

Matematisk modellering og numeriske metoder

Lektion 18

Morten Grud Rasmussen

29. november 2016

1 Numeriske metoder til førsteordens ODE'er

1.1 Euler-metoden

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

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

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

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

for et passende $\xi \in [x, x+h]$. Den lokale diskretiseringsfejl 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 ξ (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 "lokal 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 $f(x_0 + h, y(x_0 + h))$:

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

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 sidsygt (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

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

og siden sættes

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

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-metoden," "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

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

hvor

$$k_1 = hf(x_n, y_n), \tag{3a}$$

$$k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_1), \tag{3b}$$

$$k_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_2), \tag{3c}$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3). \tag{3d}$$

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 ε_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:

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

og

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

hvor

$$(\gamma_1 \quad \gamma_2 \quad \gamma_3 \quad \gamma_4 \quad \gamma_5 \quad \gamma_6) = \left(\frac{16}{135} \quad 0 \quad \frac{6656}{12825} \quad \frac{28561}{56430} \quad \frac{-9}{50} \quad \frac{2}{55} \right)$$

og

$$(\tilde{\gamma}_1 \quad \tilde{\gamma}_2 \quad \tilde{\gamma}_3 \quad \tilde{\gamma}_4 \quad \tilde{\gamma}_5) = \left(\frac{25}{216} \quad 0 \quad \frac{1408}{2565} \quad \frac{2197}{4104} \quad \frac{-1}{5} \right)$$

mens

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

og

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

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

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

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. 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

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

hvilket i det konkrete tilfælde bliver til

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

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 $n = 0, 1, \dots, 5$.

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. Vi vil anvende RK4 på samme problem som ovenfor og med samme skridtlængde. Vi får nu fra (3):

$$k_1 = 0.2(x_n + y_n),$$

$$k_2 = 0.2(x_n + 0.1 + y_n + 0.1(x_n + y_n)),$$

$$k_3 = 0.2(x_n + 0.1 + y_n + 0.1(x_n + 0.1 + y_n + 0.1x_n + 0.1y_n))$$

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. 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.