# Matematisk modellering og numeriske metoder

# Lektion 18

Morten Grud Rasmussen

12. november, 2013

## 1 Numeriske metoder til førsteordens ODE'er

[Bogens afsnit 21.1 side 898]

### 1.1 Euler-metoden

Vi stiftede allerede tilbage i lektion 1 kendskab til Euler-metoden til numerisk løsning af IVP'er på formen

$$y'(x) = f(x, y(x)), \qquad \text{hvor} \qquad y(x_0) = y_0.$$

Da $y$ er differentiabel, er $y(x_0 + h) \approx y(x_0) + hf(x_0, y(x_0))$ for $h$ lille. Hvis vi altså for at fast valg af $h$ og $x_0$ sætter $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$ og generelt $x_n = x_0 + nh$, så vil

$$\begin{aligned} y_0 &= y(x_0) \\ y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) \\ &\vdots \\ y_{n+1} &= y_n + hf(x_n, y_n), \end{aligned}$$

give $y(x_n) \approx y_n$ hvis $h$ er lille. Fejlen kan findes vha. Taylors formel. Da er

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{1}{2}h^2 y''(\xi) \tag{1}$$

for et passende $\xi \in [x, x + h]$. Den *lokale diskretitionsfejl* er altså proportional med $h^2$, hvilket vi også skriver $\varepsilon_1 = O(h^2)$. Hvis vi vil løse IVP'et på et givet interval $I$, så er antallet af skridt proportional med $h^{-1}$, og den *globale diskretiseringsfejl* er dermed $O(h^{-1})O(h^2) = O(h)$. Vi kalder derfor Euler-metoden for en førsteordensmetode.

## 1.2 Adaptiv skridtlængde

Som i numerisk integration kan vi også i numerisk løsning af IVP'er vælge skridtlængden *adaptivt*. Vi vil illustrere idéen med Euler-metoden. I Euler-metoden er den absolutte lokale diskretiseringsfejl som bekendt $\frac{1}{2}h^2|y''(\xi)|$ for passende valg af $\xi$ (se (1)). Tolererer vi derfor maksimalt en fejl på $T$, så kan vi ud fra størrelsen af $|y''(\xi)|$ finde mindstekrav på $h$. Men hvordan finder vi så $|y''(\xi)|$? Her er den grundlæggende idé at udnytte, at

$$y''(x) = \frac{\partial f}{\partial x}(x, y(x)) + \frac{\partial f}{\partial y}(x, y(x))f(x, y(x)),$$

som fås ved at differentiere ODE'en vha. kædereglen. De samme principper kan anvendes for de andre løsningsmetoder.

## 1.3 Heuns metode

I praksis er Euler-metoden sjældent god nok. Euler-metoden baserer sig på at opfatte $y$ som "lokalt lineær" og approksimere næste punkt med en lineær fremskrivning

$$y(x_0 + h) \approx y(x_0) + hf(x_0, y(x_0)).$$

Problemet er selvfølgelig, at hældningen $f(x, y(x))$ ændrer sig på stykket $[x_0, x_0 + h]$, og i højre endepunkt er hældningen $f(x_0+h, y(x_0+h))$. Et bedre bud ville derfor være at basere den lineære fremskrivning på *gennemsnittet* af hældningerne $f(x_0, y(x_0))$ og $f(x_0 + h, y(x_0 + h))$:

$$y(x_0 + h) \approx y(x_0) + \frac{h}{2}(f(x_0, y(x_0)) + f(x_0 + h, y(x_0 + h))). \tag{2}$$

Men hov! Højresiden indeholder jo den ukendte $y(x_0 + h)$, som vi forsøger at approksimere, og vi har altså ikke en opskrift på en approksimation af værdien i næste skridt. Løsningen er at udnytte, at hvis Euler-metoden ikke giver et resultat, der er helt hen i vejret, og $f$ ikke ændrer sig alt for sindsygt (den er jo trods alt kontinuert), så er $f(x_1, \tilde{y}_1)$, hvor $x_1 = x_0 + h$ og $\tilde{y}_1 = y(x_0) + hf(x_0, y_0)$ som i Euler-metoden, en god approksimation af $f(x_1, y(x_1))$. Heuns metode er en systematisk gentagelse af denne ræsonnering. Først findes

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \qquad \text{(prædiktoren)}$$

og siden sættes

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\big(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})\big) \qquad \text{(korrektoren).}$$

Nu vil $y_n \approx y(x_n)$ og det kan vises, at den lokale diskretiseringsfejl er $O(h^3)$ mens den globale diskretiseringsfejl er $O(h^2)$, altså en forbedring i forhold til Euler-metoden på én orden i skridtlængden.

