

F6

- System av ODE - initialvärdesproblem
- Existens & entydighet, Lipschitz
- Euler, konvergens, fel, konvergensordning
- Lösningsskaror, fasrum
- Stabilitet, känslighet
- Högre ordn. ekvation till första ordn. system
- Runge-Kutta-metoder, steglängdsreglering
- Styva ekvationer & Implicita metoder

Initialvärdesproblem, I: Matematik

Lösningars egenskaper

1. En första ordningens linjär ekvation med konstanta koefficienter

$$dy/dt = ay, y(0) = c: y(t) = ce^{at}$$

Oberoende variabel t , ett begynnelsevillkor som väljer ut en lösning ur lösningsskaran. Lösningen är unik och existerar för alla t .

2. En första ordningens o-linjär ekvation (*separabel*: $dy/y^2 = dt$)

$$dy/dt = y^2, y(0) = c > 0: y = c/(1-ct) \text{ för } 0 < t < 1/c$$

Lösningen är unik men existerar bara i ett begränsat intervall.

3. En annan olinjär ekvation:

$$dy/dt = \sqrt{y}, y(0) = c \geq 0: y = (\sqrt{c} + t/2)^2 \quad (?)$$

Uppenbarligen är $y = 0$ en lösning för $c = 0$. Men också $y(t) = t^2/4$, alla $t > 0$

Lösningen är inte unik för $c = 0$.

Initialvärdesproblem, II: Matematik

IVP för system av första ordnings differentialekvationer

$$d\mathbf{y} / dt = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \mathbf{y}(a) = \mathbf{c}, \mathbf{y}, \mathbf{c} \in R^n$$

är normalformen i numeriska metoder för ordinära differentialekvationer. t är den oberoende variabeln (ofta tid), ett system av n första ordningens differentialekvationer med begynnelsevärden (initialvärden) givna vid $t = a$ (ofta 0).

Kolumnvektorn $\mathbf{y}$ kallas tillstånds-vektorn. De n funktionerna

$f_i, i = 1, 2, \dots, n$ av $\mathbf{y}$ kan kallas högerledet.

Ex. Newton, massa-fjäder-dämpare

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ m\dot{v} + Kx + Dv = \sin t \end{cases} \Rightarrow m\ddot{x} + Kx + D\dot{x} = f(t)$$

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} : \frac{d}{dt} \mathbf{y} + \mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{f}, \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ K & D \end{pmatrix}, \mathbf{f} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sin t \end{pmatrix}$$

Initialvärdesproblem, III: Unicitet

Def. Lipschitz-kontinuitet: $\mathbf{f}$ kallas L -kontinuerlig i en domän D om det finns en konstant L så att

$$\|\mathbf{f}(t, \mathbf{x}) - \mathbf{f}(t, \mathbf{y})\| \leq L \cdot \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

för alla $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ i D .

Om $\mathbf{f}$ är deriverbar duger $L = \max_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D} \left\| \frac{\partial \mathbf{f}(t, \mathbf{y})}{\partial \mathbf{y}} \right\|$

Ex. $\sqrt{y}$ är kontinuerlig men inte L -kontinuerlig i $y = 0$ (på tavlan)

Sats. Om $\mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ är L -kontinuerlig i $\mathbf{y}$ i en omgivning till initialvärdet $\mathbf{c}$ så existerar en unik lösning en kort stund.

Man kan bevisa satsen genom att visa, att en numerisk lösning konvergerar när steglängden går mot noll.

Initialvärdesproblem, IV: Fasrum mm.

Exempel: satellit. En masspunkt (x,y) med hastighet (u,v) rör sig runt en mycket större massa under inverkan av gravitation.

