Doktorandkurs i Simulering

Kursmöte 3

Lars Eriksson

Universtitetslektor (Associate Professor)
Institutionen för systemteknik
Linköpings universitet

Dagens agenda

- Kort repetition
  - Begrepp: Konsistens, konvergens, och stabilitet
  - Explicita enstegsmetoder
- Störningsanalys
  - Metodoberoende
- Implicita enstegsmetoder
- Flerstegsmetoder
  - Implicita
  - Explicita

Runge-Kutta metoder

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

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

Dagens agenda

- Kort repetition
  - Begrepp: Konsistens, konvergens, och stabilitet
  - Explicita enstegsmetoder
- Störningsanalys
  - Metodoberoende
- Implicita enstegsmetoder
- Flerstegsmetoder
  - Implicita
  - Explicita

Störningsanalys

Tillämpningar inom parameterskattning, känslighetsanalys, optimal styrning, shooting, multiple shooting för BVP.

- Betrakta IVP med parametrar $\boldsymbol{p}$

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{p}), \qquad \boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{c}$$

- Studerar en störningsvektor $\bar{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{p} + \phi$

$$|\bar{\boldsymbol{y}}(t) - \boldsymbol{y}(t)| \leq |P(t)\phi| + O(\phi^2), \qquad P = \frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{p}}$$

- Kan få en uppskattning av felet genom att simulera en linjär (tidsvarierande) ODE

$$P' = \left(\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{y}}\right) P + \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{p}}$$

Implicita Runge-Kutta metoder

- Implicita metoder, $a_{ij} \neq 0$ för $i \geq j$

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

  Lösa många ekvationssystem
- Metoderna är baserade på numerisk integration

Implicita Runge-Kutta metoder

- Gauss metoder: ordning $p = 2\,s$
  Enklaste exemplet: Implicita mittpunktsmetoden.

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array} \qquad \begin{array}{c|cc} \frac{3-\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{3-2\sqrt{3}}{12} \\ \frac{3+\sqrt{3}}{6} & \frac{3-2\sqrt{3}}{12} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

- Radau metoder: $p = 2\,s - 1$. Inkluderar en av intervallets ändpunkter.
  Exempel: Bakåt Euler.

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

- Lobatto metoder: $p = 2\,s - 2$. Inkluderar båda ändpunkterna hos intervallet.
  Exempel: Trapetsmetoden.

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

Siffly accurate–"styvt noggrann"

- En metod med A ickesingulär, och $a_{sj} = b_j$ kallas "styvt noggrann"
- Styvt noggrann ger styvt avtagande
- Radau: styvt avtagande
- Gauss och Lobatto: Symmetriska, A-stabila, ej styvt avtagande
- Alla implicita metoder hittills är A-stabila

Singly Diagonally Implicit RK – SDIRK

- Att lösa ekvationssystemet kan vara tidskrävande.
  Speciellt Radau har inga nollor i A-matrisen.
  Ett $sm \times sm$ ekvationssystem att lösa
- Design av metoder med speciella egenskaper

$$Y_i - h\,\gamma\, f(t_{n-1} + c_i\, h, Y_i) = y_{n-1} + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\, f(t_{n-1}, +c_j\, h, Y_j)$$

$$\begin{array}{c|cccc} \gamma & \gamma & 0 & \cdots & 0 \\ c_2 & a_{2,1} & \gamma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s,1} & a_{s,2} & \cdots & \gamma \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array}$$

Löser nu s st m $m \times m$ system. Med samma $(I - h\gamma J)^{-1}$.

Andra aspekter

- Order reduction in the stiff limit
  SDIRK
- Dense output (interpolering)
  plottning, händelsedetektering, tidsfördröjningar

Linjära flerstegsmetoder

Grundproblemet

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y}), \qquad t \geq 0$$

- Runge-Kutta metoder

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

- Linjära flerstegsmetoder

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n-j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j \boldsymbol{f}_{n-j}$$

- Linjära, eftersom $\boldsymbol{f}$ ingår linjärt i metoden

Linjära flerstegsmetoder

- Linjära flerstegsmetoder

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n-j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j \boldsymbol{f}_{n-j}$$

- Explicit om $\beta_0 = 0$ annars implicit
- Antar att de k-senaste integrations stegen är lika stora
- Polynominterpolation är grunden för många metoder

Polynominterpolation på Newtons form

$$\phi(t) = f[t_l] + \sum_{i=2}^{k} f[t_1, \ldots, t_k] \prod_{j=1}^{k-1} (t - t_j)$$

Rekursiv definition av *divided differences*

$$f[t_l] = f(t_l), \qquad f[t_l, \ldots, t_{l+i}] = \frac{f[t_{l+1}, \ldots, t_{l+i}] - f[t_l, \ldots, t_{l+i-1}]}{t_{l+i} - t_l}$$

t_0	$f[t_0]$				
t_1	$f[t_1]$	$f[t_0, t_1]$			
t_2	$f[t_2]$	$f[t_1, t_2]$	$f[t_0, t_1, t_2]$		
t_3	$f[t_3]$	$f[t_2, t_3]$	$f[t_1, t_2, t_3]$	$f[t_0, t_1, t_2, t_3]$	
t_4	$f[t_4]$	$f[t_3, t_4]$	$f[t_2, t_3, t_4]$	$f[t_1, t_2, t_3, t_4]$	$f[t_0, t_1, t_2, t_3, t_4]$

