Einführung in Computational Engineering

Grundlagen der Modellierung und Simulation

7. Vorlesung: Zeitkontinuierliche Modellierung und Simulation

25. November 2013

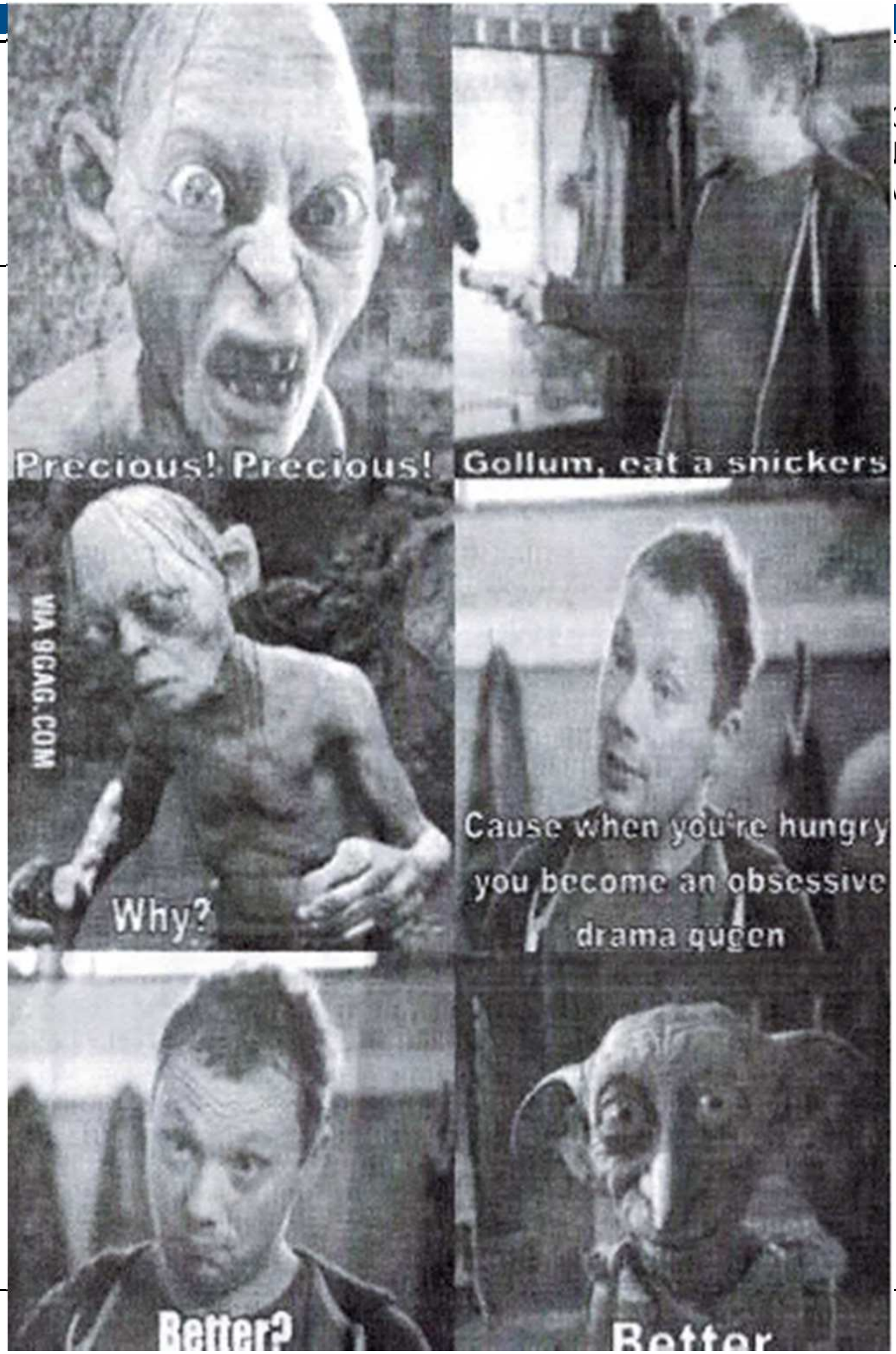
Prof. Dr. Jan Peters

MOODLE TEST IN ZWEI FOLIEN

produziert vom

Meisenantworten

- **Thanks for the cartoon – you made my day!**
- Moodle Fragen vorlesen: Feedback war 2 dafür, aber 1 dagegen.
  - Daher eine Umfrage per Moodle bis nächste Woche...



Überblick der Vorlesungsinhalte

1. Einführung
2. Diskrete Modellierung und Simulation
3. Zeitkontinuierliche Modellierung und Simulation
4. Teilschritte einer Simulationsstudie
5. Interpretation und Validierung
6. Modulare und objektorientierte Modellierung und Simulation
7. Parameteridentifikation von Modellen

MOODLE FRAGE

$$\underline{\dot{x}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \underline{x}$$

$\dot{x} = Ax + b \overset{!}{=} 0$

$\Rightarrow Ax = -b \Rightarrow x = A^{-1}b$

$$\left.\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1 \\ \dot{x}_2 &= x_2 \end{aligned}\right\} \quad \lambda = +1$$

$\mathrm{Re}\,\lambda > 0 \Rightarrow$ Instabil

$\mathrm{Im}\,\lambda = 0 \Rightarrow$ Aperiodisch

Bitte jetzt auf Moodle eine Frage beantworten!

$$\underline{\dot{x}} = \begin{bmatrix} 1 & h \\ h & 1 \end{bmatrix} \underline{x}$$

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & h \\ h & 1-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)^2 - h^2 = 0$$

$\Rightarrow (1-\lambda)^2 = h^2$

$\Rightarrow 1-\lambda = \pm h$

$\lambda = \pm h + 1$

$\lambda < 0$

$\Rightarrow \pm h + 1 < 0 \Rightarrow h < -1$

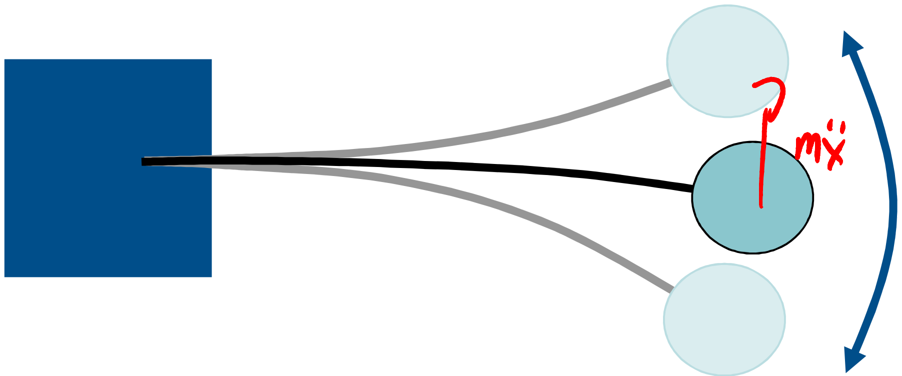
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Grundlagen der Modellierung und Simulation

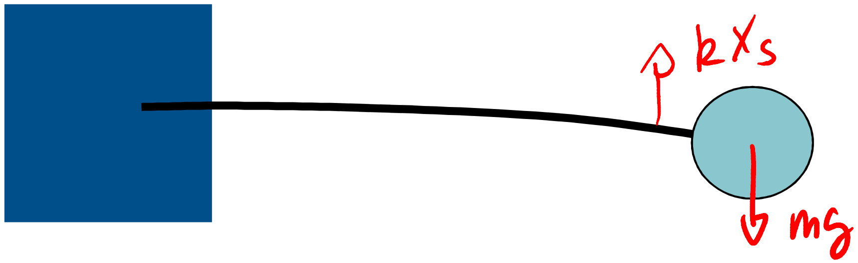
3. ZEITKONTINUIERLICHE MODELLIERUNG UND SIMULATION

3.5 Berechnung nichtlinearer Gleichgewichtslösungen

- Nichtlineares dynamisches System $\dot{x} = f(x, u)$ mit $x(0) = x_0 \in \mathbb{R}^n$



- Stationäres System $0 = f(x_s, u_s)$ mit $x_s \in \mathbb{R}^n$



3.5 Berechnung nichtlinearer Gleichgewichtslösungen

- Bestimmung von $x_s \in \mathbb{R}^n$ mit

$$f(x_s) = 0 \Leftrightarrow \begin{array}{c} f_1(x_1, \ldots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, \ldots, x_n) = 0 \end{array}$$

- Anwendungsbereiche:
  - Bestimmung (quasi-)stationärer Punkte dynamischer Systeme
  - Implizite Differentialgleichungslöser
  - Optimierungsprobleme
  - Eigenwertprobleme

