Simulering

Kursmöte 2

Lars Eriksson

Universtitetslektor (Associate Professor)
Institutionen för systemteknik
Linköpings universitet

Lösningar och approximationer

- IVP

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y}' &= \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y}), \qquad 0 \le t \le b \\ \boldsymbol{y}(0) &= \boldsymbol{c} \end{aligned}$$

- Lösning till IVP

$$\boldsymbol{y}(t)$$

- Approximation på en mesh

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \ldots < t_N = b$$

$$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_N$$

- Steglängden i n:te steget

$$h_n = t_n - t_{n-1}$$

De tre enklaste metoderna

- Euler framåt

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{y}_{n-1} + h_n \boldsymbol{f}(t_{n-1}, \boldsymbol{y}_{n-1})$$

  Explicit metod
- Euler bakåt

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{y}_{n-1} + h_n \boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}_n)$$

  Implicit metod
- Trapetsmetoden

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{y}_{n-1} + \frac{h_n}{2} \left(\boldsymbol{f}(t_{n-1}, \boldsymbol{y}_{n-1}) + \boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}_n) \right)$$

  Implicit metod (symmetrisk)

I kommande analyserna av metoderna antas att $\boldsymbol{f}$ är tillräckligt många gånger kontinuerligt deriverbar.

Lokalt och globalt fel hos en metod

- En metod kan uttryckas med hjälp av en differensoperator $\mathcal{N}_h$

$$\mathcal{N}_h \boldsymbol{y}_h(t_n) = 0, \text{ med } \boldsymbol{y}_0 = \boldsymbol{c}$$

- T.ex. Euler framåt

$$\mathcal{N}_h \boldsymbol{y}_h(t_n) = \frac{\boldsymbol{y}_n - \boldsymbol{y}_{n-1}}{h_n} - \boldsymbol{f}(t_{n-1}, \boldsymbol{y}_{n-1})$$

- Lokalt trunkeringsfel
  Felet när operatorn appliceras på den exakta lösningen

$$d_n = \mathcal{N}_h \boldsymbol{y}(t_n)$$

- Globalt fel

$$\boldsymbol{e}_n = \boldsymbol{y}_n - \boldsymbol{y}(t_n)$$

Konsistens hos en metod

- Konsistens – noggrannhet
- Differensoperatorn approximerar differential operatorn
- Noggrannhet $O(h^p)$ – ordning p
- Konsistens – Lokal egenskap

Konvergens

- Låt meshen uppfylla
$$h = \max_{1 \le n \le N} h_n$$
och anta att Nh är begränsad oberoende av N. (Detta innebär att meshen inte enbart kan förfinas lokalt).
- En metod är *konvergent av ordning* p om det globala felet $\boldsymbol{e}_n = \boldsymbol{y}_n - \boldsymbol{y}(t_n)$ med $\boldsymbol{e}_0 = 0$, uppfyller
$$\boldsymbol{e}_n = O(h^p)$$
- Konvergens – Global egenskap

0-Stabilitet

- Differensmetoden $\mathcal{N}_h$ är 0-stabil om det finns positiva konstanter h_0 och K så att
$$|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{z}_n| \le K \left\{ |\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{z}_0| + \max_{1 \le j \le N} |\mathcal{N}_h \boldsymbol{x}_h(t_j) - \mathcal{N}_h \boldsymbol{z}_h(t_j)| \right\}$$
gäller för godtyckliga mesh-funktioner x_h, z_h och $h \le h_0$.
- Mäter hur en störning påverkar en metods resultat.
- Ger också information om hur metoden beter sig när $h \to 0$.
- (0-Stabilitet kallas ibland D-stabilitet)

Konvergens igen

- Konvergens är egenskapen som vi vill ha.
- Sats:
$$\text{konsistens} + \text{0-stabilitet} \;\Rightarrow\; \text{konvergens}$$
Dessutom om metoden är konsistent av ordning p så är den också konvergent av ordning p
- Konsistens och konvergens hänger samman mha 0-stabilitet
- (Motiverar införda begrepp)

