Matematisk modellering og numeriske metoder

Lektion 19

Morten Grud Rasmussen

9. december 2016

1 Mangeskridtsmetoder til løsning af ODE'er af første orden

1.1 Adams-Bashforth-metoder

Som tidligere betragter vi et begyndelsesværdiproblem af typen

$$y'(x) = f(x, y(x)) \qquad \text{med} \qquad y(x_0) = y_0. \tag{1}$$

De numeriske metoder til løsning af problemer som ovenstående, vi hidtil har set på, har været såkaldte *enkeltskridtsmetoder*, idet de har baseret sig på at udregne næste skridt ud fra det foregående, hvilket har den fordel, at man kan benytte sig af samme fremgangsmåde fra begyndelsespunktet og frem. Adams-Bashforth-metoder går ud på at udnytte, at man med kendskab til flere tidligere skridt kan lave en polynomiumsapproksimation p_k af funktionen $x \mapsto f(x, y(x)) \in \mathbb{R}$, som jo afhænger af den ukendte funktion y. Her angiver k graden af polynomiet. Integrerer vi ODE'en i (1) over $[x_n, x_{n+1}]$, får vi

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))\,\mathrm{d}x \approx \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_k(x)\,\mathrm{d}x. \tag{2}$$

Hvis vi eksempelvis antager, at vi kender de fire punkter

$$y_n \approx y(x_n), \quad y_{n-1} \approx y(x_{n-1}), \quad y_{n-2} \approx y(x_{n-2}) \quad \text{og} \quad y_{n-3} \approx y(x_{n-3})$$

og dermed

$$\begin{aligned} f_n &= f(x_n, y_n) \approx f(x_n, y(x_n)), \\ f_{n-1} &= f(x_{n-1}, y_{n-1}) \approx f(x_{n-1}, y(x_{n-1})), \\ f_{n-2} &= f(x_{n-2}, y_{n-2}) \approx f(x_{n-2}, y(x_{n-2})), \end{aligned}$$

og

$$f_{n-3} = f(x_{n-3}, y_{n-3}) \approx f(x_{n-3}, y(x_{n-3})),$$

hvor som sædvanlig $x_n = x_0 + nh$, så kan vi approksimere $f(x, y(x))$ med et tredjegradspolynomium p_3 gennem (x_i, f_i) for $i = n-3, n-2, n-1, n$.

Efter en omgang beregningsmæssig lirumlarum når man frem til

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_3(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

og dermed vha. (2)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}),$$

som kan vises at have lokal diskretiseringsfejl af orden 5 og dermed global diskretiseringsfejl af orden 4.

1.2 Adams-Moulton-metoder

Som i skridtet fra Euler-metoden til den baglæns Euler-metode kan man ændre lidt i en Adams-Bashforth-metode og få en forbedret metode for den pris, at man går fra en eksplicit til en implicit metode. Vi skal altså i stedet for at bruge punkterne x_i for $i = n-3, n-2, n-1, n$ tage udgangspunkt i x_i for $i = n-2, n-1, n, n+1$. Efter lidt fiksfakseri, hvor vi integrerer tredjegradspolynomiet $\tilde{p}_3$ gennem (x_i, f_i) for $i = n-2, n-1, n, n+1$ over intervallet $[x_n, x_{n+1}]$ fås

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}), \tag{3}$$

hvor $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$ og de andre f_i'er er som før. Denne formel kaldes en *Adams-Moulton-formel* og er som sagt implicit, idet y_{n+1} også indgår på højresiden gennem f_{n+1}. Er f en tilpas rar funktion, kan man nu isolere y_{n+1}, men er dette ikke muligt (eller hvis det er for besværligt), så genanvender vi bare tricket fra Heuns og lignende metoder, hvor vi erstatter $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$ med $\tilde{f}_{n+1} = f(x_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})$, hvor $\tilde{y}_{n+1}$ er en *prædiktor*. Normalt anvendes i udgangspunktet prædiktoren

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

fra Adams-Bashforth-metoden. Da vi kan estimere fejlen i det $(n+1)$'ste skridt ε_{n+1} ved

$$\varepsilon_{n+1} \approx \frac{1}{15}(y_{n+1} - \tilde{y}_{n+1}),$$

kan man, hvis fejlen i y_{n+1} estimeres til at være uacceptabelt stor, bruge y_{n+1} som en *ny* prædiktor $\tilde{y}_{n+1}$ og genindsætte i (3). Denne proces kan gentages, indtil fejlen estimeres til at være under en passende valgt tolerance. Denne *prædiktor-korrektor*-metode kaldes *Adams-Moulton-metoden af fjerde orden*. Adams-Moulton-metoden er generelt meget mere præcis end en Adams-Bashforth-metode af samme orden og er desuden numerisk stabil.