Tillståndrum 4D (x,y,u,v) = fasrum (fasplan i 2D)

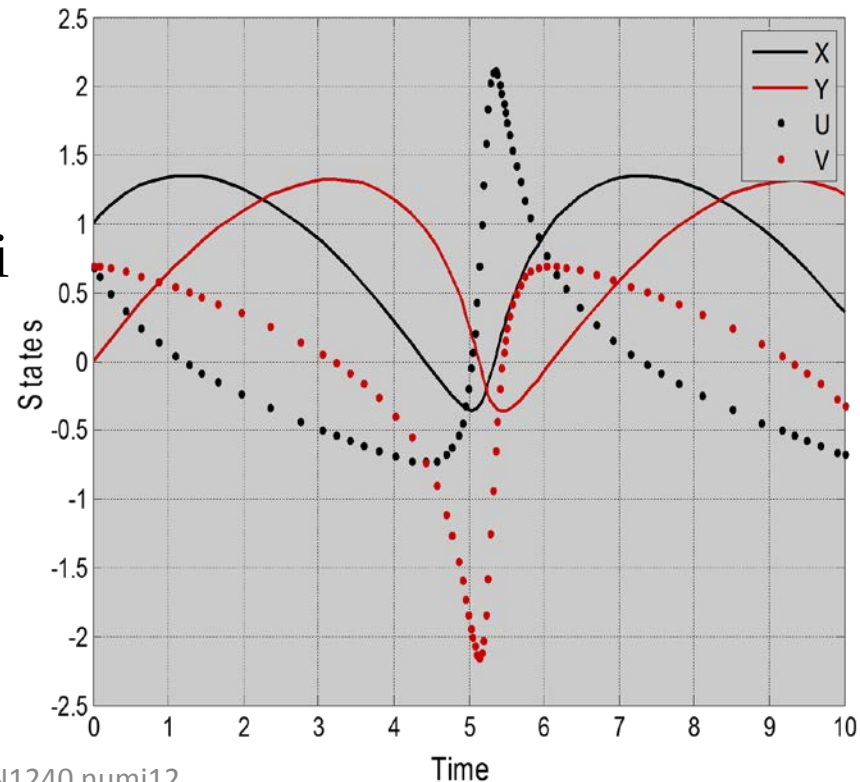
$$\begin{cases} \dot{u} = -kx/r^3, \dot{x} = u; r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \dot{v} = -ky/r^3, \dot{y} = v \end{cases}$$

Visualisering av lösningar

1. ”Plotta” komponenterna i tillståndsvektorn mot tiden.

Fyra periodiska kurvor

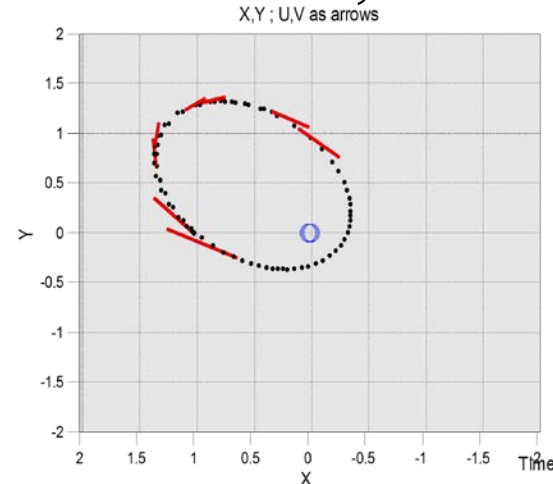
$(x(t), y(t), u(t), v(t))$.



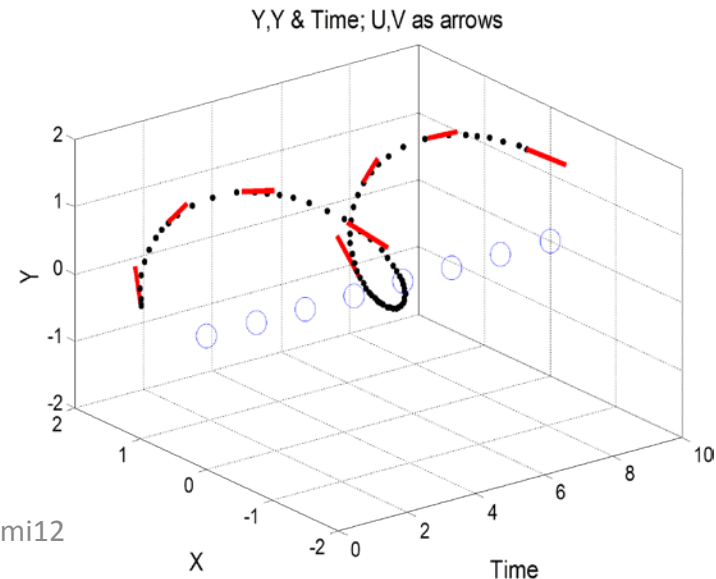
Initialvärdesproblem, V: Fasrum mm.