Testekvationen

- Testekvationen
$$y' = \lambda\, y, \qquad \lambda \in \mathbb{C}$$
- När man applicerar en numerisk metod på ett tidskontinuerligt system så får man ett tidsdiskret system
- Bestämning av den absoluta stabilitetsregionen för metoden
- En numerisk metod kan ses som en transformation mellan tidskontinuerliga och tidsdiskreta system

Absolut stabilitet

- Vilkoret för absolut stabilitet
$$|y_n| \le |y_{n-1}|$$
(jämför med absolutkonvergens från analysen)
- Applicera en metod med steglängd h på testekvationen
- Regionen i komplexa talplanet $z = \lambda\, h$ där
$$|y_n| \le |y_{n-1}|$$
kallas för absoluta stabilitetsregionen
- Regioner för:
  - Euler framåt $\quad |1 + h\,\lambda| \le 1$
  - Euler bakåt $\quad \frac{1}{|1-h\,\lambda|} \le 1$
  - Trapetsmetoden $\quad \left|\frac{2+\lambda\, h}{2-\lambda\, h}\right| \le 1$

Implementering av metoderna

- Test på: $y' = -10\, y, \qquad y(0) = 1$
- Stabilitetsområdet
- Globalt fel
- Ordning

	Euler f			Euler b			Trapez.		
h	t	e_n	p	t	e_n	p	t	e_n	p
1	0	9		0	0.091		0	0.67	
0.1	10	4.5e-005	5.3	10	0.00093	2.0	10	2.8e-005	4.4
0.01	90	1.9e-005	0.4	50	2.7e-005	1.5	70	3.8e-007	1.9
0.001	230	2.2e-006	0.9	501	2.3e-006	1.1	701	3.8e-009	2.0
0.0001	1893	2.3e-007	1.0	5067	2.3e-007	1.0	7100	3.8e-011	2.0
1e-005	18978	1.8e-008	1.1	49781	2.4e-008	1.0	75789	4.5e-009	-2.1
1e-006	187209	1.8e-009	1.0	427295	1.3e-009	1.3	630807	4.5e-010	1.0

A-Stabilitet

- Det vore bra om metoden bevarar problemets egenskaper.
- Om problemet är stabilt så är det bra om även metoden ger en stabil lösning.
- A-stabilitet:
Om absoluta stabilitetsområdet innefattar vänster halvplan så sägs metoden vara A-stabil.

Stabilitetsbegrepp och metoder

Exemplen visar två *problem* med A-stabilitet.

- Cirkelexemplet visar koppling mellan problem och stabilitetsområdet.
  Välja rätt metod för problemet.
- Exemplet med regulator mot $cos(t)$ visar också att vissa metoder med stort stabilitetsområde inte alltid ger det förväntade beteendet.

Styva problem

En definition:
Ett IVP är styvt i ett intervall [0,b] om steglängden som behövs för att behålla stabiliteten med Euler framåt är mycket mindre än den som behövs för att ha en noggran representation av lösningen.

- Styhet beror på
  - differential ekvationen
  - initial värden
  - tidsskala
  - metodens absoluta stabilitetsregion

Stiff decay, stiff limit

- Betrakta systemet
  $$y' = \lambda(y - g(t))$$
  där $Re(\lambda) << 0$.
- Systemet består av en snabb mod och en långsam mod.
- Om metoden har
  $$\lim_{h_n\, Re(\lambda) \to -\infty} (y_n - g(t_n)) = 0$$
  så säger man att den har "stiff decay".
- Exempel visar tydligt egenskapen.

Icke mjuka problem

- Exempel: Studsande boll
- Egenskap från teorin:
  Fortsätting till randen
- Växlingsekvation och ekvationslösare för att hitta rätt växlingspunkt
- Ej nödvändigtvis tillräckligt att förlita sig på steglängdsadaptering

Enstegsmetoder

- Taylorapproximation, approximerar funktionen mha derivatan
- Approximera derivatan med funktionsevalueringar.
- Runge-Kuttametoder
- Hittills har vi jobbat med tre RK-metoder.
- Har också sett att ordningen verkar förbättra prestanda.

