac{c}{c - \tilde{c}} (\mathbf{x}_{n+s} - \mathbf{y}_{n+s})$$

Implementatie van Milne device (1)

- Vertrek van foutenschatter ...

$$\mathbf{y}(t_{n+s}) - \mathbf{y}_{n+s} \approx \frac{c}{c - \tilde{c}} (\mathbf{x}_{n+s} - \mathbf{y}_{n+s})$$

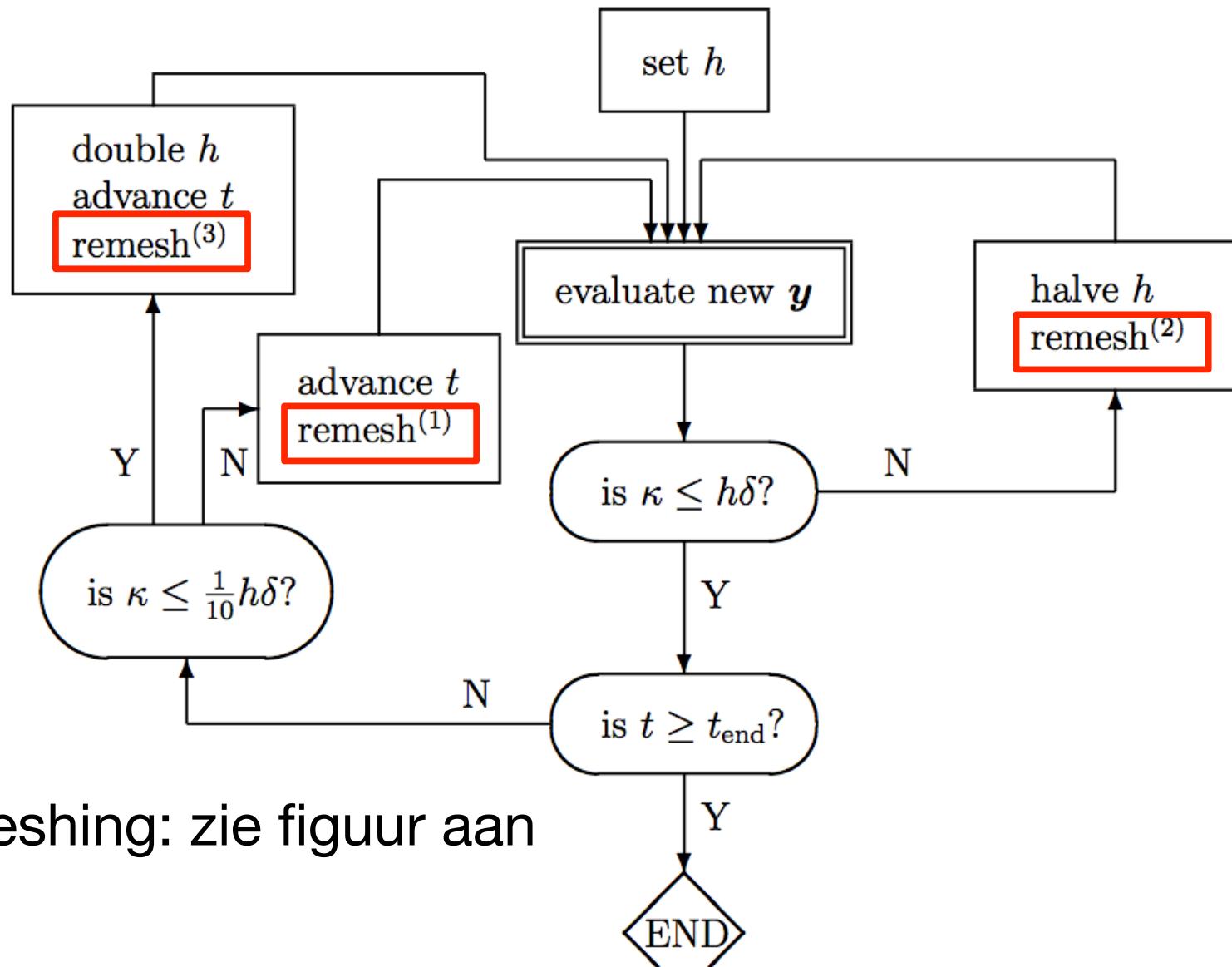
- ... en eis dat

$$\kappa := \left| \frac{c}{c - \tilde{c}} \right| \|\mathbf{x}_{n+s} - \mathbf{y}_{n+s}\| \leq \textcolor{red}{h} \delta$$