## 1.4 Runge-Kutta-metoder

Både Euler-metoden og Heuns metode er eksempler på såkaldte *Runge-Kutta-metoder*, som er en klasse af metoder, hvor Euler-metoden er det simpleste eksemplar, mens Heuns metode er en såkaldt to-skridts-Runge-Kutta-metode. Sært barn har lange navne, og vi vil nu se på et særligt medlem af klassen, som er begavet med navne som "Runge-Kutta-metod*en*," "den klassiske Runge-Kutta-metode" og "RK4," hvor $4$-tallet indikerer, at denne metode er en fjerdeordensmetode (den globale diskretiseringsfejl er $O(h^4)$ og den lokale er $O(h^5)$). I RK4 sættes

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}\big(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\big), \qquad \text{for} \qquad n = 0, 1, 2, \dots,$$

hvor

$$k_1 = hf(x_n, y_n), \tag{3a}$$
$$k_2 = hf(x_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{1}{2}k_1), \tag{3b}$$
$$k_3 = hf(x_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{1}{2}k_2), \tag{3c}$$
$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3). \tag{3d}$$

Det er vigtigt at notere sig, at $k_i$'erne afhænger af $n$ og skal udregnes fra ny for hvert skridt! Det bemærkes, at hvis $f$ er konstant som funktion af $y$, så svarer $y'(x) = f(x)$ til at finde en stamfunktion, og ovenstående metode reducerer til Simpsons regel, hvilket stemmer overens med, at RK4 er en fjerdeordensmetode.

### Fejlestimering i RK4

I forbindelse med de numeriske integrationsmetoder sammenlignede vi fejlen ved forskellige skridtlængder og fandt formler for estimering af fejlen. Noget tilsvarende lader sig gøre for RK4. Hvis vi lader $y_n^h$ betegne RK4-approksimationen af $y(x_n)$ for $x_n = x_0 + nh$ med skridtlængde $h$ og lader $\varepsilon_n^h$ betegne fejlen i denne værdi, så er

$$\varepsilon_{2n}^h \approx \frac{1}{15}(y_{2n}^h - y_n^{2h}),$$

hvor vi bemærker, at grundet de forskellige skridtlængder approksimerer $y_{2n}^h$ og $y_n^{2h}$ samme punkt, nemlig $y(x_0 + 2nh)$.

### Runge-Kutta-Fehlberg

I stedet for at estimere fejlen ved at sammenligne forskellige skridtlængder, kan man fejlestimere ved at sammenligne Runge-Kutta-metoder af forskellig orden. En snedig måde, hvor udregningerne fra en 5.-ordensmetode genanvendes i en 4.-ordensmetode, kaldes Runge-Kutta-Fehlberg eller blot RKF og ser ud som følger:

$$y_{n+1} = y_n + \gamma_1 k_1 + \cdots + \gamma_6 k_6$$

og

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + \tilde{\gamma}_1 k_1 + \cdots + \tilde{\gamma}_5 k_5,$$

hvor

$$\begin{pmatrix}\gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 & \gamma_4 & \gamma_5 & \gamma_6\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{16}{135} & 0 & \frac{6656}{12825} & \frac{28561}{56430} & \frac{-9}{50} & \frac{2}{55}\end{pmatrix}$$

og

$$\begin{pmatrix}\tilde{\gamma}_1 & \tilde{\gamma}_2 & \tilde{\gamma}_3 & \tilde{\gamma}_4 & \tilde{\gamma}_5\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{25}{216} & 0 & \frac{1408}{2565} & \frac{2197}{4104} & \frac{-1}{5}\end{pmatrix}$$