Grundläggande metoder

Taylors metoder

- Känner $f(t, y)$ och dess derivator
- Taylorutveckla $y(t)$ i ett steg med längd h.

Runge Kutta metoder

- Approximera derivatorna med hjälp av funktionsevalueringar

$$\begin{aligned} Y_i &= y_{n-1} + h \textstyle\sum_j a_{ij} f(t_{n-1} + c_j h, Y_j), \qquad 1 \le i \le s \\ y_n &= y_{n-1} + h \textstyle\sum_j b_j f(t_{n-1} + c_j h, Y_j) \end{aligned}$$

- En s-stegs metod

Runge-Kutta metoder

$$\begin{aligned} Y_i &= y_{n-1} + h \textstyle\sum_j a_{ij} f(t_{n-1} + c_j h, Y_j), \qquad 1 \le i \le s \\ y_n &= y_{n-1} + h \textstyle\sum_j b_j f(t_{n-1} + c_j h, Y_j) \end{aligned}$$

Metoden i tablåform (Butcher (1964))

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,s} \\ c_2 & a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s,1} & a_{s,2} & \cdots & a_{s,s} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array}$$

Explicit metod om $a_{ij} = 0$ för $i \le j$.

Maximal uppnåbar ordning hos s-stegs Explicit RK (ERK) metoder

steg	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
ordning	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7	8

Ordning hos Runge-Kutta metoder

- Numerisk metod y_n bestäms av y_{n-1}.

$$\begin{aligned} Y_i &= y_{n-1} + h \textstyle\sum_j a_{ij} f(t_{n-1} + c_j h, Y_j), \qquad 1 \le i \le s \\ y_n &= y_{n-1} + h \textstyle\sum_j b_j f(t_{n-1} + c_j h, Y_j) \end{aligned}$$

- Betrakta $\hat{y}(t)$ som är lösningen till

$$\hat{y}' = f(t, \hat{y}), \qquad \hat{y}(t_{n-1}) = y_{n-1}$$

- Jämför Taylorutvecklingarna av y_n och $\hat{y}(t_n)$ runt t_{n-1}.
- Identifiera termerna i Taylorutvecklingarna och sätt dem till lika upp till $O(h^p)$
- Ordning p
- Vad betyder villkoren? Extra villkor som underlättar $c_i = \sum_j a_{ij}$ –Y_i får *rätt* värden i varje inre steg för $y' = 1$.

Ordning hos Runge-Kutta metoder

- Metoderna innehåller många parametrar/frihetsgrader
- Antalet villkor som man måste ta hänsyn till ökar med ordningen

ordning	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
# villkor	1	2	4	8	17	37	85	200	486	1205

- Kan kolla vilken ordning en metod har
- Kan *ej* designa en metod
- Det finns också flera familjer av samma ordning...

Feluppskattning och steglängdsreglering

- Vill ha en viss noggrannhet hos lösningen.
- Globala felet är svårt, lokala felet är lättare.
- Står i t_{n-1} skall välja h_n i nästa steg.
- Reglerar steglängden så att lokala felet är konstant under integrationen

$$|\boldsymbol{l}_k| \approx \text{ETOL}$$

  väljer ofta $|\boldsymbol{l}_k| \leq C \cdot \text{ETOL}$ med $C < 1$ för att säkerställa feltoleransen.
- Komponenterna i $\boldsymbol{y}$ har ibland olika storleksordning

$$|(l_j)_n| \leq C \cdot [\text{ATOL}_j + |(y_j)_n|\text{RTOL}]$$

  Styr absolut feltolerans ATOL_j och relativ feltolerans RTOL.