3.5.1 Differentialgleichungslöser

- **Idee**: Finde stationären Punkt x_s einer Differentialgleichung

  $\dot{x} = f(x)$ mit $x(0) = x_0$

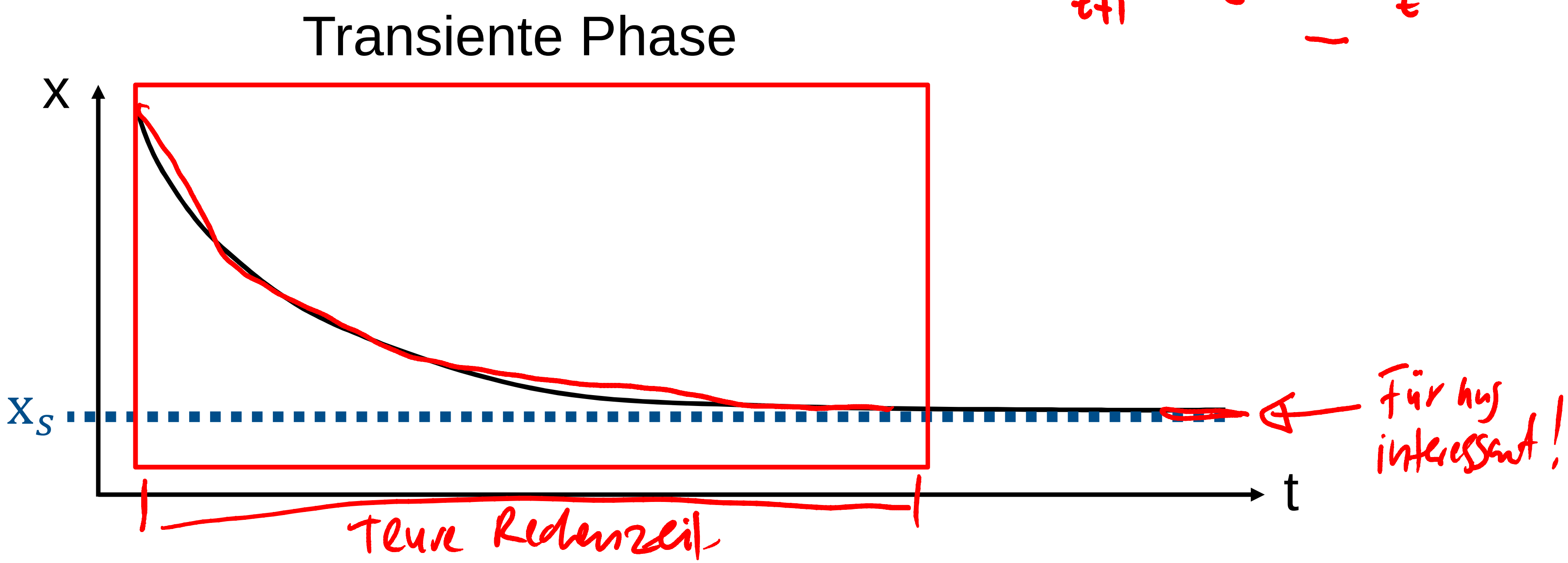
- **Annahme**: $x(t) \rightarrow x_s$ für $t \rightarrow \infty$

- Konvergenzbedingung
  - x_s stabiler stationärer Punkt
  - Anfangswert x_0 ist nah genug bei x_s = "x_0 in der Attraktionsregion von x_s liegt"

3.5.1 Differentialgleichungslöser

- Transiente Phase ist uninteressant
  - Konsequenz: möglichst große Schrittweite $h \coloneqq \Delta t$ wählen

$$x_{t+1} = x_t + \overset{=h}{\Delta t}\, \dot{x}_t$$



3.5.2 Fixpunktiteration

- Verwendung einer Fixpunktgleichung $\Phi(\bar{x}) = \bar{x}$, wobei $\Phi: M \to M$ eine abgeschlossene Funktion ist und M ein Banachraum ist

- Notation
  - Startwert x_0
  - i-te Näherungslösung x_i

nicht sich an

GGL

x_s

$\dot{x} = f(x)$

$x_{i+1} = \underbrace{x_i + \Delta t f(x_i)}_{\phi(x_i)}$

- Fixpunktiteration

$$\boxed{x_{i+1} = \Phi(x_i),} \qquad i = 0,1,2, \dots$$

3.5.2 Fixpunktiteration

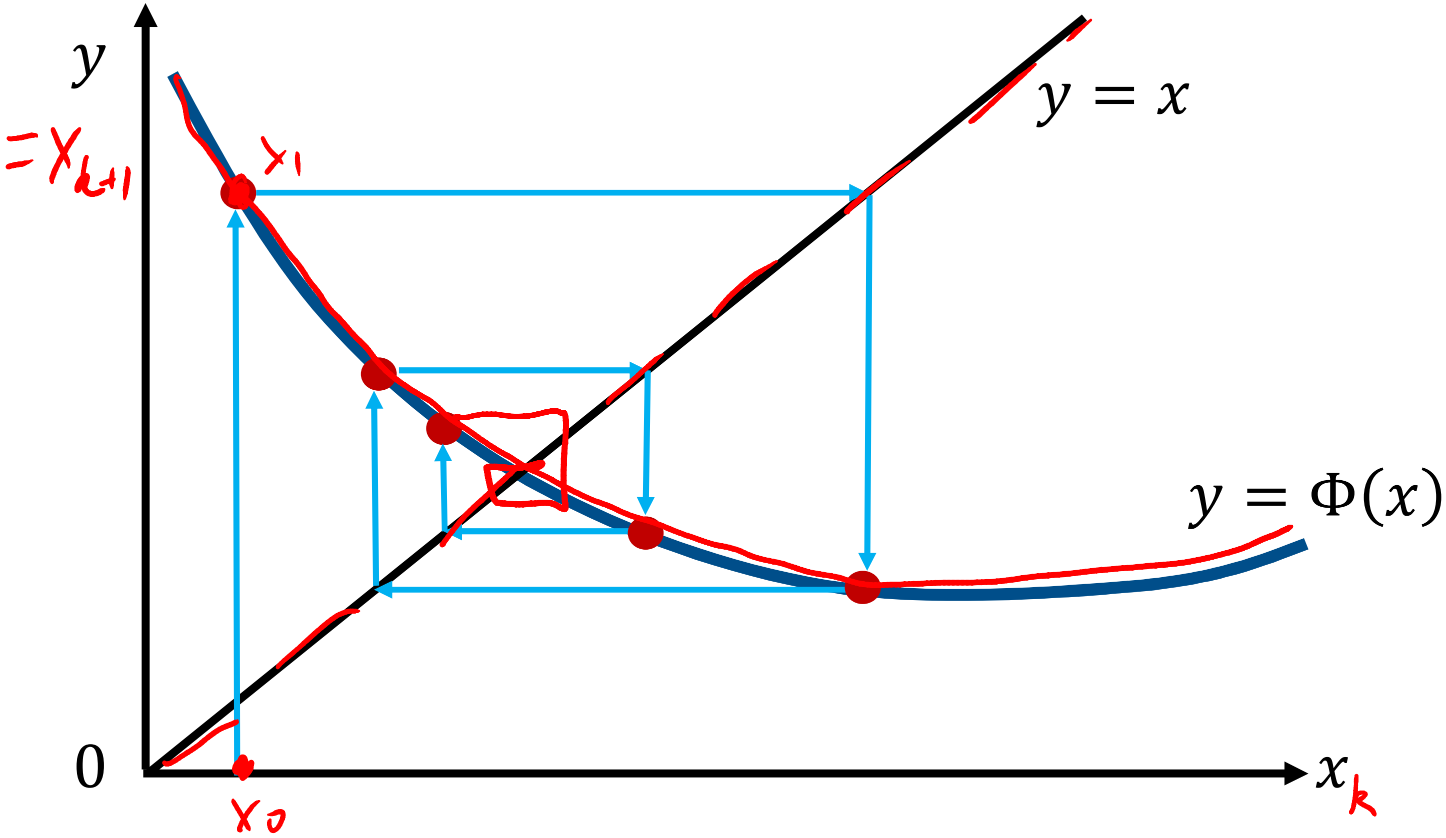
- Zusammenfassend:
  - Konvergenzgarantie mit banachschem Fixpunktsatz

  - Φ ist eine Kontraktion (siehe folgendes Beispiel)
    - Φ ist abgeschlossen und bildet in sich selbst ab
    - Lipschitzbedingung mit $L \in [0,1)$ ist erfüllt (iterativ schrumpfendes Rechteck)

  - Quell-, bzw. Bildmenge der Kontraktion ist ein vollständiger metrischer Raum
    - In einem vollständigem Raum konvergiert jede Cauchy-Folge
    - Ein metrischer Raum ist ein Vektorraum mit induzierter Norm (z.B. Euklidische Norm)

3.5.2 Fixpunktiteration: Beispiel

- n-dimensionale Veranschaulichung mit $n = 1$



3.5.2 Fixpunktiteration: Lineares System

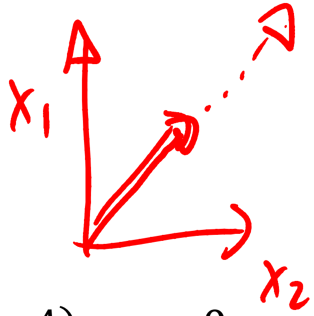
- Wann bildet die Fixpunktiteration

$\phi(x_i)$

$$x_{i+1} = \mathrm{A}x_i$$

von $M = [-c, c]^n \subseteq \mathbb{R}^n$ auf M ab?