mens

$$\begin{aligned}
&k_1 = hf(x_n, y_n),\\
&k_2 = hf(x_n + \tfrac{1}{4}h, y_n + \tfrac{1}{4}k_1),\\
&k_3 = hf(x_n + \tfrac{3}{8}h, y_n + \tfrac{3}{32}k_1 + \tfrac{9}{32}k_2),\\
&k_4 = hf(x_n + \tfrac{12}{13}, y_n + \tfrac{1932}{2197}k_1 - \tfrac{7200}{2197}k_2 + \tfrac{7296}{2197}k_3),\\
&k_5 = hf(x_n + h, y_n + \tfrac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \tfrac{3680}{513}k_3 - \tfrac{845}{4104}k_4)
\end{aligned}$$

og

$$k_6 = hf(x_n + \tfrac{h}{2}, y_n - \tfrac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \tfrac{3544}{2565}k_3 + \tfrac{1859}{4104}k_4 - \tfrac{11}{40}k_5).$$

som sagt var idéen, at man får et fejlestimat næsten forærende:

$$\varepsilon_{n+1} \approx y_{n+1} - \tilde{y}_{n+1} = \tfrac{1}{360}k_1 - \tfrac{128}{4275}k_3 - \tfrac{2197}{75240}k_4 + \tfrac{1}{50}k_5 + \tfrac{2}{55}k_6.$$

## 1.5 Baglæns Euler-metode

Den baglæns Euler-metode har vi næsten allerede stiftet bekendtskab med i (2), som mere eller mindre er gennemsnittet af Euler-metoden og den baglæns udgave. Med andre ord er den baglæns Euler-metode:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}).$$

Men hov, råbes der igen. Den ønskede værdi indgår jo på begge sider af lighedstegnet! Jep, det er rigtigt, og metoden er dermed *implicit*, og det afhænger af $f$, hvor svært det er at løse ligningen for $y_{n+1}$. Hvis ODE'en er lineær, er det simpelt. Den baglæns Euler-metode har samme orden som Euler-metoden, men fordelen ved den baglæns Euler-metode ligger et andet sted. Visse typer af ODE'er er specielt sensitive over for lange skridtlængder, navnligt gælder dette masse-fjeder-systemer med stive fjedre, og disse ODE'er kaldes derfor *stive* ODE'er. Det fine ved den baglæns Euler-metode er, at den er specielt anvendelig for stive ODE'er, som vi vil se et eksempel på om lidt.

## 1.6 Eksempler

**Eksempel 1.1** (Example 1 i bogen side 900)**.** Vi vil anvende Heuns metode med $h = 0.2$ på IVP'et $y' = x + y$ med $y(0) = 0$. Som i de øvrige Runge-Kutta-metoder, forkorter vi

$$k_1 = hf(x_n, y_n) \qquad \text{og} \qquad k_2 = hf(x_n + h, y_n + k_1),$$

hvilket i det konkrete tilfælde bliver til

$$k_1 = 0.2(x_n + y_n) \qquad \text{og} \qquad k_2 = 0.2(x_n + 0.2 + y_n + 0.2(x_n + y_n)).$$

Heuns metode siger så, at

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) = y_n + 0.22(x_n + y_n) + 0.02,$$

hvilket opsummeret i en tabel ser ud som følger for $n = 0, 1, \ldots, 5$.

| $n$ | $x_n$ | $y_n$ | Eksakt løsning | Fejl i Heuns metode | Fejl i Euler-metoden |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0.0 | 0.0000 | 0.0000... | 0.0000 | 0.000 |
| 1 | 0.2 | 0.0200 | 0.0214... | 0.0014 | 0.021 |
| 2 | 0.4 | 0.0884 | 0.0918... | 0.0034 | 0.052 |
| 3 | 0.6 | 0.2158 | 0.2221... | 0.0063 | 0.094 |
| 4 | 0.8 | 0.4153 | 0.4255... | 0.0102 | 0.152 |
| 5 | 1.0 | 0.7027 | 0.7183... | 0.0156 | 0.230 |

Det ses, at fejlen er mere end en størrelsesorden mindre for Heuns end for Euler-metoden.