Mera geometrisk insikt: tillståndsvektorn som en kurva i ett $n+1$ -dimensionellt rum: en dimension för varje komponent och en för tiden. I satellitmodellen är $n = 4$ så det är svårt, men man kan

2. Projicera på t ex ett 2-D underrum (x,y) , banan som parameterkurva



3. Använda 3D (x,y,t) .
 dx/dt och dy/dt
visas som en hastighets”pil”
(även i 2.)



Initialvärdesproblem, VI: Eulers metod

Då kan man approximera lösningen med en steg-metod som ger y_k som approximation till $y(t_k)$, $t_k = 0 + kh, k=0,1,\dots$

Approximera derivatan med differenskvot,

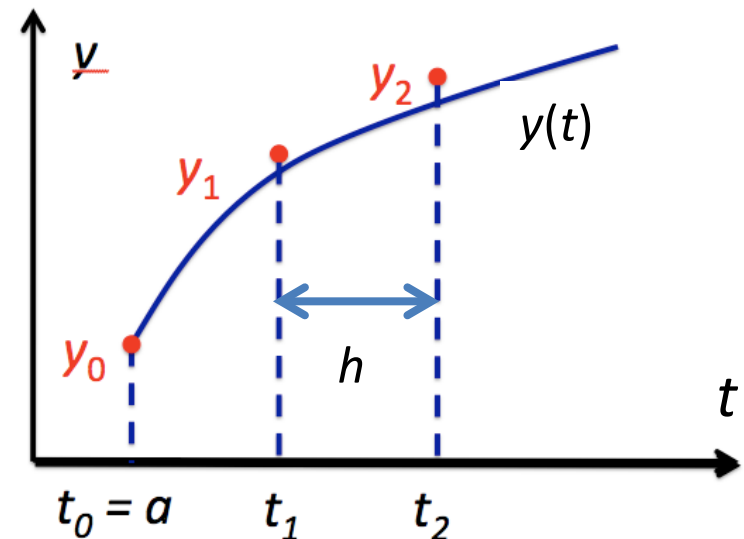
$$\left. \frac{dy}{dt} \right|_{t_n} \approx \frac{y(t_{n+1}) - y(t_n)}{h} \rightarrow \frac{y_{n+1} - y_n}{h}$$

så får vi **Eulers** metod

$$t_n = a + nh$$

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(t_n, y_n), n = 0, 1, \dots$$

$$y_0 = c$$



Initialvärdesproblem, VII: Fel

$$\begin{cases} y(t_{n+1}) = y(t_n) + hy'(t_n) + \frac{h^2}{2} y''(\tau) \\ y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) \end{cases}$$

$$E_{n+1} = E_n + h(f(t_n, y(t_n)) - f(t_n, y_n)) + \frac{h^2}{2} y''(\tau)$$

$$|E_{n+1}| \leq |E_n| + \underbrace{hL|E_n| + \frac{h^2}{2}|y''(\tau)|}_{\text{Lokalt fel}}$$

Om man tar N steg från 0 till $t_N = b$ är $h = b/N$

Totalt N fel summeras,

$$N \cdot \frac{h^2}{2} \max |y''| = b \cdot \frac{h}{2} \max |y''|$$

Fel proportionellt mot h^1 : noggrannhetsordning 1

Initialvärdesproblem, VIII: Hur fungerar Euler?