Familjen Adams

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n-j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j \boldsymbol{f}_{n-j}$$

- Adams $\alpha_0 = 1,\ \alpha_1 = -1$ och $\alpha_j = 0,\ j \geq 1$
- Explicita Adams-metoder $\beta_0 = 0$ – Adams-Bashford
- Implicita Adams-metoder $\beta_0 \neq 0$ – Adams-Moulton

Adams-Bashford – Explicita Adams-metoder $\beta_0 = 0$

- Interpolerar $f(t)$ för tidsstegen bakåt $t_{n-k}, \ldots, t_{n-1}$
- Integrerar polynomet från t_{n-1} till t_n

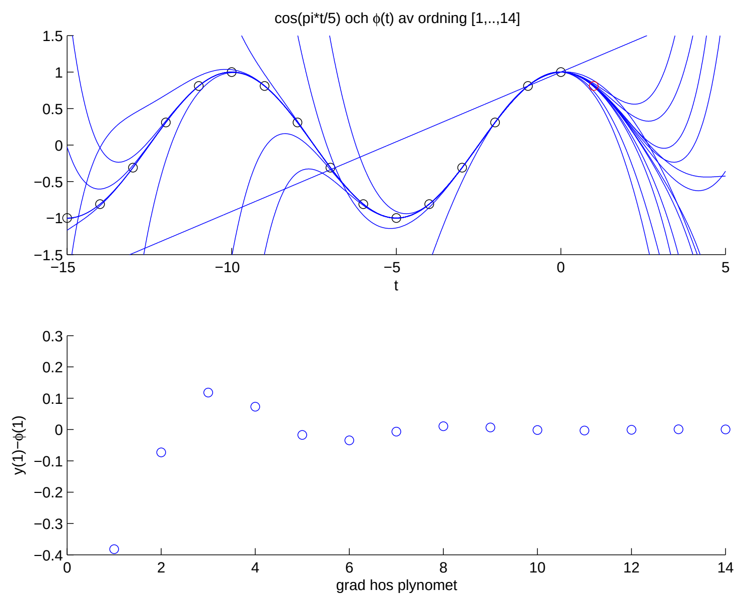
$$y_n = y_{n-1} + h \sum_{j=1}^{k} \beta_j f_{n-j}$$

Koefficienterna för k-stegsmetoden beräknas enligt

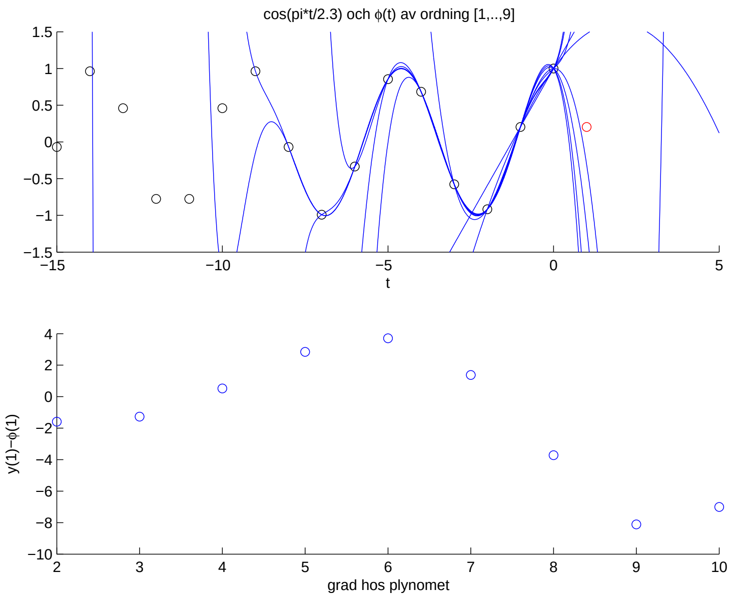
$$\beta_j = (-1)^{j-1} \sum_{i=j-1}^{k-1} \binom{i}{j-1} \gamma_i, \qquad \gamma_i = (-1)^i \int_0^1 \binom{-s}{i} ds$$

- Stabilitetsregionen minskar med k

Minskande stabilitetsregion – Möjlig förklaring



Minskande stabilitetsregion – Möjlig förklaring



Adams-Moulton – Implicita Adams-metoder $\beta_0 \neq 0$

- Interpolerar $f(t)$ för tidsstegen $t_{n-k}, \ldots, t_n$
- Integrerar polynomet från t_{n-1} till t_n

$$y_n = y_{n-1} + h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n-j}$$

- Ordning $p = k + 1$
- Absoluta stabilitetsregionen större än Adams-Bashford men ligger i VHP (trots att den är implicit). Ej A-stabil.
- Absoluta stabilitetsregionen minskar med k