Feluppskattning och steglängdsreglering

- Lokala trunkeringsfelet är komplicerat
  Exempel: En familj av andra ordningens ERK metoder

$$h\,d_n = \frac{h^3}{6}\left[\frac{3}{4\gamma}(f_{yy}f^2 + 2f_{ty}f + f_{tt}) - y'''\right] + O(h^4)$$

- Vill inte vara beroende av f_{yy} etc

Feluppskattning och steglängdsreglering

Grundläggande idé för steglängdsmetoder

- Beräkna två lösningar y_n och $\hat{y}_n$ vid t_n
- $|\hat{y}_n - y_n|$ ger en uppskattning av felet för den minst noggranna metoden
- Om $|\hat{y}_n - y_n| \geq C \cdot ETOL$ så förkastas steget och h minskas.
- Om ordningen är p så kan det nya steget $\tilde{h}$ väljas enligt

$$(\frac{\tilde{h}}{h})^{p+1}|\hat{y}_n - y_n| \approx C \cdot \text{ETOL}$$

- Om steget accepteras så kan man även använda formeln för att öka steglängden.
- Hur skall vi välja y_n och $\hat{y}_n$?

Steglängdsreglering – Inbäddade metoder

- Använder ett par av metoder som ger y_n och $\hat{y}_n$ med ordning p och $p+1$
- Letar efter en s-stegs metod som har ordning $p+1$ så att det finns en annan metod med ordning p inbäddad i den, dvs den inbäddade metoden använder samma beräkningssteg.

$$\begin{array}{c|c} \boldsymbol{c} & A \\ \hline & \hat{\boldsymbol{b}} \end{array} \qquad \begin{array}{c|c} \boldsymbol{c} & A \\ \hline & \boldsymbol{b} \end{array} \qquad \begin{array}{c|c} \boldsymbol{c} & A \\ \hline & \boldsymbol{b} \\ \hline & \hat{\boldsymbol{b}} \end{array}$$

- Enklaste exemplet framåt Euler och modifierad trapetsmetod

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Feluppskattning – Två par

- Fehlberg 4(5) paret: 6-steg.
  Ger en metod av ordning 4 med feluppskattning.

0						
1/4	1/4					
3/8	3/32	9/32				
12/13	1932/2197	-7200/2197	7296/2197			
1	439/216	-8	3680/513	-845/4104		
1/2	-8/27	2	-3544/2565	1859/4104	-11/40	
	25/216	0	1408/2565	2197/4104	-1/5	0
	16/135	0	6656/12825	28561/56430	-9/50	2/55

- Konstanterna valda så att lokala felet i y_n minimeras.

Feluppskattning – Två par

- Dormand and Prince 4(5) paret: 7-steg.
  Sista steget är detsamma som det första i nästa steg beräkningskostnad samma som 6 stegs.
  Ger en metod av ordning 4 med feluppskattning.

0							
1/5	1/5						
3/10	3/40	9/40					
4/5	44/45	-56/15	32/9				
8/9	19372/6561	-25360/2187	64448/6561	-212/729			
1	9017/3168	-355/33	46732/5247	49/176	-5103/18656		
1	35/384	0	500/1113	125/192	-2187/6784	11/84	
	5179/57600	0	7571/16695	393/640	-92097/339200	187/2100	1/40
	35/384	0	500/1113	125/192	-2187/6784	11/84	0

- Konstanterna valda så att lokala felet i $\hat{y}_n$ minimeras.
- Denna metoden numera vanligast.

Feluppskattning – Stegdubbling

- Beräkna y_n på två sätt: en gång med h, och en med $h/2$.
- Ger noggrann uppskattning av lokala felet.
- Lokalt fel uppskattas bättre än med inbäddade metoder.
- Metoden generell och kan appliceras på godtyckliga metoder.
- Kostar mer att använda stegdubbling än inbäddade metoder.

Feluppskattning – Globalt fel

- Omständigt att uppskatta globala felet.
- Användaren som specificerar det globala felet har kanske inte exakt kunskap om vilket globalt fel som behövs.
- Lokalt fel kanske tillräckligt.

Till nästa gång

- Läsa fram till 4.6 på sidan 95.
- Nästa gång:
  - implicita enstegsmetoder
  - linjära flerstegsmetoder