(Reden voor evenredigheid met h is accumulatie van fouten)

- Indien niet voldaan, herneem vanuit t_{n+s-1} met gehalveerde stapgrootte

Implementatie van Milne device (2)



Remeshing: zie figuur aan bord

Voorbeeld: TR-AB2 paar

- Basismethode: trapeziumregel

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

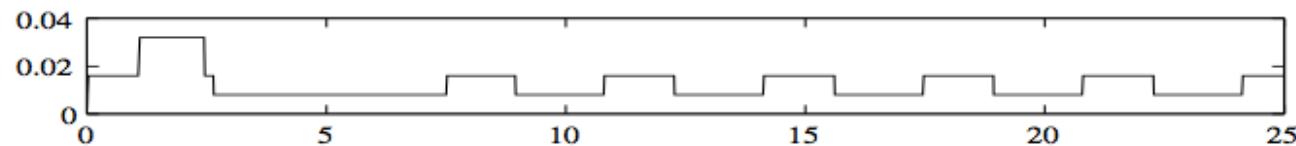
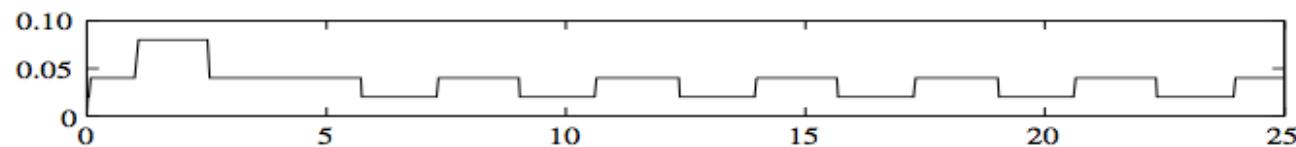
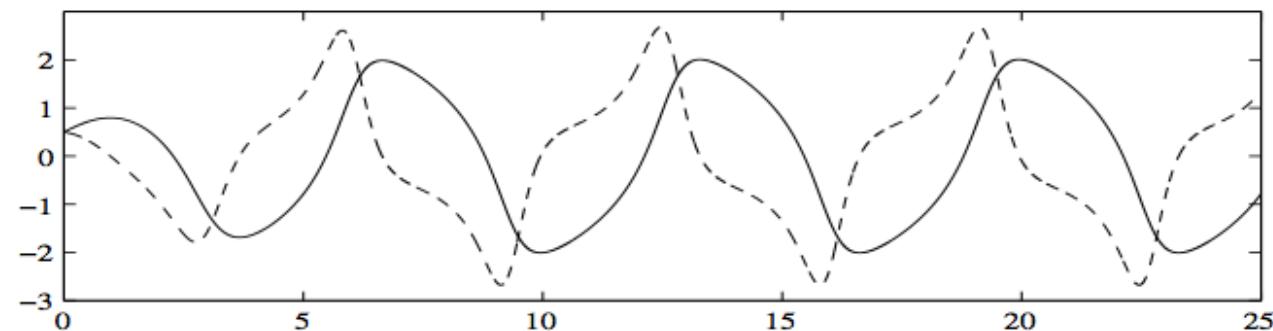
- Foutcontrole via Adams-Bashforthmethode

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \frac{1}{2}h [3\mathbf{f}(t_n, \mathbf{x}_n) - \mathbf{f}(t_{n-1}, \mathbf{x}_{n-1})]$$