1.3 Eksempel

Eksempel 1.1. Vi vil gentage succesen fra sidste lektion med begyndelsesværdiproblemet $y'(x) = x + y(x)$ og $y(0) = 0$, blot hvor vi anvender Adams-Moulton-metoden af fjerde orden, og skridtlængden sætter vi til $h = 0.2$. Det viser sig fluks at være umuligt, idet vi kun kender $y_0 = 0$. Vi finder derfor y_1, y_2 og y_3 vha. RK4 og kan nu anvende Adams-Moulton-metoden. Det kan ses af nedenstående tabel, at præcisionen øges betragteligt af korrektionen i forhold til prædiktoren.

n	x_n	RK4-opstart	Værdi af prædiktor	Korrigeret værdi	Eksakt værdi	Fejl
0	0.0	0.000000			0.000000	0.000000
1	0.2	0.021400			0.021403	0.000003
2	0.4	0.091818			0.091825	0.000007
3	0.6	0.222107			0.222119	0.000012
4	0.8		0.425361	0.425529	0.425541	0.000012
5	1.0		0.718066	0.718270	0.718282	0.000012
6	1.2		1.119855	1.120106	1.120117	0.000011
7	1.4		1.654885	1.655191	1.655200	0.000009
8	1.6		2.352653	2.353026	2.353032	0.000006
9	1.8		3.249190	3.249646	3.249647	0.000001
10	2.0		4.388505	4.389062	4.389056	−0.000006

2 Metoder til systemer af første orden og ODE'er af højere orden

2.1 Repetition af systemer af ODE'er

Vi genkalder fra tidligere, hvad et system af ODE'er af første orden er, og hvordan en ODE af n'te orden kan konverteres til et system af ODE'er af første orden. Lad $Y = \begin{pmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \end{pmatrix}$, være en vektorfunktion. Da er

$$Y'(x) = F(x, Y(x)) \tag{4}$$

et *system af ODE'er af første orden*, evt. med *begyndelsesbetingelse* $Y(x_0) = Y_0 = \begin{pmatrix} y_{00} & y_{10} & \cdots & y_{n0} \end{pmatrix}$. Et *begyndelsesværdiproblem af n'te orden*

$$y^{(n)} = f(x, y(x), y'(x), \ldots, y^{(n-1)}) \qquad \text{med} \qquad y(x_0) = K_1, y'(x_0) = K_2, \ldots, y^{(n-1)}(x_0) = K_n$$

kan omskrives til et system af ODE'er af første orden med begyndelsesbetingelse

$$Y(x_0) = \begin{pmatrix} y_1(x_0) & y_2(x_0) & \cdots & y_n(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_1 & K_2 & \cdots & K_n \end{pmatrix}$$

ved at skrive

$$y_1 = y, \quad y_2 = y', \quad \cdots, \quad y_n = y^{(n-1)}$$

og sætte

$$\begin{aligned} y_1' &= y_2 \\ y_2' &= y_3 \\ &\vdots \\ y_{n-1}' &= y_n \\ y_n' &= f(x, y_1, \ldots, y_n), \end{aligned}$$

dvs. systemet er på formen (4) med $Y = \begin{pmatrix} y_1 & \cdots & y_n \end{pmatrix}$, $F = \begin{pmatrix} f_1 & \cdots & f_n \end{pmatrix}$ og $f_i(x, y_1, \ldots, y_n) = y_{i+1}$ for $i = 1, \ldots, n-1$ og $f_n(x, y_1, \ldots, y_n) = f(x, y_1, y_2, \ldots, y_n)$.

2.2 Euler-metoden

Euler-metoden kan anvendes nærmest uændret på systemer, idet vi nu blot sætter

$$Y_{n+1} = Y_n + hF(x_n, Y_n),$$

med eneste forskel, at der er tale om en følge af vektorer. Men da en ODE af n'te orden kan skrives som et system af ODE'er af første orden, kan vi altså også anvende Euler-metoden på systemer af højere orden.