Exempel: Rita en enhetscirkel! Parameterkurvan $x = \cos t$, $y = \sin t$ ger

$$dx/dt = -\sin t = -y,$$

$$dy/dt = \cos t = x$$

Eulers metod med steg $h = 2\pi/M$ ger

$$x_{k+1} = x_k - h y_k, \quad x_0 = 1$$

$$y_{k+1} = y_k + h x_k, \quad y_0 = 0$$

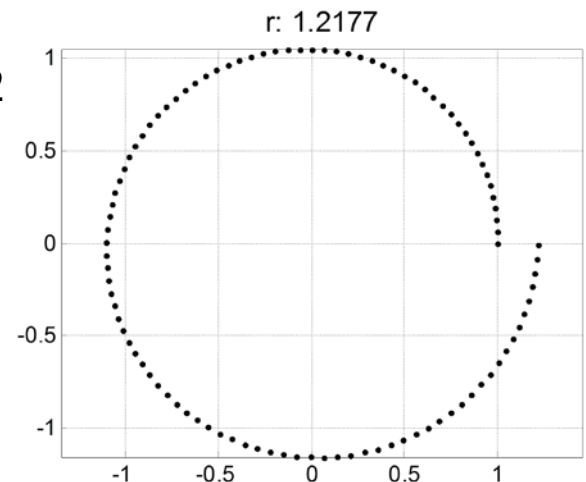
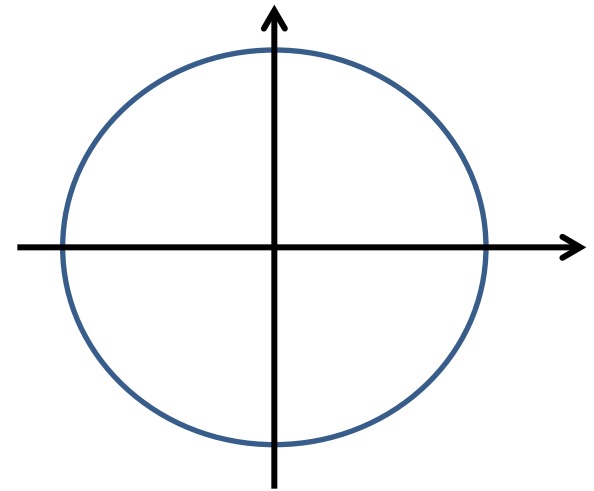
$M = 100$: *Spiral* !

$$r_{n+1}^2 = \mathbf{u}_{n+1}^T \mathbf{u}_{n+1} = \dots = (1 + h^2) \mathbf{u}_n^T \mathbf{u}_n = (1 + h^2) r_n^2$$

$$r_M^2 = (1 + h^2)^M = e^{M(h^2 + 1/2h^4 + \dots)} =$$

$$= e^{2\pi h} (1 + O(h^3)) =$$

$$= 1 + 2\pi h + O(h^2) \approx 1.4$$



Initialvärdesproblem: Bättre metoder I

$O(h)$ fel för stort, men spiral kan enkelt åtgärdas:

Tag senaste x -värde i y -uppdateringen:

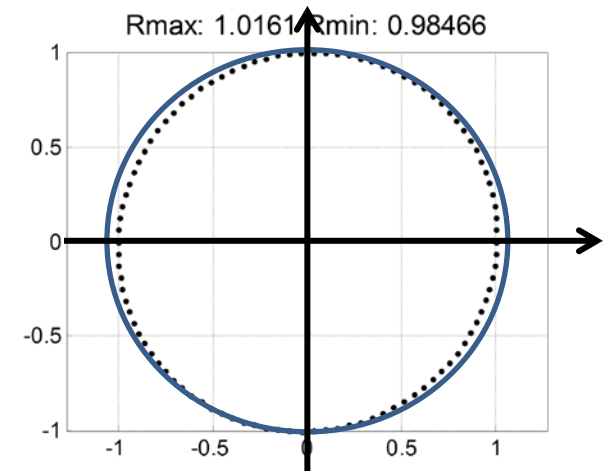
$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - h y_k, & x_0 &= 1 \\y_{k+1} &= y_k + h x_{k+1}, & y_0 &= 0\end{aligned}$$

