Gewöhnliche Differentialgleichungen II

10. Vorlesung

170.021 Numerische Methoden 1

(170.026 Numerische Methoden I)

Clemens Brand, Erika Hausenblas, Alexander Steinicke

Montanuniversität Leoben

25. Mai 2023

Gewöhnliche Differentialgleichungen II

1. Differentialgleichungen: Systeme; höhere Ordnung
   - Systeme
   - Höhere Ordnung
2. Steife Differentialgleichungen
   - Was ist eine steife Differentialgleichung?
   - Stabilitätsgebiet und steife Gleichungen
   - Stabilität und Stabilitätsgebiet
   - Prüfungsaufgaben zu Steifigkeit und Stabilitätsgebiet
3. Fehlerordnung und Genauigkeit
   - Zusammenhang Schrittweite – Diskretisierungsfehler
   - Prüfungsaufgabe: Fehlerordnung

System von Differentialgleichungen: Aufgabenstellung

System expliziter gewöhnl. Differentialgleichungen 1. Ordnung mit Anfangsbedingungen

Gegeben ist eine Gleichung

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y})$$

$\mathbf{f}$ mit $D \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ ist gegeben: $(x, \mathbf{y}) \mapsto \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^n$.

Gesucht ist eine vektorwertige Funktion $\mathbf{y}(x) : [x_0, x_{\text{end}}] \to \mathbb{R}^n$

Sie soll erfüllen

$$\begin{aligned} \mathbf{y}'(x) &= \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)) && \text{Differentialgleichung} \\ \mathbf{y}(x_0) &= \mathbf{y}_0 && \text{Anfangsbedingung} \end{aligned}$$

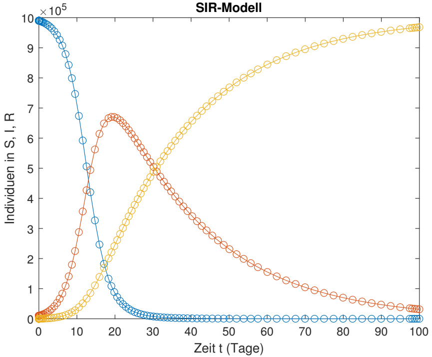
Vergleichen Sie die Schreibweise mit der für eine explizite DG 1. Ordnung:

- Statt $y(x)$ und $f(x, y)$ vektorwertige Funktionen $\mathbf{y}$ und $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}))$; im Skriptum komponentenweise ausgeschrieben.
- In vielen Anwendungen ist die Zeit t die unabhängige Variable, dann steht t statt x und $\dot{\mathbf{y}}$ statt $\mathbf{y}'$

Beispiel: SIR-Modell

Beschreibt in sehr vereinfachter Form die Ausbreitung von ansteckenden Krankheiten mit Immunitätsbildung.

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\beta IS}{N}$$
$$\frac{dI}{dt} = \frac{\beta IS}{N} - \gamma I$$
$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$



$S(t)$ blau, $I(t)$ rot, $R(t)$ gelb

Ausführlich kommentiertes Beispiel im Zusatzmaterial: `SIRmodel.m`

Beispiel: SIR-Modell in Schreibweise $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$

Übliche Schreibweise

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\beta IS}{N}$$
$$\frac{dI}{dt} = \frac{\beta IS}{N} - \gamma I$$
$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

Definition von **y** und **f**. So erwarten es Computer-Lösungsprogramme.

$$\mathbf{y} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3; \qquad \mathbf{y}(t) = \begin{bmatrix} S(t) \\ I(t) \\ R(t) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) = \mathbf{f}(t, \begin{bmatrix} S \\ I \\ R \end{bmatrix}) = \begin{bmatrix} -\frac{\beta IS}{N} \\ \frac{\beta IS}{N} - \gamma I \\ \gamma I \end{bmatrix}$$

Wenn β und γ konstante Parameter sind, hängt **f** gar nicht explizit von der Zeit t ab. Computerprogramme erwarten aber die die Eingabe von **f** mit beiden Parametern t und **y**.

Differentialgleichung höherer Ordnung: Aufgabenstellung

Explizite gewöhnliche Differentialgleichung d-ter Ordnung mit Anfangsbedingungen

Gesucht ist eine Funktion $y(x) : [x_0, x_{\text{end}}] \to \mathbb{R}$.

Sie soll erfüllen

$y^{(d)}(x) = f(x, y, y', \ldots, y^{(d-1)})$	Differentialgleichung
$y(x_0),\ y'(x_0), \ldots, y^{(d-1)}(x_0)$ gegeben	Anfangsbedingungen

Eine DG höherer Ordnung, oder ein System solcher DGn, lässt sich durch Einführen von Hilfsfunktionen in ein äquivalentes System von DGn 1. Ordnung transformieren.

Ausführliches Material und Beispiele: Übungsunterlagen!

Beispiel: die Blasius-Gleichung $y'''(x) = -y(x)y''(x)/2$

beschreibt Strömung in laminarer Grenzschicht

$$\text{setze} \quad \begin{array}{rcl} y(x) & = & z_1(x) \\ y'(x) & = & z_2(x) \\ y''(x) & = & z_3(x) \end{array} \;\rightarrow\; \text{neues Glsyst.} \quad \begin{array}{rcl} z_1'(x) & = & z_2(x) \\ z_2'(x) & = & z_3(x) \\ z_3'(x) & = & -z_1(x)z_3(x)/2 \end{array}$$

also $\mathbf{z}'(x) = \mathbf{f}(\mathbf{z}, x)$ (in diesem Fall hängt $\mathbf{f}$ nicht explizit von x ab)
mit

$$\mathbf{f}\left(\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} z_2 \\ z_3 \\ -z_1 z_3/2 \end{bmatrix}$$

Weitere Beispiele in den Übungsunterlagen!