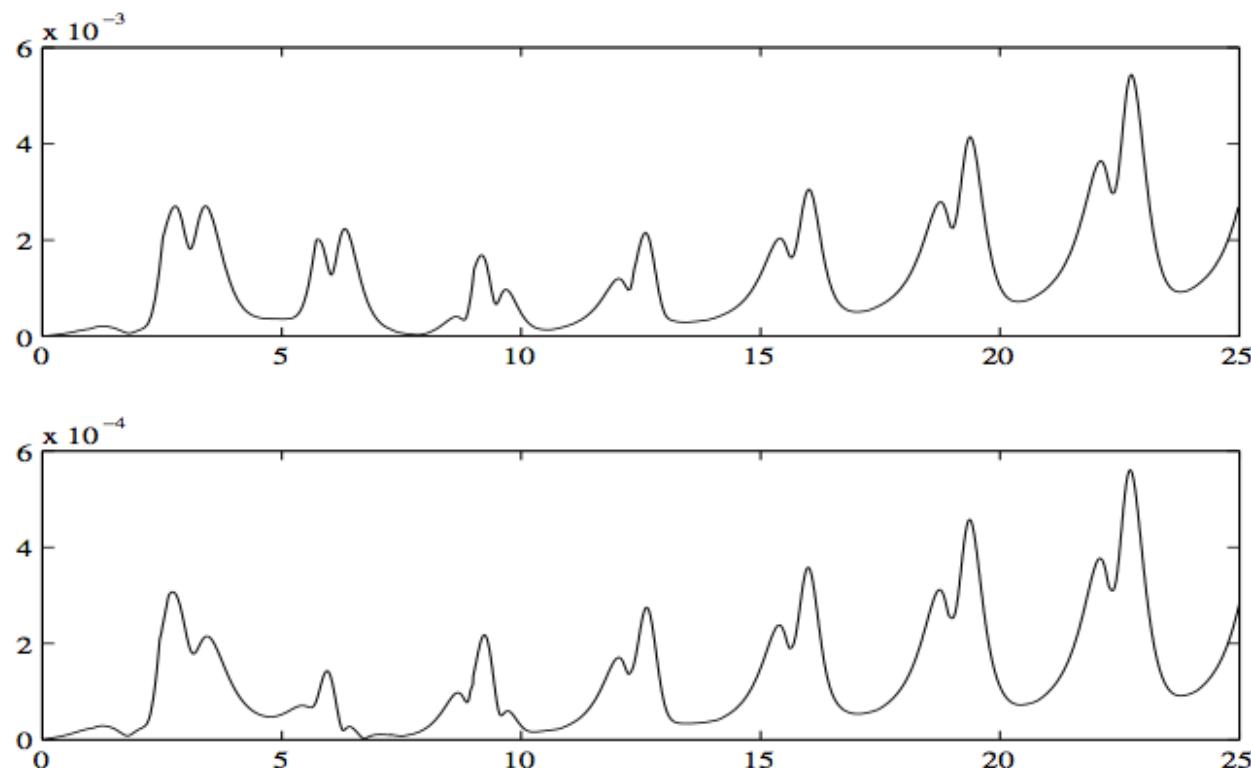
- We hebben $\kappa = \frac{1}{6} \|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}\|$
- Interpolatie bij halvering van de stap

$$\mathbf{w}_1^{new} = \frac{1}{8} (3\mathbf{w}_2 + 6\mathbf{w}_1 - \mathbf{y}_{n-2})$$