Ellips med halvaxlar $\frac{1}{\sqrt{1 \pm (h/2)^2}}$

Detta används för Hamiltoniansk dynamik,
t ex molekylodynamik, Maxwells
ekvationer: Verlet's metod

$$\mathbf{M}\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{M}\mathbf{v}_n + h \mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + h \mathbf{v}_{n+1}$$



Initialvärdesproblem: Bättre metoder II

Trapetsregeln => trapetsmetoden för IVP

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(s) ds = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s, y(s)) ds =$$

$$= \frac{t_{n+1} - t_n}{2} (f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) + f(t_n, y(t_n))) + O(|t_{n+1} - t_n|^3)$$

ger

$$y_{n+1} - y_n = \frac{t_{n+1} - t_n}{2} (f(t_{n+1}, y_{n+1}) + f(t_n, y_n))$$

- Andra ordningens fel: noggrannaste *linjära enstegs*-metoden
- IMPLICIT – ekvationslösning i varje steg
- Eulers metod EXPLICIT
- Bakåt Euler: $y_{n+1} - y_n = hf(t_{n+1}, y_{n+1})$
 - IMPLICIT, ordning 1

Initialvärdesproblem: Runge-Kuttametoder I

Ersätt y_{n+1} i trapetsmetoden med sin Euler-approximation så blir metoden explicit:

$$y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_n + hf(t_n, y_n)))$$

och har fel $O(h^2)$. Konstruktionen implementeras som

$$k_1 = hf(t_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(t_n + h, y_n + k_1)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2} k_1 + \frac{1}{2} k_2$$

en två-stage explicit Runge-Kuttametod

Ännu högre ordning?

Initialvärdesproblem: Runge-Kuttametoder II

- ... genom att evaluera $f(.,.)$ $k > 2$ gånger (k stages) i steget
- För k -stage-metoder
 - Ordning $\leq k$
 - Ordning k bara för $k = 1, 2, 3, 4$
- Klassisk Runge-Kutta, fyra stages, ordning 4, NAM RK4

$$k_1 = h f(t_n, y_n)$$

$$k_2 = h f(t_n + 1/2 h, y_n + 1/2 k_1)$$

$$k_3 = h f(t_n + 1/2 h, y_n + 1/2 k_2)$$

$$k_4 = h f(t_n + h, y_n + k_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + 1/6 (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

MATLAB **ode23** och **ode45**

Initialvärdesproblem: Styva problem I

Exempel Radioaktivt sönderfall

A sönderfaller till B som sönderfaller till C. $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$:
 k_i kallas hastighetskoefficienter. a , b och c koncentrationerna