- Wenn für $\lambda \in \mathbb{R}$ und $|\lambda| \leq 1$ gilt



$$\lambda x_\infty = \mathrm{A}x_\infty \Leftrightarrow (\lambda I - A)x_\infty = 0.$$

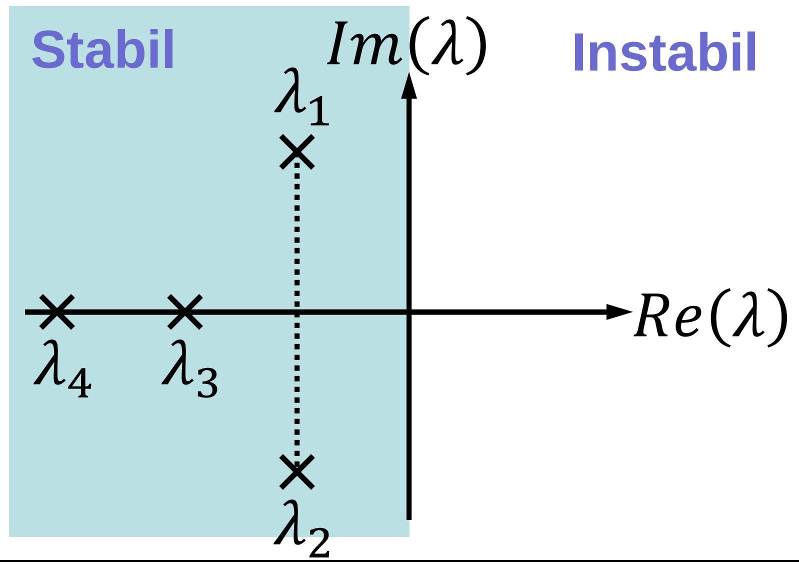
- D.h. lineare Fixpunktiteration (a.k.a. Differenzengleichungen) hat ein anderes Stabilitätskriterium als lineare Differentialgleichungen!

MOODLE TEST IN ZWEI FOLIEN

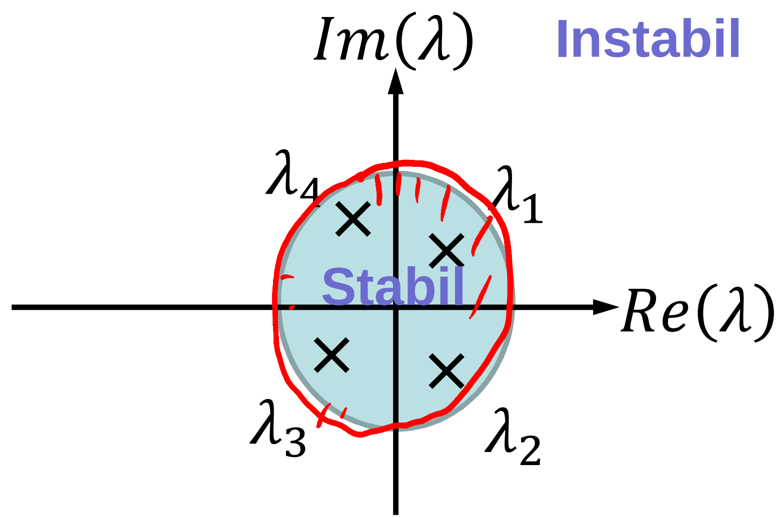
3.5.2 Fixpunktiteration: Lineares System

- **Stabilität von lineare Fixpunktiteration**: Wenn der Betrag aller Eigenwerte $\lambda_i \in \mathbb{R}$ berechnet aus $\det(\lambda I - A) = 0$ positiv ist, d.h., $|\lambda_i| \leq 1$, dann ist die lineare Fixpunktiteration stabil.

Stabilität von Differentialgleichungen $\dot{x} = Ax$



Stabilität von Differenzengleichung $x_{t+1} = Ax_t$



3.5.2 Fixpunktiteration: Beispiel

- Gegeben sei die Funktion $x^2 - x - 1 = 0$

$\Rightarrow \quad X = \sqrt{x^2 + 1}$

$X_{k+1} = \phi(X_k)$

- Durch umstellen nach x ergibt sich die Fixpunktgleichung

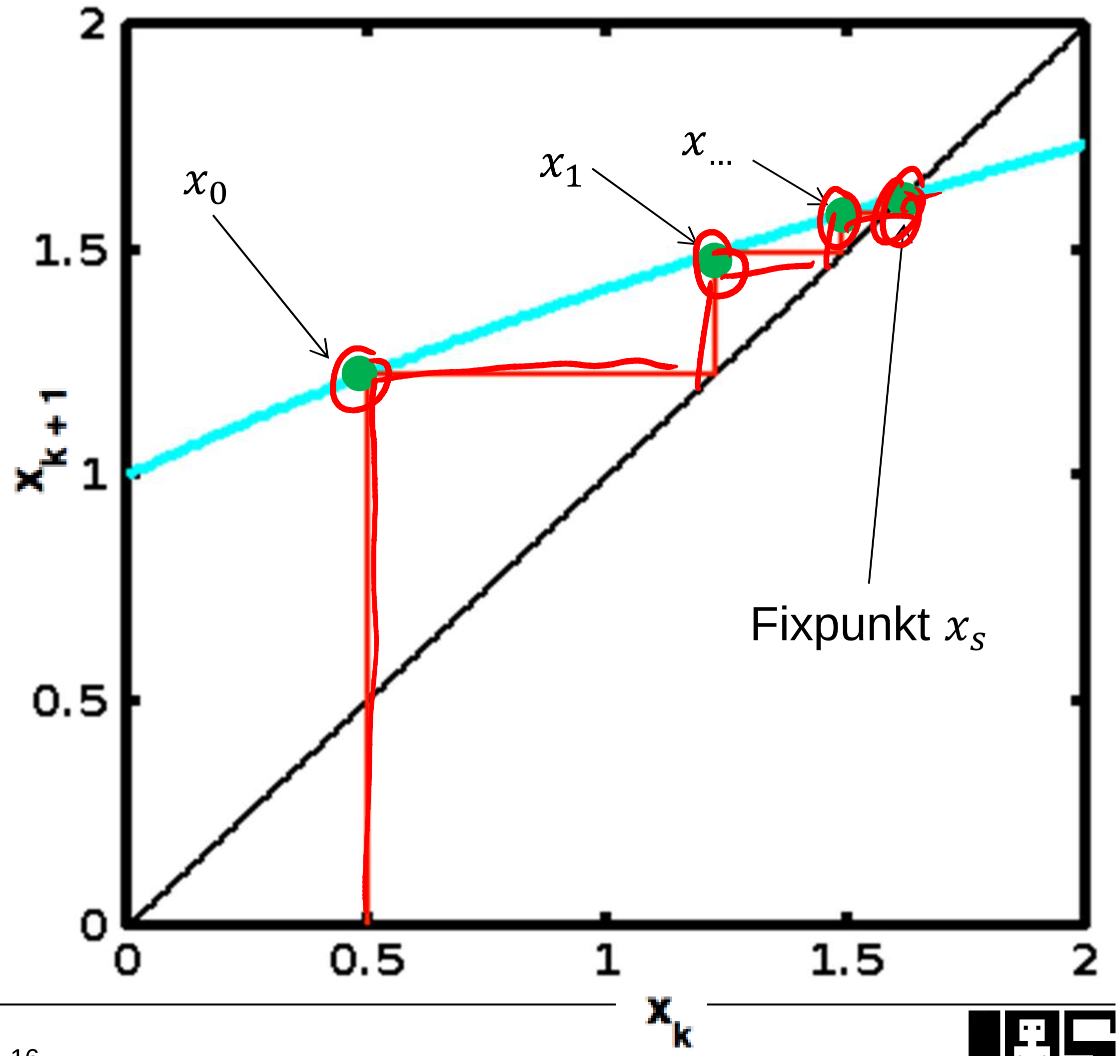
$$x = \sqrt{x+1} = \Phi(x)$$

- Berechnung des Fixpunkts $\boldsymbol{x_s}$ mit der Folge

  $x_{i+1} = \Phi(x_i)$ zu gegebenem x_0

3.5.2 Fixpunktiteration: Beispiel

- Betrachtung der Funktion
  $\Phi(x) \coloneqq \sqrt{x+1}$
- Iteration in ~~blau~~ rot dargestellt
- Erzeugt Cauchy-Folge $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$
  (hier in grün dargestellt)
  - Konvergenz gegen Fixpunkt



MOODLE FRAGE

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

$$\dot{x} = A_1 x$$

$$x_{k+1} = x_k + h\dot{x}$$

$$= x_k + hA_1 x_k$$

$$= \underbrace{(I + hA_1)}_{A_2} x_k$$

Bitte jetzt auf Moodle eine Frage beantworten!