Backward differentiation formula (BDF) family

- Backward differentiation (Notebook example)

$$\nabla^0 f_l = f_l$$

$$\nabla^i f_l = \nabla^{i-1} f_l - \nabla^{i-1} f_{l-1}$$

Backward differentiation formula (BDF) family

- Adams metoderna byggdes upp av ett polynom som interpolerar $f(t_{n-k}, y_{n-k})$ och som integrerades från y_{n-1} till y_n.
- BDF byggs upp av ett polynom som interpolerar tidigare värden y_{n-k} och sätter bakåtderivatan i t_n lika med $f(t_n, y_n)$.

$$\sum_{i=1}^{k} \frac{1}{i} \nabla^i y_n = h\, f(t_n, y_n)$$

- BDF implicit med ordning $p = k$ normalt implementerad tillsammans med en modifierad Newton metod för.
- Instabil för $k > 6$.

Ordning, 0-Stabilitet, Konvergens

- Ordning – Använd differensoperatorn.
- Stabilitetsanalys – Rättframt med tidsdiskret system. Karakteristiska polynom. *Principal root* och *extraneous roots*.
- Stabilitet och asymptotisk stabilitet – Poler i enhetscirkeln. 0-stabilitet, poler i enhetscirkeln och möjligtvis enkla poler på enhetscirkeln.
- *Strongly stable* alla rötter utom $\xi = 1$ ligger i det inre av enhetscirkeln. *Weakly stable* 0-stabil men inte Strongly stable.
- Absoluta stabilitetsregioner.
- Styvt avtagande.

Absolut stabilitet

- Absoluta stabilitetsregionen minskar med ökande ordning.
- Få metoder är A-stabila, BDF av ordning 2 är den med högst ordning.
- A-stabilitet säger inte allt om metoden.
- Styvt avtagande viktigare (speciellt för styva system).
- BDF byter A-stabilitet mot styvt avtagande.

Implementering av flerstegsmetoder

- Start av metoderna.
- Implicita – Metoder för att lösa ekvationssystem
- Både implicita och explicita – Steglängdsförändring och felkontroll

Start av flerstegsmetoder

- Metoderna behöver k-st gamla värden.
- Starta med enstegsmetoder.
- Starta med lägre ordningens metoder inom familjen.

Ekvationslösning – Prediktor-korrektor metoder

- Två metoder som samspelar – En explicit och en implicit
- Initialgissning och fixpunktsiteration som avbryts

  P: $y_n^0 + \sum_{j=1}^{k} \hat{\alpha}_j y_{n-j} = h\,(\sum_{j=1}^{k} \hat{\beta}_j f_{n-j}), \quad \nu = 0$

  E: $f_n^\nu = f(t_n, y_n^\nu)$

  C: $y_n^{\nu+1} + \sum_{j=1}^{k} \alpha_j y_{n-j} = h\,(\beta_0 f_n^\nu + \sum_{j=1}^{k} \beta_j f_{n-j})$
- PEC, PECE, P(EC)$^\nu$, P(EC)$^\nu$E
  (Avlutning med E är att föredra eftersom sista funktionsevalueringen förbättrar interpolationspolynomet och därmed metodens stabilitet)
- Tillhör en familj av generella linjära metoder
- Lämpliga för icke-styva problem

Ekvationslösning – Modifierade Newton-metoder

- Implicita metoder

$$y_n - h\beta_0 f(t_n, y_n) = -\sum_{j=1}^{k} \alpha_j y_{n-j} + h\,(\sum_{j=1}^{k} \beta_j f_{n-j})$$

  Flytta över på formen $F(t, y) = 0$
- Newton iteration $y^{\nu+1} = y^\nu - \frac{\partial F(t,y)}{\partial y}^{-1} F(t, y)$

$$y_n^{\nu+1} = y_n^\nu - \left(I - h\beta_0 \frac{\partial f}{\partial y}\right)^{-1} \left[\sum_{j=0}^{k} a_j y_{n-j} - h\,(\sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n-j})\right]$$

- LU faktorisera för att lösa inversen och spara denna.
  Uppdatera $\frac{\partial f}{\partial y}$ och LU faktoriseringen endast vid behov.

Steglängdsändring

Metoderna baserade på fix steglängd.

- Fixerade koefficienter
  Interpolera om data till den nya steglängden.
- Variabla koefficienter
  Härled en ny metod för icke likformiga steg.
- Fast första-koefficient
  Prediktor polynom (icke likformigt nät)

$$\phi(t_{n-i}) = y_{n-i}, \qquad 1 \le i \le k+1$$

  ett andra polynom $\psi(t)$ på likformigt nät

$$\psi(t_n - ih_n) = \phi(t_n - i\,h_n), \qquad 1 \le i \le k$$

$$\psi'(t_n) = f(t_n, \psi(t_n)), \qquad y_n = \psi(t_n)$$

Avslutning

Tolerans och felkontroll – Rättframt
Mjukvarutips – Läs
Notera att DASSL, DASPK utvecklats av författarna.