Eksempel 2.1. Vi ser på følgende begyndelsesværdiproblem af anden orden

$$y''(x) + 2y'(x) + 0.75y(x) = 0 \qquad \text{med} \qquad y(0) = 3 \qquad \text{og} \qquad y'(0) = -2.5.$$

Dette svarer til systemet

$$\begin{aligned} y_1' &= y_2, & y_1(0) &= 3, \\ y_2' &= -2y_2 - 0.75y_1, & y_2(0) &= -2.5. \end{aligned}$$

Euler-metoden bliver altså til

$$\begin{aligned} y_{1,n+1} &= y_{1,n} + hy_{2,n}, & y_{1,0} &= 3, \\ y_{2,n+1} &= y_{2,n} + h(-2y_{2,n} - 0.75y_{1,n}), & y_{2,0} &= -2.5. \end{aligned}$$

Det er altså ikke væsensforskelligt fra tilfældet med én ODE af første orden, bortset fra, at der nu er to følger, som er koblede.

2.3 Runge-Kutta-metoder

Ligesom med Euler-metoden, som jo er den simpleste Runge-Kutta-metode, kan de andre Runge-Kutta-metoder nemt oversættes til systemer. Vi eksemplificerer med en oversættelse af RK4-metoden. Begyndelsesbetingelsen lyder

$$Y(x_0) = Y_0$$

og de fire prædiktorer er

$$\begin{aligned} K_1 &= hF(x_n, Y_n), \\ K_2 &= hF(x_n + \tfrac{1}{2}h, Y_n + \tfrac{1}{2}K_1), \\ K_3 &= hF(x_n + \tfrac{1}{2}h, Y_n + \tfrac{1}{2}K_2) \end{aligned}$$

og

$$K_4 = hF(x_n + h, Y_n + k_3).$$

Med denne notation bliver RK4 for systemer

$$Y_{n+1} = Y_n + \tfrac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4).$$

2.4 Runge-Kutta-Nyström-metoder

Hvis man tager en ODE af anden orden $y''(x) = f(x, y(x), y'(x))$ med tilhørende begyndelsesbetingelser $y(x_0) = y_0$ og $y'(x_0) = y'_0$, omformulerer til et system, anvender en Runge-Kutta-metode, og oversætter tilbage til den oprindelige ODE af anden orden, så får man en såkaldt Runge-Kutta-Nyström-metode. Et populært eksemplar er følgende.

$$\begin{aligned} k_1 &= \tfrac{1}{2}hf(x_n, y_n, y'_n), & k &= \tfrac{1}{2}h(y'_n + \tfrac{1}{2}k_1), \\ k_2 &= \tfrac{1}{2}hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + k, y'_n + k_1), & & \\ k_3 &= \tfrac{1}{2}hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + k, y'_n + k_2), & l &= h(y'_n + k_3) \end{aligned}$$

og

$$k_4 = \tfrac{1}{2}hf(x_n + h, y_n + l, y'_n + 2k_3)$$

hvor vi bemærker, at vi omgår vektorformuleringen, men til gengæld har både k_i'erne og l og k i anden søjle til at holde styr på de to "dimensioner." For at finde approksimationen af y_{n+1} af $y(x_{n+1})$ i punktet $x_{n+1} = x_0 + (n+1)h$ sættes de fire k_i'er ind i

$$y_{n+1} = y_n + h(y'_n + \tfrac{1}{3}(k_1 + k_2 + k_3)),$$

hvor

$$y'_{n+1} = y'_n + \tfrac{1}{3}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

approksimerer $y'(x_{n+1})$.