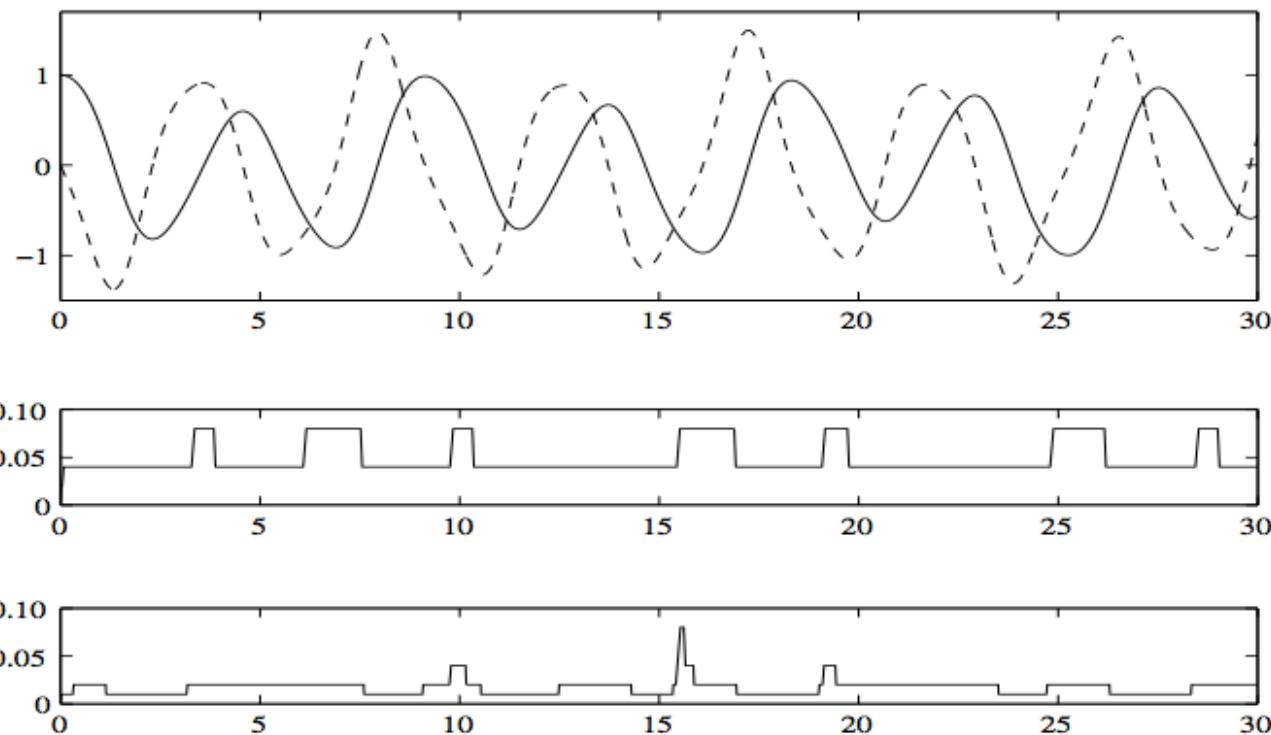
Illustratie: van der Pol vergelijking (1)



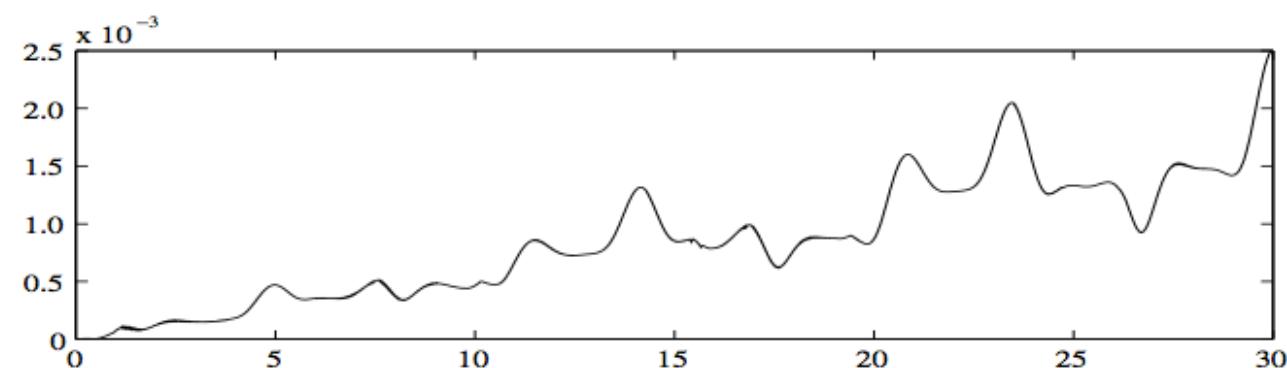
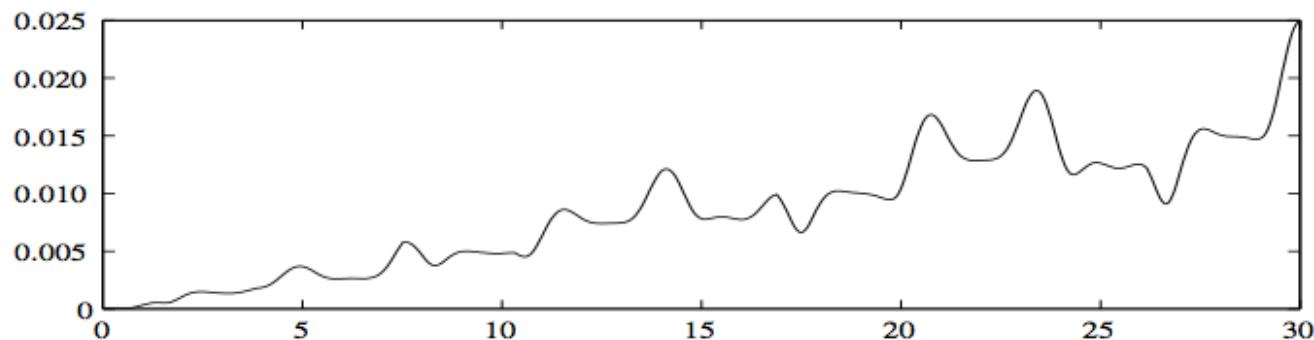
Illustratie: van der Pol vergelijking (2)