3.5.2 Fixpunktiteration: Beispiel

- Beispiel: Grippeausbreitung im Hörsaal

- Terminologie:
  - Iterationen i
  - Zeitschritte t_i (diskret, z.B. Vorlesungstermine)
  - Relative Anzahl erkrankter Studenten x_i (also $0 \leq x_i \leq 1$)
  - Infektionsrate $\cancel{\geq} \alpha > 1$

3.5.2 Fixpunktiteration: Beispiel

- Beispiel: Grippeausbreitung im Hörsaal

- Annahme
  - In jeder Iteration erkranken Studenten ☹
  - Erkrankte Studenten sind in Iteration i krank und sind in Iteration $i + 1$ wieder gesund (können jedoch sofort neu erkranken ☹)

3.5.2 Fixpunktiteration: Beispiel

Logistic Map

- Beispiel: Grippeausbreitung im Hörsaal
- Iterationsfunktion gegeben mit $x_{i+1} = \Phi(x_i) = \boxed{\alpha \cdot x_i \cdot (1 - x_i)}$

gesund   kranke Studenten

$x_s = \alpha x_s (1 - x_s)$

- Zwei Fixpunkte $x_s = \left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right)$ und $x_s = 0$.

Herbst   Sommer

- Bestimmen der Infektionsrate α mithilfe der Eigenwerte!

$(1-\alpha)\cancel{x_s} = -\alpha x_s^2$

$\Rightarrow x_s = \frac{\alpha - 1}{\alpha}$

3.5.2 Fixpunktiteration: Beispiel

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Beispiel: Grippeausbreitung im Hörsaal

Φ

$\Phi(x_i) = \alpha x_i (1 - x_i)$

$\frac{d\Phi}{dx_i} = \alpha(1 - x_i) + \alpha x_i(-1)$

$= \alpha(1 - 2x_i)$

- Bestimmen der Infektionsrate α mithilfe der Eigenwerte!

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \alpha(1-2x) \Rightarrow \left|\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right| < 1 \Leftrightarrow |1-2x| < \frac{1}{\alpha}$$

$-\frac{1}{\alpha} < 1 - 2x < \frac{1}{\alpha}$

$-1 - \frac{1}{\alpha} < -2x < -1 + \frac{1}{\alpha}$

$1 + \frac{1}{\alpha} > 2x > +1 - \frac{1}{\alpha}$

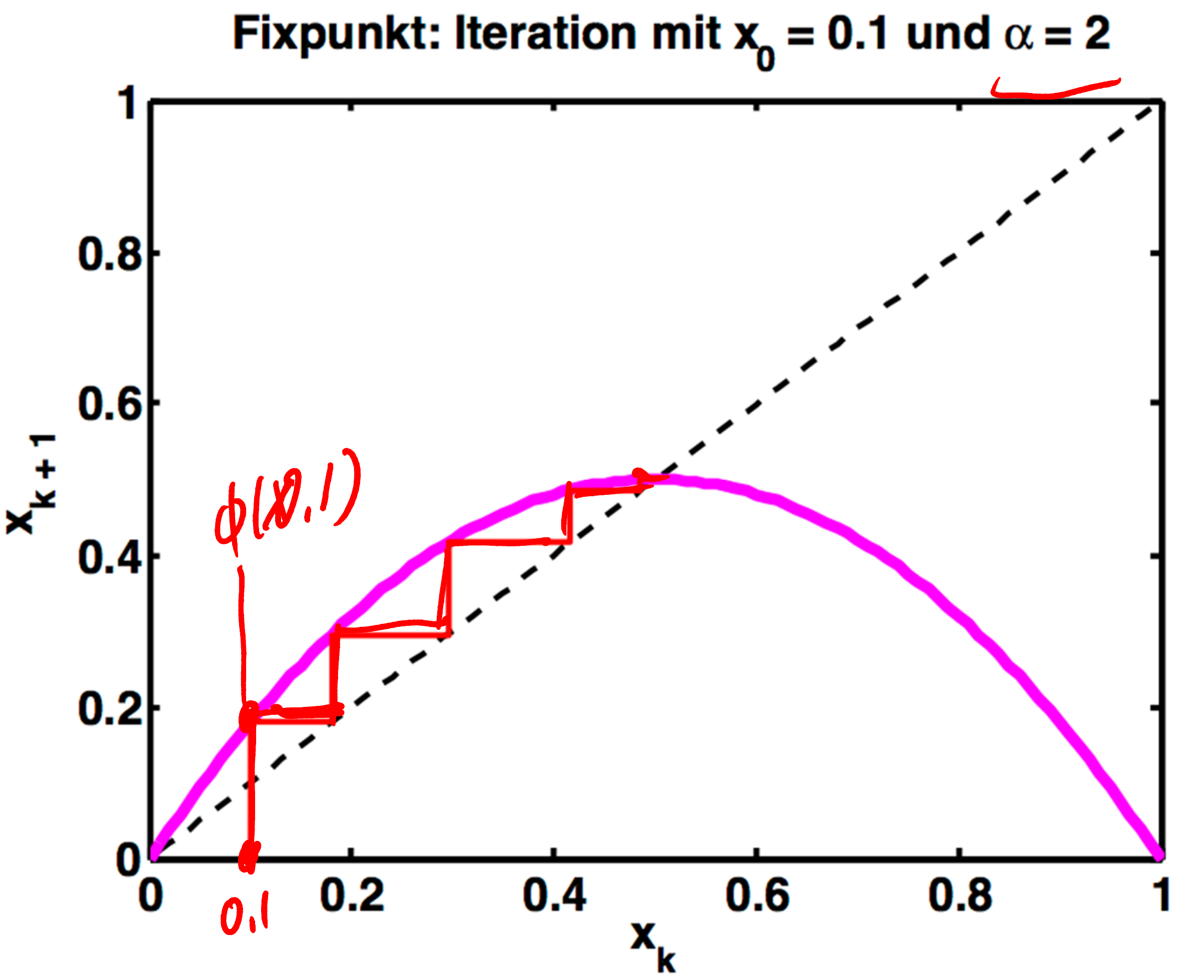
$\frac{1}{2} + \frac{1}{2\alpha} > x > \frac{1}{2} - \frac{1}{2\alpha}$

- Daraus folgt: $\frac{1}{2} - \frac{1}{2\alpha} < x < \frac{1}{2} + \frac{1}{2\alpha} \Rightarrow \alpha = 1.5$

- Konvergenz mit $x_s = \frac{1.5-1}{1.5} = \frac{1}{3} \in (0,1)$, wobei $x_0 = 0.1$