I specialtilfældet $y''(x) = f(x, y(x))$, altså hvor f er uafhængig af y', kan man omgå l og k og får

$$\begin{aligned} k_1 &= \tfrac{1}{2}hf(x_n, y_n), \\ k_2 &= \tfrac{1}{2}hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}h(y'_n + \tfrac{1}{2}k_1)) = k_3, \\ k_4 &= \tfrac{1}{2}hf(x_n + h, y_n + h(y'_n + k_2), \\ y_{n+1} &= y_n + h(y'_n + \tfrac{1}{3}(k_1 + 2k_2)) \end{aligned}$$

og

$$y'_{n+1} = y'_n + \tfrac{1}{3}(k_1 + 4k_2 + k_4).$$

2.5 Baglæns Euler for systemer

Baglæns Euler kan naturligvis også anvendes på systemer, og igen er formen den samme med eneste forskel værende, at der indgår vektorer i stedet for tal.

$$Y_{n+1} = Y_n + hF(x_{n+1}, Y_{n+1}).$$

Som tidligere for baglæns Euler gælder det, at metoden er implicit, og vi skal altså kunne løse ligningen for Y_{n+1} for at få en eksplicit metode ud af det. Om dette er muligt, afhænger af F, ligesom det før afhang af f. Metodens anvendelighed er tæt knyttet til det faktum, at den er stabil selv for *stive* systemer.

Eksempel 2.2. Vi vil løse begyndelsesværdiproblemet

$$y''(x) + 11y'(x) + 10y(x) = 10x + 11 \qquad \text{med} \qquad y(0) = 2 \qquad \text{og} \qquad y'(0) = -10.$$

Problemet kan naturligvis løses eksakt, men vi vil illustrere, at det er et stift system, som for store skridtlængder h fører til ustabilitet for direkte metoder som eksempelvis RK4, mens det for baglæns Euler er stabilt for alle værdier af h, omend fejlen vokser som funktion af h.

Først skal vi konvertere ODE'en til et system af første orden i $y_1 = y$ og $y_2 = y'$:

$$\begin{aligned} y_1'(x) &= y_2(x), & y_1(0) &= 2, \\ y_2'(x) &= -10y_1(x) - 11y_2(x) + 10x + 11, & y_2(0) &= -10. \end{aligned}$$

Baglæns Euler giver nu

$$\begin{aligned} y_{1,n+1} &= y_{1,n} + hy_{2,n+1}, & y_{1,0} &= 2, \\ y_{2,n+1} &= y_{2,n} + h(-10y_{1,n+1} - 11y_{2,n+1} + 10x_{n+1} + 11), & y_{2,0} &= -10. \end{aligned}$$

Løses ligningssystemet for $y_{1,n+1}$ og $y_{2,n+1}$ (med $x_{n+1} = x_n + h$) fås

$$\begin{aligned} y_{1,n+1} &= \frac{1}{1 + 11h + 10h^2}\big((1 + 11h)y_{1,n} + hy_{2,n} + 10h^2x_n + 11h^2 + 10h^3\big), \\ y_{2,n+1} &= \frac{1}{1 + 11h + 10h^2}\big(-10hy_{1,n} + y_{2,n} + 10hx_n + 11h + 10h^2\big). \end{aligned}$$

Tabellen nedenfor opsummerer resultaterne af at anvende baglæns Euler, Euler og RK4 for forskellige værdier af skridtlængden h. Det ses, at baglæns Euler er stabil for begge (og faktisk for alle) værdier af h, mens Euler-metoden er stabil for $h = 0.1$ men ustabil for $h = 0.2$, og RK4 er stabil for $h = 0.2$ men ustabil for $h = 0.3$.

x	Baglæns Euler $h = 0.2$	Baglæns Euler $h = 0.4$	Almindelig Euler $h = 0.1$	Almindelig Euler $h = 0.2$	RK4 $h = 0.2$	RK4 $h = 0.3$	Eksakt
0.0	2.00000	2.00000	2.00000	2.00000	2.00000	2.00000	2.00000
0.2	1.36667		1.01000	0.00000	1.35207		1.15407
0.4	1.20556	1.31429	1.56100	2.04000	1.18144		1.08864
0.6	1.21574		1.13144	0.11200	1.18585	3.03947	1.15129
0.8	1.29460	1.35020	1.23047	2.20960	1.26168		1.24966
1.0	1.40599		1.34868	0.32768	1.37200		1.36792
1.2	1.53627	1.57243	1.48243	2.46214	1.50257	5.07569	1.50120
1.4	1.67954		1.62877	0.60972	1.64706		1.64660
1.6	1.83272	1.86191	1.78530	2.76777	1.80205		1.80190
1.8	1.99386		1.95009	0.93422	1.96535	8.72329	1.96530
2.0	2.16152	2.18625	2.12158	3.10737	2.13536		2.13534