**Eksempel 1.2** (Example 2 i bogen side 903)**.** Vi vil anvende RK4 på samme problem som ovenfor og med samme skridtlængde. Vi får nu fra (3):

$$\begin{aligned}
&k_1 = 0.2(x_n + y_n),\\
&k_2 = 0.2(x_n + 0.1 + y_n + 0.1(x_n + y_n)),\\
&k_3 = 0.2(x_n + 0.1 + y_n + 0.1(x_n + 0.1 + y_n + 0.1x_n + 0.1y_n))
\end{aligned}$$

og

$$k_4 = 0.2(x_n + 0.2 + y_n + 0.2(x_n + 0.1 + y_n + 0.1x_n + 0.01 + 0.1y_n + 0.01x_n + 0.01y_n)).$$

Igen smækker vi de første $5$ iterationer i en tabel.

| $n$ | $x_n$ | $y_n$ | Fejl |
|---|---|---|---|
| 0 | 0.0 | 0.000000 | 0.000000 |
| 1 | 0.2 | 0.021400 | 0.000003 |
| 2 | 0.4 | 0.091818 | 0.000007 |
| 3 | 0.6 | 0.222107 | 0.000011 |
| 4 | 0.8 | 0.425521 | 0.000020 |
| 5 | 1.0 | 0.718251 | 0.000031 |

Sammenligner vi med Heuns metode, ser vi, at fejlen er ca. tre størrelsesordener mindre.

**Eksempel 1.3** (Example 4 bogen side 906)**.** IVP'et $y'(x) = f(x, y(x)) = -20y(x) + 20x^2 + 2x$ med $y(0) = 1$ har løsningen $y(x) = e^{-20x} + x^2$ (sæt ind og tjek). Vi vil nu løse problemet vha. den baglæns Euler-metode og sammenligne med den almindelige og RK4 for hhv. at demonstrere metoden og vise, at den klarer dette stive problem uden at blive ustabil selv for $h$ hvor de andre er.

Med udgangspunkt i

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) = y_n + h(-20y_{n+1} + 20x_{n+1}^2 + 2x_{n+1})$$

fås

$$y_{n+1} = \frac{y_n + 20hx_{n+1}^2 + 2hx_{n+1}}{1+20h} = \frac{y_n + 20h(x_n+h)^2 + 2h(x_n+h)}{1+20h}.$$

I følgende tabel er resultatet af de tre metoder med hver to forskellige værdier af $h$ angivet.

| $x$ | Baglæns Euler $h = 0.05$ | Baglæns Euler $h = 0.20$ | Almindelig Euler $h = 0.05$ | Almindelig Euler $h = 0.10$ | RK4 $h = 0.10$ | RK4 $h = 0.20$ | Eksakt |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.0 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.1 | 0.262 | | 0.008 | −1.000 | 0.345 | | 0.145 |
| 0.2 | 0.105 | 0.248 | 0.038 | 1.040 | 0.153 | 5.093 | 0.058 |
| 0.3 | 0.108 | | 0.088 | −0.920 | 0.129 | | 0.092 |
| 0.4 | 0.166 | 0.210 | 0.158 | 1.160 | 0.175 | 25.48 | 0.160 |
| 0.5 | 0.253 | | 0.248 | −0.760 | 0.257 | | 0.250 |
| 0.6 | 0.363 | 0.378 | 0.358 | 1.360 | 0.364 | 127.0 | 0.360 |
| 0.7 | 0.493 | | 0.488 | −0.520 | 0.493 | | 0.490 |
| 0.8 | 0.643 | 0.652 | 0.638 | 1.640 | 0.643 | 634.0 | 0.640 |
| 0.9 | 0.813 | | 0.808 | −0.200 | 0.813 | | 0.810 |
| 1.0 | 1.003 | 1.010 | 0.998 | 2.000 | 1.003 | 3168 | 1.000 |

Det ses, at den almindelige Euler-metode med $h = 0.10$ og ikke mindst RK4 med $h = 0.20$ opfører sig helt tosset. Dette illustrerer *stivheden* i ODE'en, og samtidig den baglæns Euler-metodes overlegne håndtering af dette problem: selv for $h = 0.20$ er resultaterne rimelige, omend lige lovligt store omkring løsningens minimum.