IAS

3.5.2 Fixpunktiteration: Beispiel



3.5.3 Konvergenz der Fixpunktiteration

x_6

x_0

x_s

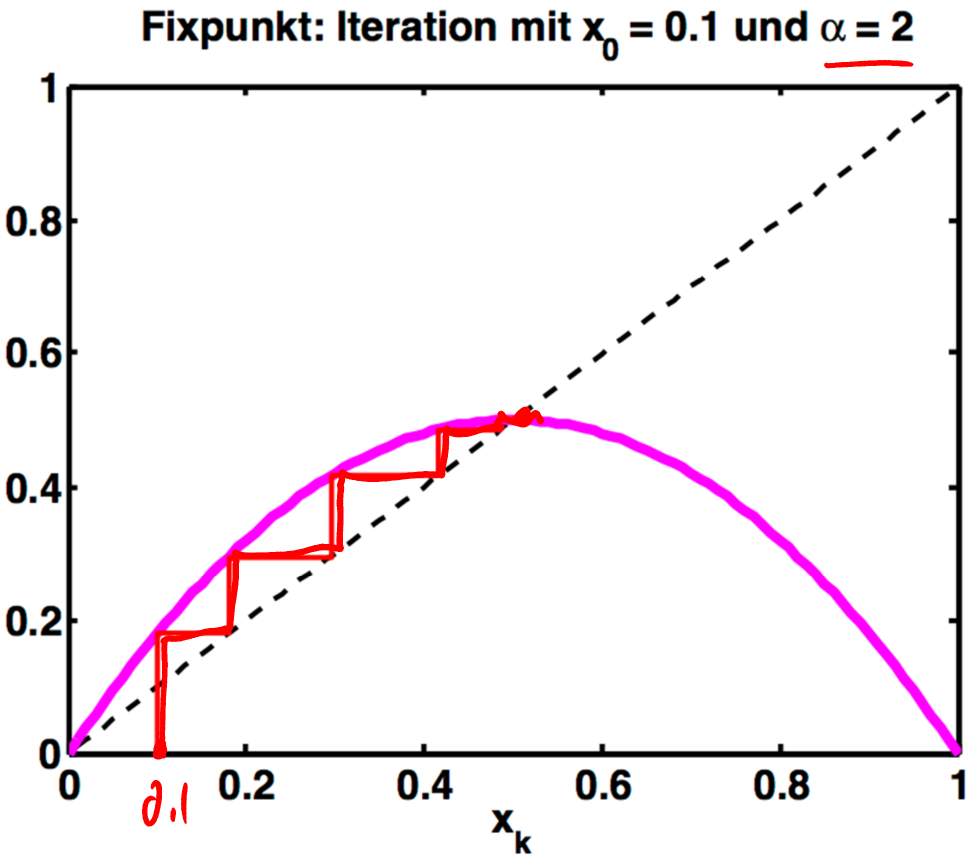
- Konvergenzbedingung
  - x_0 muss nah genug an x_s liegen
  - Eigenwerte von $\frac{\partial \Phi}{\partial x}(x_s)$ liegen im Einheitskreis (aus dem Stabiltätskriterium)
- Gilt die Konvergenzbedingung, dann konvergiert $x_i \to x_s$
  - Für die einfache Fixpunktiteration folgt damit:

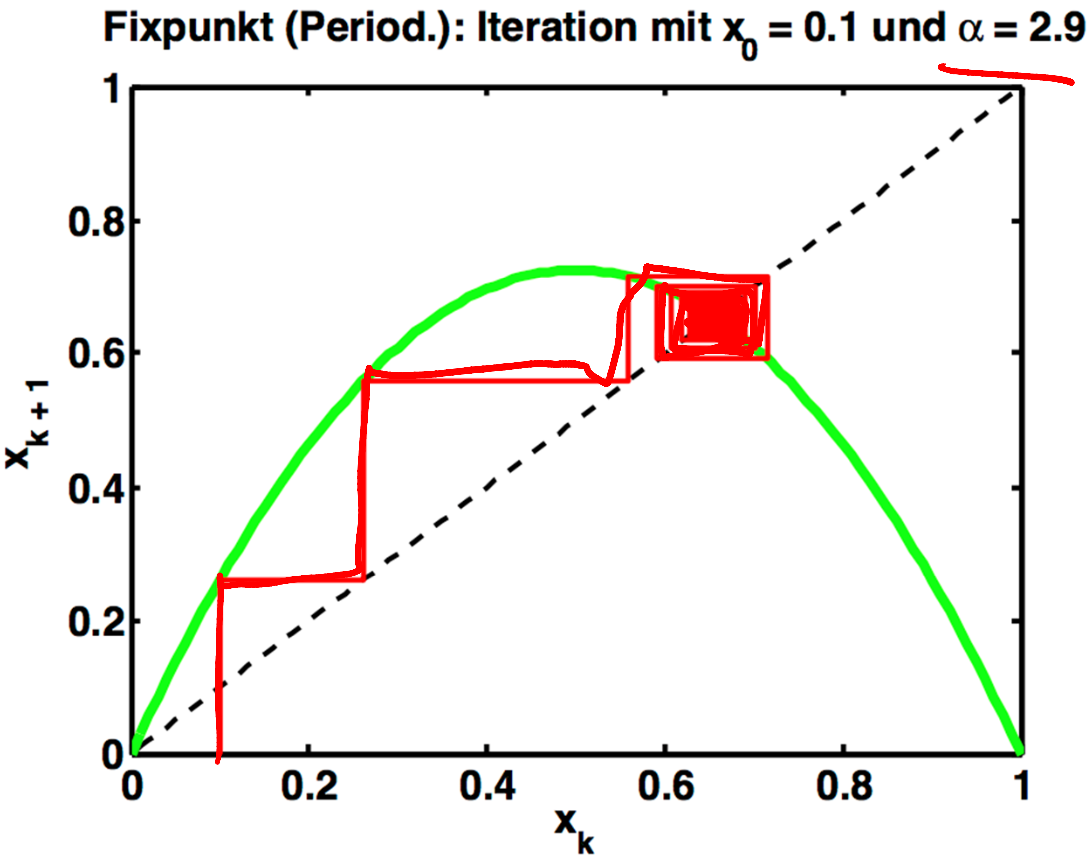
$$\Phi(x) := x + f(x) \Rightarrow \frac{\partial \Phi}{\partial x} := I + \frac{\partial f}{\partial x}$$

$\dot{x} = f(x)$

$$\left| \mathrm{eig}\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right) \right| < 1$$

3.5.3 Konvergenz der Fixpunktiteration: Beispiele





3.5.3 Konvergenz der Fixpunktiteration: Gegenbeispiele

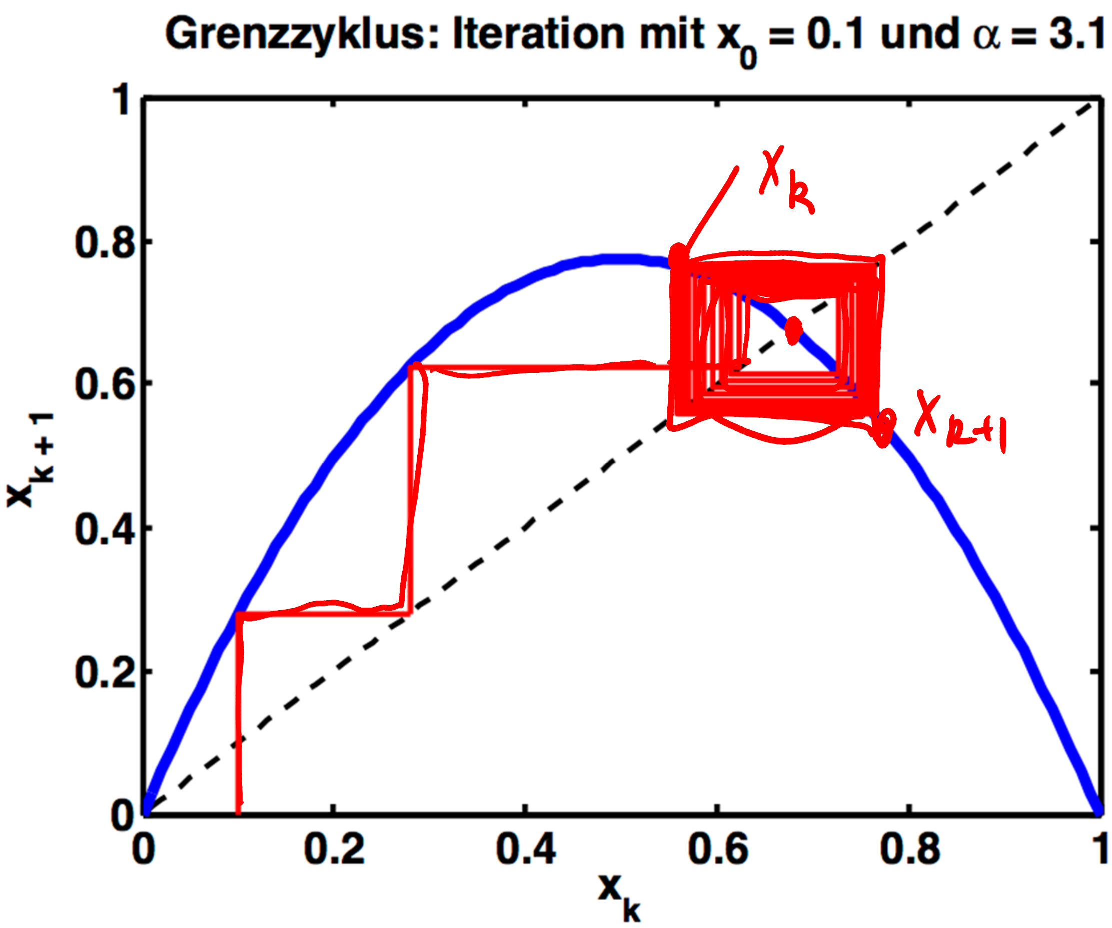
$x_{k+1} \neq \Phi(x_{k+1})$

$x_k = \phi(x_{k+1})$

$x_{k+1} = \phi(x_k)$

$x_{k+1} = \phi(\phi(x_{k+1}))$

doppelten Fixpunkt.



Was passiert hier?