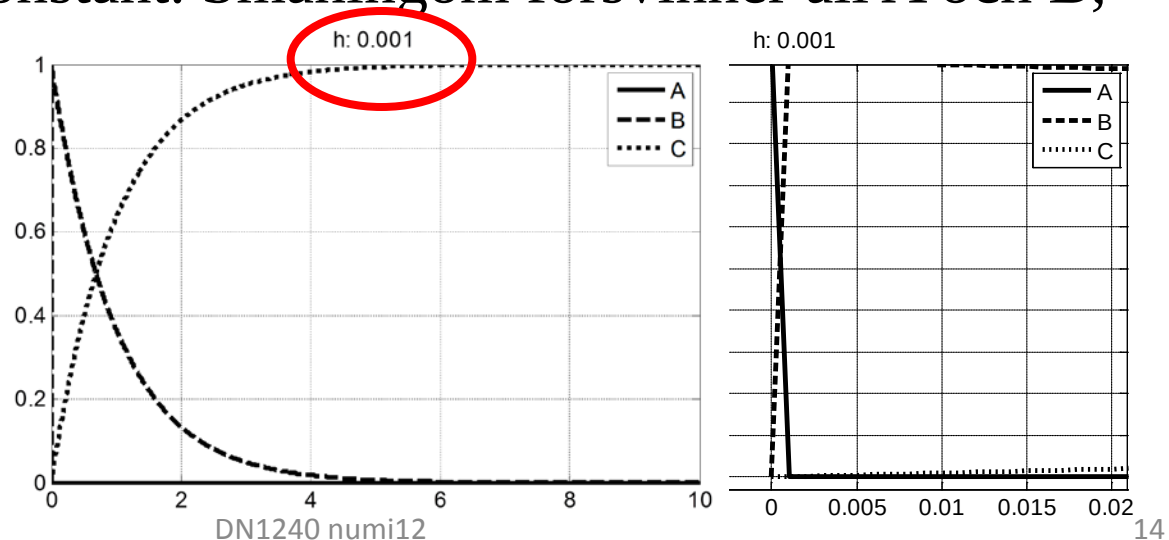
$$\begin{cases} \dot{a} = -k_1 a \\ \dot{b} = k_1 a - k_2 b \\ \dot{c} = k_2 b \end{cases} \quad \frac{dy}{dt} = \mathbf{A}y, y = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}, \mathbf{A} = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \end{pmatrix}, y(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Varje A som försvinner blir ett B, och varje B som försvinner blir ett C: $a + b + c$ är konstant. Småningom försvinner all A och B, och C har samlat allt.

$k_1 = 1000$ (sort: 1/s),

$k_2 = 1$,

$h = 0.001$, Euler



Initialvärdesproblem: Styva problem II

$$a_{n+1} = a_n - h k_1 \quad a_n = (1 - h k_1) a_n$$

$$b_{n+1} = b_n + h (k_1 a_n - k_2 b_n)$$

$$c_{n+1} = c_n + h k_2 b_n$$

För $h > 0.002$ växer a exponentiellt, $(1 - h k_1) < -1$,
numerisk **Instabilitet**. L blir 1000!

För $t > 0.005$, säg, är a nästan 0 och lösningens tidsskala är 1 sek.

Trots det krävs en tusendels sek. tidssteg: **STYVT** problem

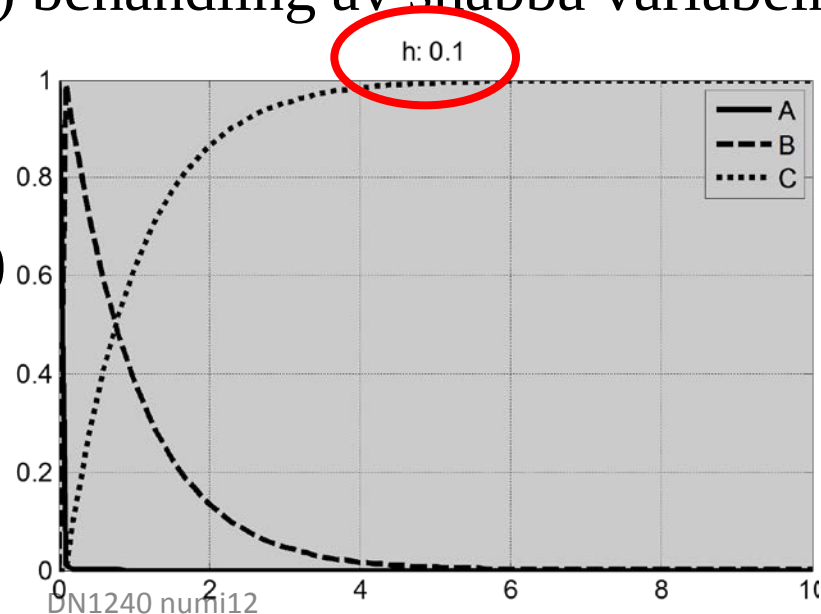
Fix: Implicit (Bakåt Euler) behandling av snabba variabeln a :