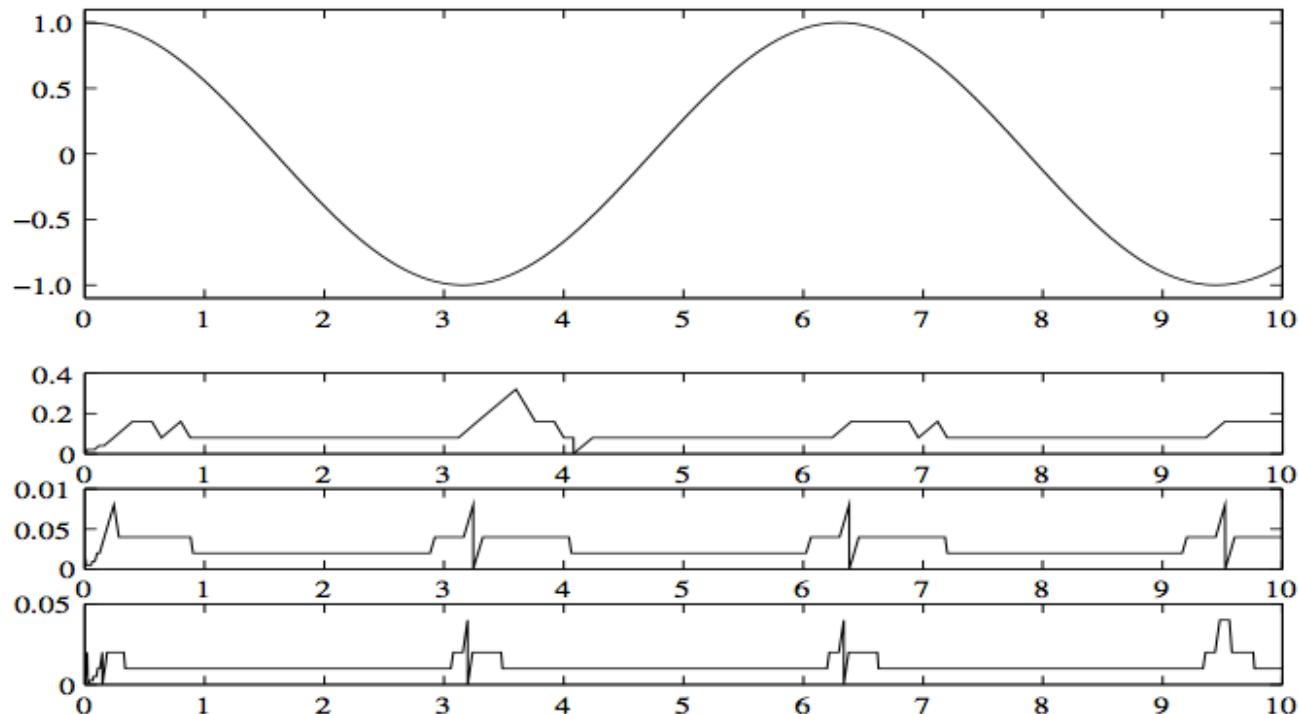
Illustratie: Mathieuvergelijking (1)