Ein stabiler Grenzyklus zweiter

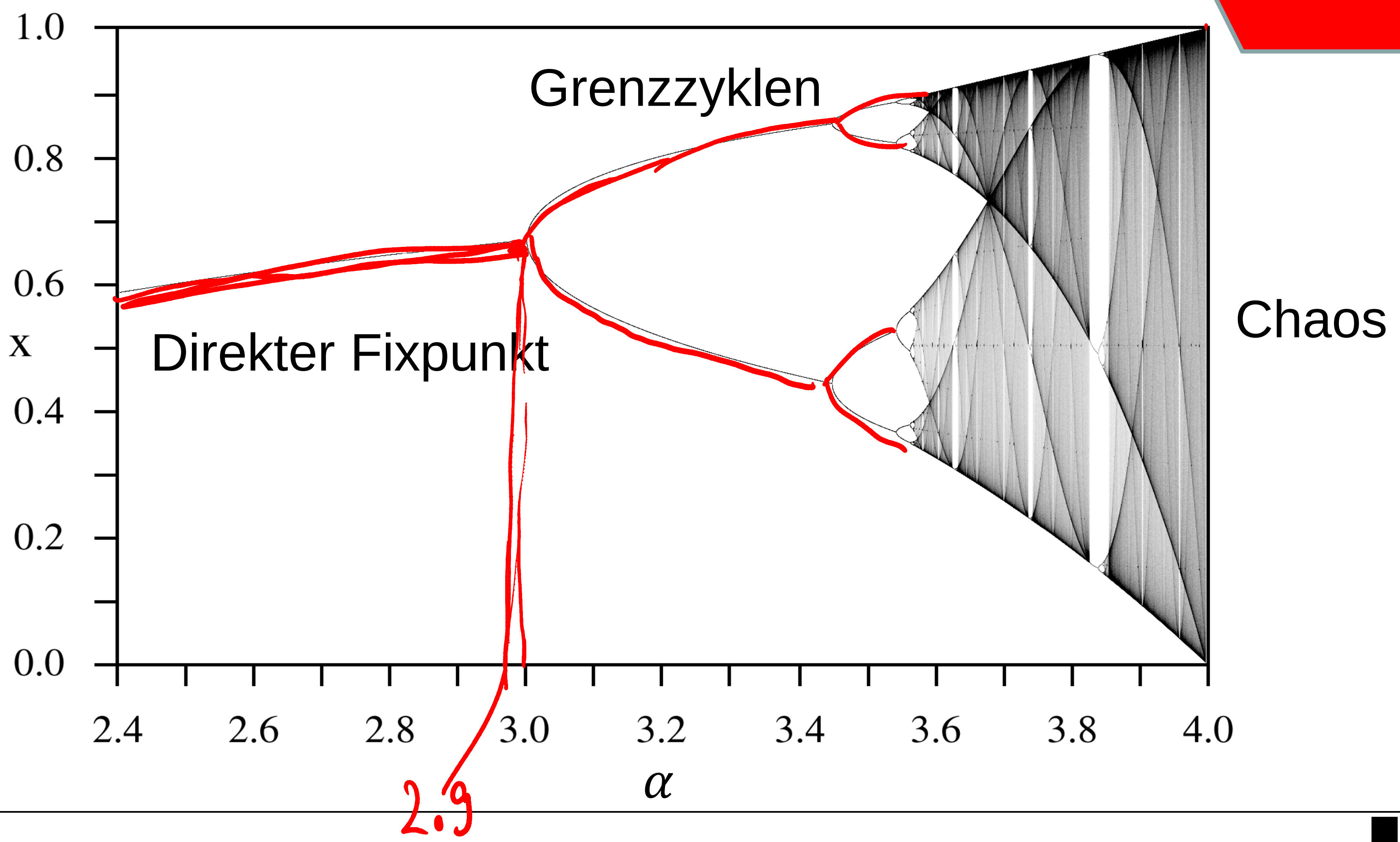
Ordnung $x_{2S} = \Phi\big(\Phi(x_{2S})\big)$

kann entstehen, wenn

$x_{2S} \neq \Phi(x_{2S})$ und der Fixpunkt

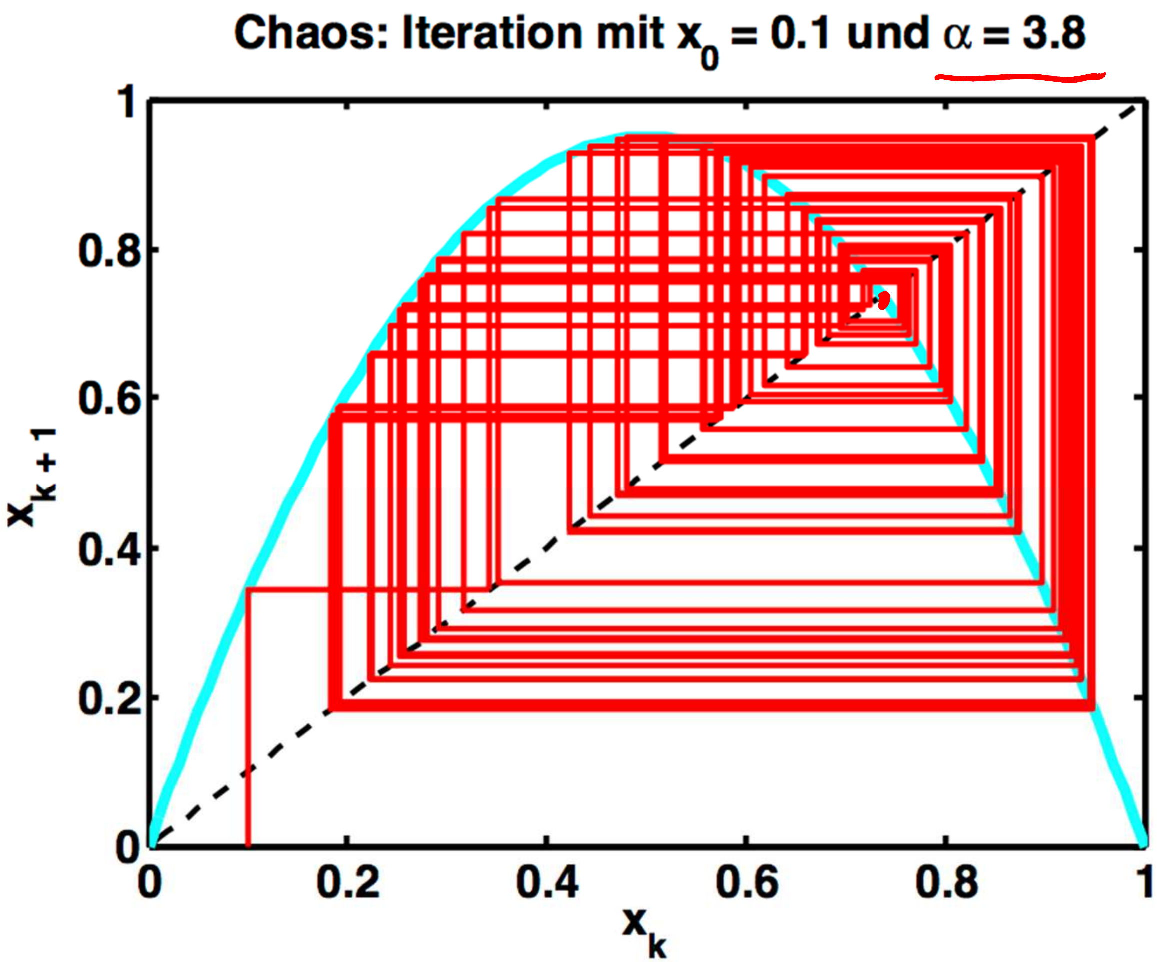
$x_S = \Phi(x_S)$ instabil ist.

3.5.3 Konvergenz der Fixpunktiteration: Fixpunkte Unendlicher Ordnung (Exkursion)



3.5.3 Konvergenz der Fixpunktiteration: Gegenbeispiele (Exkursion)

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT



Was passiert hier? Es kann Grenzyklen beliebiger Ordnung geben. Letztere nennt man Chaos = keine Konvergenz!

3.5.4 Konvergenzhilfe für die Fixpunktiteration

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Konvergenz der einfachen Fixpunktiteration ist nicht garantiert
- Verbesserung mit einer (konstanten und regulären) Relaxationsmatrix $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$\alpha = 3{,}9$

$$0 = B \cdot f(x) \Leftrightarrow 0 = \Phi(x) := x + B \cdot f(x)$$

$$= \frac{\alpha}{\beta} x(1-x)$$

- Die Relaxationsmatrix sei eine Diagonalmatrix (einfachste Annahme)

$$\boxed{B = \begin{pmatrix} b_{1,1} & & \\ & \ddots & \\ & & b_{n,n} \end{pmatrix}}$$

3.5.5 „Optimale" Relaxationsmatrix finden

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bei entsprechender Nähe zur Lösung, ist folgendes eine geeignete Wahl als Relaxationsmatrix

$$B = -\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_s)\right)^{-1} \quad \text{mit} \;\; f(x_s) = 0$$

- Die Eigenwerte im Lösungspunkt sind mit dieser Wahl null

$$\Phi(x) := x + B \cdot f(x) \;\Rightarrow\; \frac{\partial \Phi}{\partial x} := I - \left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_s)\right)^{-1} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

MOODLE FRAGE

Bitte jetzt auf Moodle eine Frage beantworten!