$$a_{n+1} = a_n - h k_1 a_{n+1}$$

$$a_{n+1} = a_n / (1 + h k_1)$$

$$b_{n+1} = b_n + h (k_1 a_n - k_2 b_n)$$

$$c_{n+1} = c_n + h k_2 b_n$$



Initialvärdesproblem: Styva problem III

I allmänhet är det inte så lätt att identifiera de snabba variablerna och då får man använda (t.ex) Bakåteuler på hela systemet. Det blir till att lösa ekvationssystemet

$$(\mathbf{I} - h\mathbf{A})\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k$$

i varje steg.

- Automatiskt val av steglängd viktigt

Vårt exempel: start med 0.0001, öka till säg 0.1

- Om icke-linjärt, lös

$$\mathbf{z} - h\mathbf{f}(t_{k+1}, \mathbf{z}) = \mathbf{y}_k, \mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{z}$$

med Newton.

- Jacobian-matrisen $d\mathbf{f}/d\mathbf{z}$ behövs.
- Bra startgissning finns t ex $\mathbf{z}^{(0)} = \mathbf{y}_k$
- Effektiv hantering av gles matris viktigt för stora system

MATLAB, I

- Många (för många?) metoder finns.

En lämplig standardmetod är

[tout,yout] = ode45(fun,tspan,y0);

Dormand-Princes RK4 och RK5. Evaluering med två olika metoder i varje steg användes för feluppskattning och för automatiskt val av steget h . **ode23** ordning 2 & 3

- **dydt = fun(t,y)** är högerledet i ekvationen, reell, komplex, skalär eller vektorform, **tspan** är vektor som börjar med t_0 och fortsätter med de t -värden där lösningen önskas, **y0** är begynnelsevärdesvektorn: **dydt, y0** KOLUMNER!

- För styva problem: **ode15(fun,tspan,y0)**

- Högre ordnings system måste alltså först skrivas som första ordnings system. Förekommer alltid på tenta.

MATLAB, II

Automatisk reglering av steglängden:

Avses styras så, att *lokala felet över varje steg* hålls mindre än den givna tolerans: **reltol** och **abstol**, sätts med

```
opts = odeset('reltol',1e-5);  
[tout,yout] = ode45(fun,tspan,y0,opts);
```

- Observera: skillnaden mellan exakt lösning och numerisk uppskattas *INTE*.
- **tspan** påverkar inte steglängdsreglering annat än **tspan(1)** & **tspan(end)**
- Man förväntar sig konvergens så att för ett givet problem felet blir proportionellt mot toleransen.
 - kvoten kan inte lätt uppskattas,
 - felet som funktion av tolerans blir mindre regelbundet än vid global, successiv steghalvering.

MATLAB, III

Vi undersöker $y(4)$ beräknad med **ode23** och **ode45** toleranser $10^{-k/2}$, $k = 1, 2, \dots, 22$.

- Exakt resultat = resultatet med strängaste toleransen.