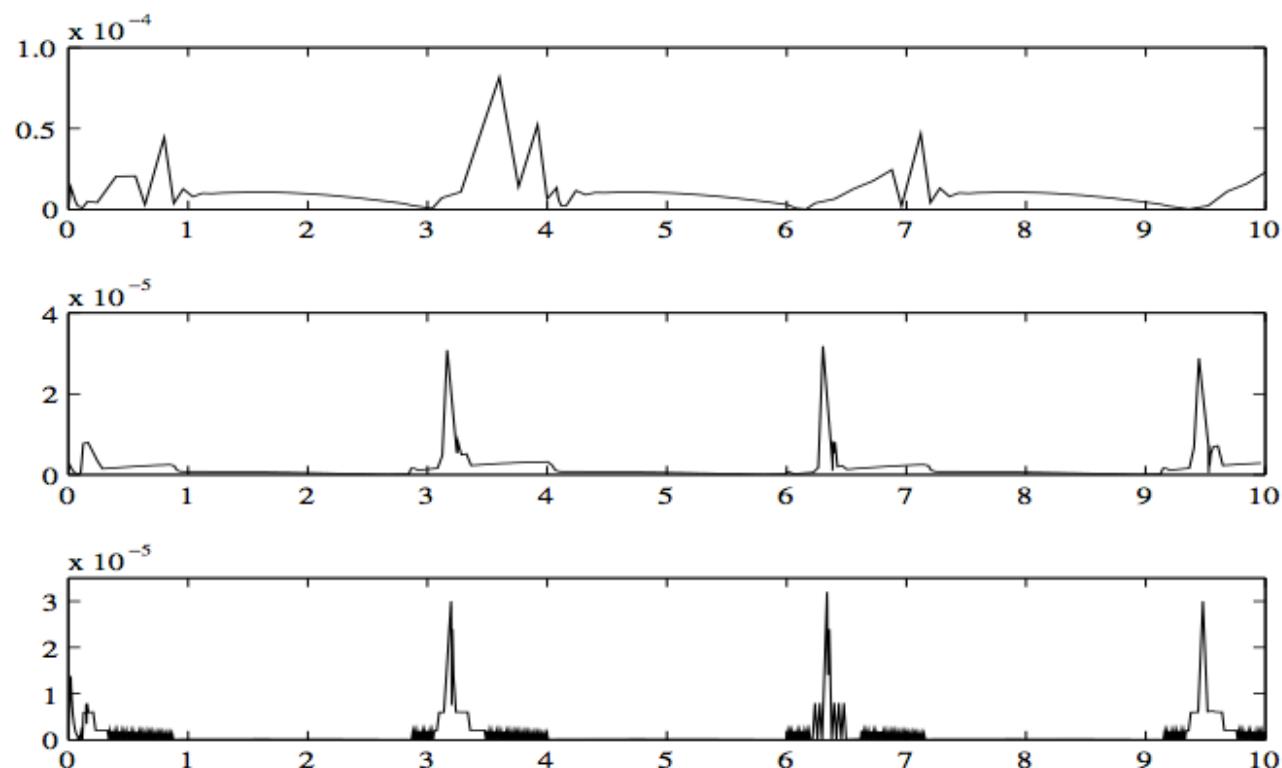
Illustratie: Mathieuvergelijking (2)



Illustratie: Curtiss-Hirschfelder vergelijking (1)



Illustratie: Curtiss-Hirschfelder vergelijking (2)



Voor het examen

- Methodes kunnen **herkennen.**
 - Als er een formule staat, kunnen aangeven of het een Adams-Bashforth, Adams-Moulton of BDF formule is.
 - Orde kunnen nagaan, en weten hoe orde bepaald wordt.
- Gedrag van methodes kunnen **herkennen en verklaren.**
 - Kunnen nagaan of een methode convergeert en waarom?
 - Als er een figuur of tabel gegeven wordt, kunnen afleiden welke methode gebruikt werd.
- Foutenschatting kunnen interpreteren en **toepassen.**

Voorbeelden van vraagjes

- Hoe wordt een lineaire multistapmethode gedefinieerd ?
- Welke principes ken je om een lineaire multistapmethode op te stellen ?
- Hoe bepaal je de orde van een lineaire multistapmethode ?
- Wat is de maximale orde van een convergente lineaire multistapmethode, en waardoor is ze beperkt ?
- Hoe werkt de Milne foutenschatter ?
- Hoe bepaal je goede startwaarden voor een lineaire multistapmethode?