$\dot{x} = -5\sin(x)$

$\phi(x) = x - 5\sin(x)$

$\frac{\partial\phi}{\partial x} = 1 - 5 = -4$

$\left|\frac{\partial\phi}{\partial x}\right| = 4$

$\phi = x - B\,5\sin(x)$

$\frac{\partial\phi}{\partial x} = 1 - 5B$

$\lambda = 5B - 1 < 1$

$0 < B \leq \frac{2}{5}$

$\dot{x} = \underbrace{-0.5\sin(x)}$

$\phi(x) = x + f(x) = x - 0{,}5\sin(x)$

$\frac{\partial\phi}{\partial x} = I - 0{,}5\cos(x)\Big|_{x=x_s}$

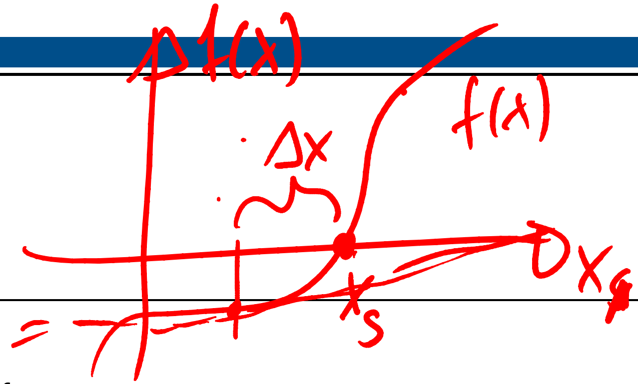
$= 1 - 0{,}5 = +0{,}5$

$\det\left(\lambda I - \frac{\partial\phi}{\partial x}\Big|_{x=x_s}\right) = 0$

$\lambda - 0{,}5 = 0 \Rightarrow \lambda = 0{,}5$

$|\lambda| \leq 0{,}5$

3.5.6 Newton-Verfahren



- Aktuelle Lösungshypothese: x

- Gesucht ist $x_s = x + \Delta x$ mit $\Delta x = ?$

- Lösungsansatz ist die Taylorentwicklung 1. Grades
  - $T_{f,1}(x + \Delta x) \approx f(x) + \frac{\partial f}{\partial x}(x) \cdot \Delta x$

  - Beschreibt die an der Stelle x anliegende Tangente

3.5.6 Newton-Verfahren

- Taylorentwicklung 1. Grades
  - $T_{f,1}(x + \Delta x) \approx f(x) + \frac{\partial f}{\partial x}(x) \cdot \Delta x$
- Näherung des Gleichungssystems $f(x_s) = f(x + \Delta x)$?
  - $0 = f(x) + \frac{\partial f}{\partial x}(x) \cdot \Delta x \;\Rightarrow\; \Delta x = -\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x)\right)^{-1} \cdot f(x)$ gesucht
- Neue iterative Näherung ist damit $x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$ $= x_i - \left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_i)\right)^{-1} f(x_i)$

3.5.6 Newton-Verfahren

- Basis Version des Newton Verfahrens:
  - Berechnung der Korrektur (Suchrichtung hingegen vermeintlicher Nullstelle)

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_i) \cdot \Delta x_i = -f(x_i)$$

- Berechnung der nächsten Iteration:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$$

- Gesucht ist die Gleichgewichtslage x_s mit $f(x_s) = 0$

3.5.7 Terminierung des Newton-Verfahrens

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Es gibt zwei Kriterien, welche die Terminierung herbeiführen

1. „nah genug an der Lösung"
   - Keine oder geringe Änderung zwischen den Iterationen

$$\|\Delta x_i\| \leq \varepsilon_1 \cdot (1 + \|x_i\|)$$

   - Funktionswert ist betragsmäßig klein genug

$$\|f(x_{i+1})\| \leq \varepsilon_2$$

- $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ sind Toleranzgrenzen

3.5.7 Terminierung des Newton-Verfahrens

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

2. „kein Fortschritt mehr"

   - Keine oder geringe Änderung des Funktionswertes

$$\|f(x_{i+1})\| \geq \|f(x_i)\| - \varepsilon_3$$

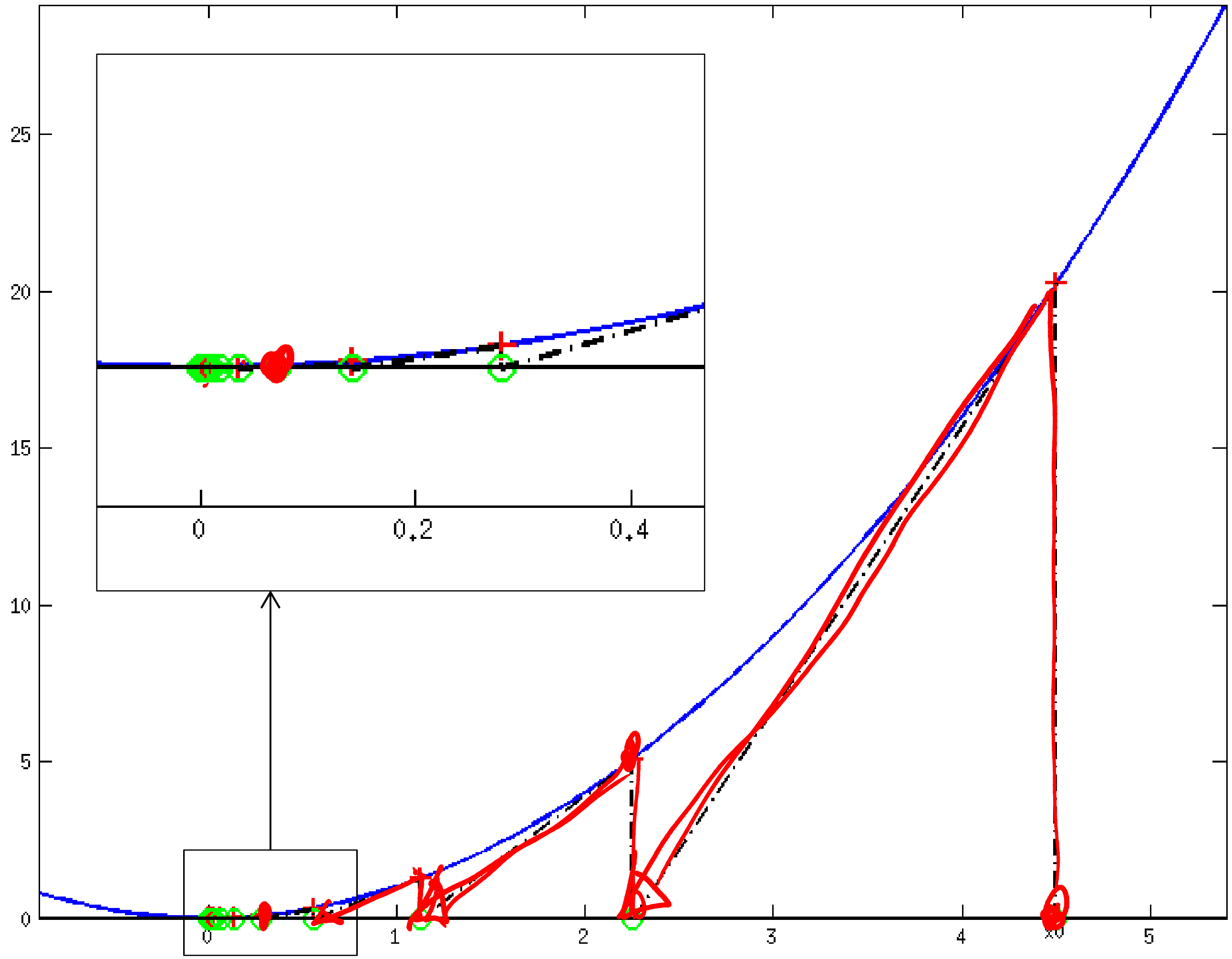
   - Zu viele Iterationsschritte notwendig

$$i + 1 > i_{max}$$

- ε_3 ist Toleranzgrenze, ebenso wie ε_1 und ε_2
  - Geeignete Wahl der Toleranzgrenzen wäre zwischen 10^{-4} und 10^{-8}