- Observerad konvergens-ordning p (fel = Ch^p) blir

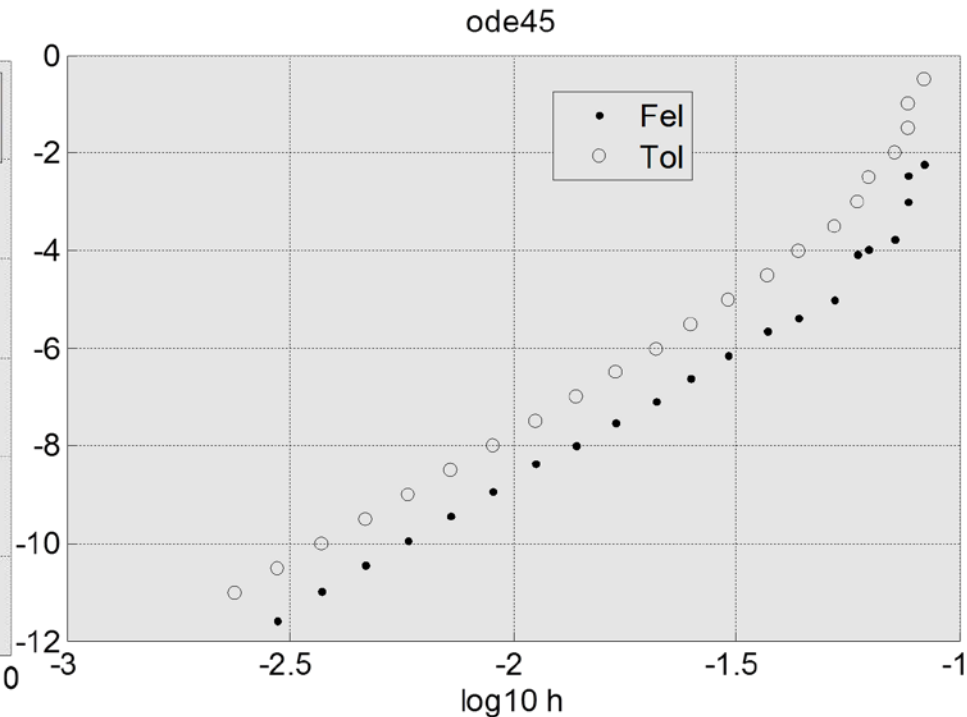
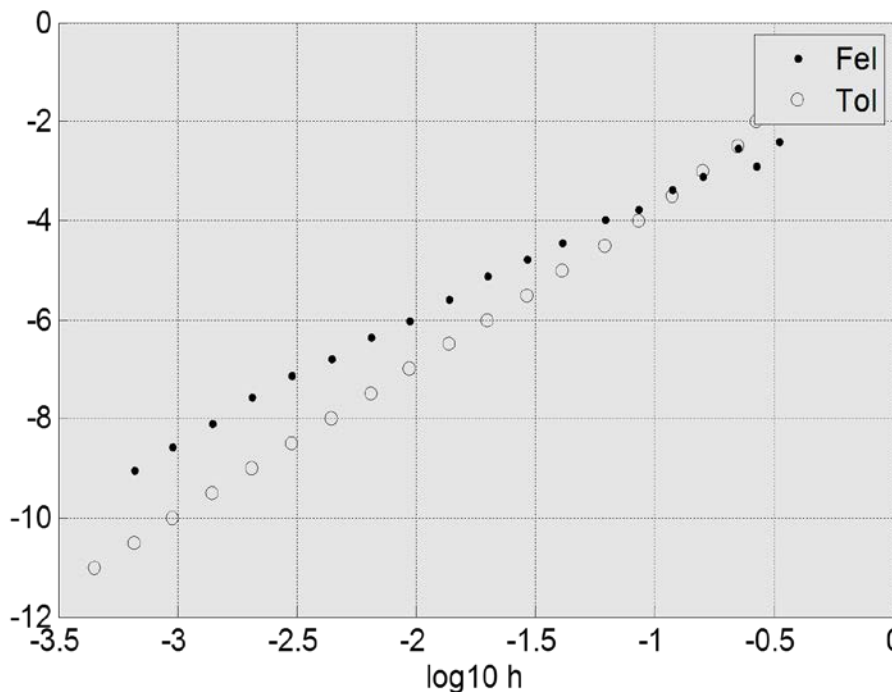
ode23: $p = 2.7$ ---- ode23

fel/tolerans från 1 vid $h = 0.3$ till > 100 vid $h = 0.001$.

ode45: $p = 4.7$ ---- ode45. ode45 tar minst 10 steg.

fel/tolerans ungefär 0.1 för alla fall.

$$\frac{dy}{dx} = -10y^3 + \cos x, y(0) = 1$$



MATLAB, IV

Prova **ode23** och **ode15s** på kemi-exemplet. Tidsskalor 1 ms och 1 s

100 gånger större steg med
styv metod