3.5.6 Newton-Verfahren: Beispiel

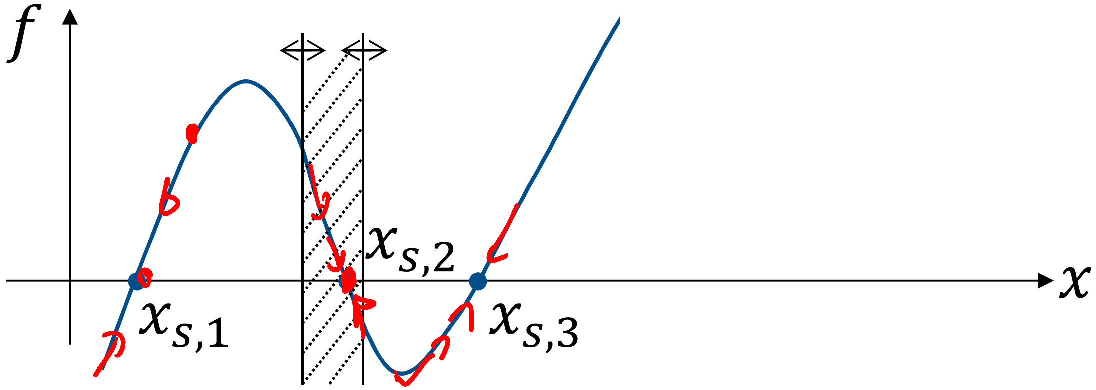
- Veranschaulichung des Newton-Verfahrens 1. Ordnung an der Funktion $f(x) = x^2$



3.5.8 Schwierigkeiten beim Newton-Verfahren

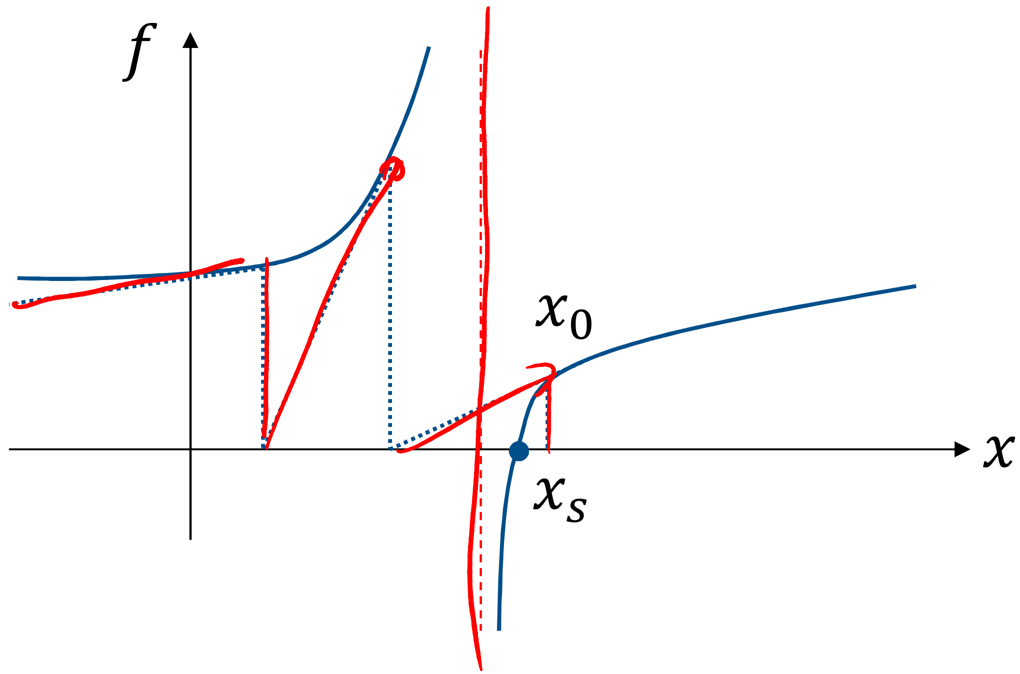
- Geschickte Wahl des Startvektors x_0
  - Konvergenz des Newton-Verfahrens ist sehr stark vom Startvektor abhängig

  - Startvektor muss im Einzugsbereich der anzunähernden Nullstelle $x_{s,2}$ liegen falls mehreren Lösungen existieren



3.5.8 Schwierigkeiten beim Newton-Verfahren

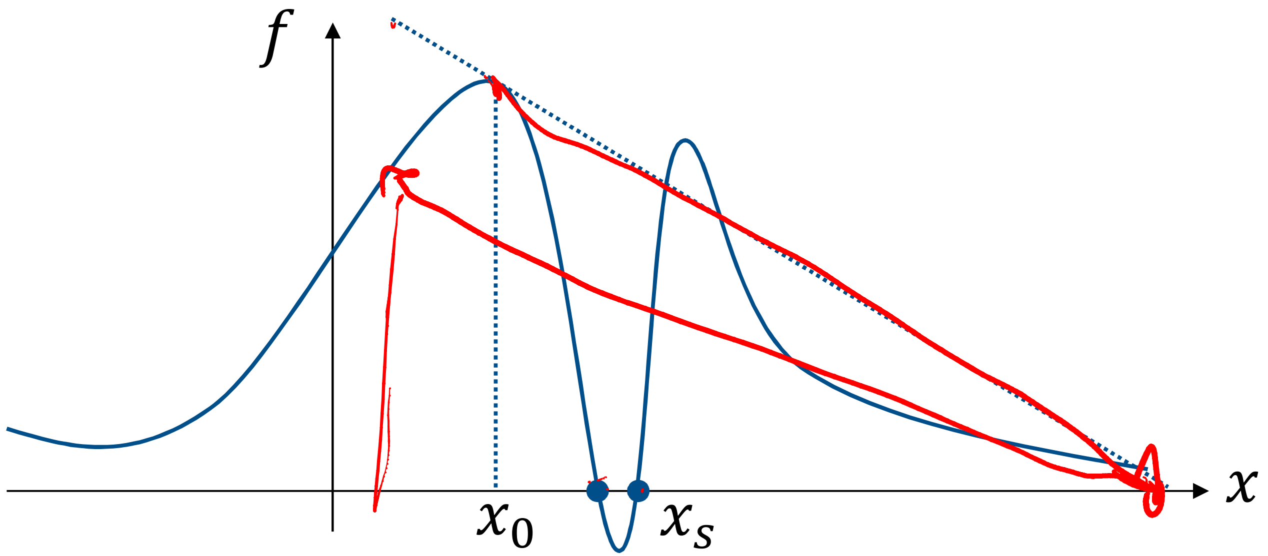
- Divergenz und Singularitäten
  - Jacobi-Matrix ist singulär oder Funktion divergiert



3.5.8 Schwierigkeiten beim Newton-Verfahren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Schwere nichtlineare Probleme
  - Divergenz trotz guter Wahl des Startwertes x_0



3.5.9 Schrittweitensteuerung

- Motivation
  - Divergenz des Newton-Verfahrens durch Wahl von zu großer Schrittweite
  - Stark nichtlineare Funktion $f(x)$, wobei die lineare Approximation aus der Taylor-Entwicklung nur in ganz enger Umgebung eine gute Annäherung für x_i liefert

MOODLE TEST IN ZWEI FOLIEN

3.5.9 Schrittweitensteuerung

- Kleinere Schrittweite bei der Berechnung von x_{i+1} als Lösungsansatz
  - $x_{i+1} = x_i + \alpha_i \cdot \Delta x_i$ mit $0 < \alpha_{min} \leq \alpha_i \leq 1$

- Mögliche Bestimmung der Schrittweite mit näherungsweiser Minimierung von

$$\varphi(\alpha) = \|f(x_i + \alpha \cdot \Delta x_i)\|^2 = \sum_{i=1}^{n} (f_i(x_i + \alpha \cdot \Delta x_i))^2$$

Quadratischer Fehler zwischen $f(x_i)$ wird 0?

- Faustregel: Wahl von α „so klein wie nötig und so groß wie möglich“, da für $\alpha \approx 1$ quadratische Konvergenz

3.5.10 Vergleich der Verfahren

$f(x) \in \mathbb{R}^n$

$f(x)$ $O(n)$

- Fixpunktiteration
  - Ausgeglichene globale Konvergenz, aber schlechte lokale Konvergenz relativ zum Newton-Verfahren
  - Vergleichsweise weniger komplex als das Newton Verfahren

Vektor

$O(n^2)$

$$\Delta x = \Big(\underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^{-1}}_{\substack{\text{Matrixinverse} \\ O(n^3)}} \overbrace{f(x)}^{\text{Vektor}} \Big)$$

- Newton-Verfahren
  - Sehr gute lokale Konvergenz dank des Taylorpolynoms (vom Grad eins), jedoch schlechte globale Konvergenz
  - Höherer Rechenaufwand im Vergleich zu der Fixpunktiteration

MOODLE FRAGE

Bitte jetzt auf Moodle eine Frage beantworten!