Allgemein: Umformen von

$$y^{(d)}(x) = f(x, y(x), y'(x), \ldots, y^{(d-1)}(x))$$

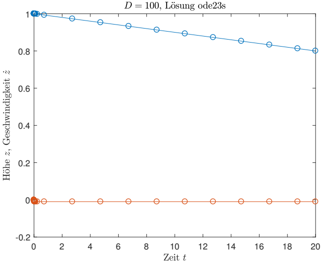
Man setzt $z_1 = y,\ z_2 = y', \ldots,\ z_d = z^{(d-1)}$ und schreibt

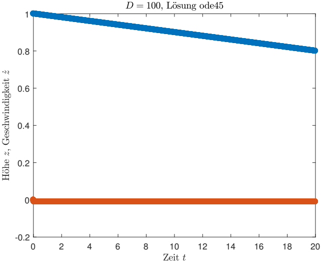
$$\begin{aligned}
z_1'(x) &= z_2(x) \\
z_2'(x) &= z_3(x) \\
&\vdots \\
z_{d-1}'(x) &= z_d(x) \\
z_d'(x) &= f(x(x), z_1(x), \ldots, y_d(x))
\end{aligned}$$

Steife Differentialgleichungen

Bei steifen Differentialgleichungen brauchen explizite Einschrittverfahren unvernünftig kleine Schrittweiten, obwohl sich die Lösung pro Schritt nahezu gar nicht ändert.

Beispiel: Freier Fall durch viskoses Medium (Löffel versinkt im Honig)
Bewegungsgleichung für Höhe $z(t)$: $\ddot{z} + D\dot{z} + 1 = 0$ mit $D \gg 1$
Nach kurzer Zeit $t \approx 1/D$ nahezu konstante Sinkgeschwindigkeit. Ab dann verläuft $z(t)$ unspektakulär linear.





`ode23s`: 31 Rechenpunkte

`ode45` 2441 Rechenpunkte

Steife Differentialgleichungen

...much controversy is going on about its correct mathematical definition[1]

...it turns out not to be possible to [define stiffness] *in a satisfactory manner*[2]

Stiff equations are problems for which explicit methods don't work.[1]

Stiff differential equations are characterized by the fact that the use of explicit methods requires very small step sizes, and certain implicit methods (like the implicit Euler method) perform much better.[3]

A linear constant coefficient system is stiff if all of its eigenvalues have negative real part and the stiffness ratio is large.
Stiffness occurs when stability requirements, rather than those of accuracy, constrain the step length.
Stiffness occurs when some components of the solution decay much more rapidly than others. [2]

---

[1] E. Hairer, G. Wanner (1996)

[2] J. D.Lambert (1992)

[3] E. Hairer, G. Wanner (2010)

Steifes Anfangswertproblem

Eine mögliche Charakterisierung

Gegeben: DG-System mit Anfangsbedingung für $\mathbf{y}(x), \quad x \geq 0$

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$$

Sei D_f die Jacobi-Matrix von $\mathbf{f}(x, \mathbf{y})$, (mit part. Ableitungen nach $\mathbf{y}$!)

$$D_f = \left[\frac{\partial f_i}{\partial y_j} \right]$$

(D_f hängt im Allgemeinen von x und den Werten der Lösung $\mathbf{y}$ ab!)

Das Steifheits-Verhältnis S ist dann definiert als

$$S = \frac{|Re(\lambda_{\max})|}{|Re(\lambda_{\min})|}$$

Je größer S, desto steifer das Problem.

wobei $\lambda_{\max}$ und $\lambda_{\min}$ die Eigenwerte mit maximalem bzw. minimalen Realteil-Betrag sind.

Steifes Anfangswertproblem

Warum ist S so kompliziert definiert?

- Eigenwerte mit negativem Realteil beschreiben exponentiell abklingende Komponenten der Lösung $\approx e^{-\lambda x}$.
- Betragsmäßig großer/kleiner negativer Realteil $\rightarrow$ rasch/langsam abklingende Lösungs-Komponente.
- Oft laufen Teilprozesse mit sehr unterschiedlichen Geschwindigkeiten (sehr unterschiedlich schnell abklingenden Komponenten) ab.
- Explizite Verfahren müssen ihre Schrittweite an den schnellsten Teilprozess anpassen, auch wenn dieser schon längst abgeklungen ist.
- Implizite Verfahren passen die Schrittweite der tatsächlichen Änderungsrate an.

Ein einfaches steifes System

Gegeben: Anfangswertproblem für $\mathbf{y} = \mathbf{y}(x)$, $\quad 0 \leq x \leq 3$

$$\begin{array}{rcrr} y_1' & = & -1999 y_1 & -1998 y_2 \\ y_2' & = & 999 y_1 & +998 y_2 \end{array} \text{, Anfangsbedingungen} \quad \begin{array}{rl} y_1(0) & = 1 \\ y_2(0) & = -1 \end{array} .$$

- Die Jacobi-Matrix ist in diesem Fall

$$D_f = \begin{bmatrix} -1999 & -1998 \\ 999 & 998 \end{bmatrix}$$

- Ihre Eigenwerte sind $\lambda_1 = -1$ und $\lambda_2 = -1000$.
- moderat hohe Steifigkeit

$$S = \frac{1000}{1}$$

Ein einfaches steifes System (2)

Gegeben: Anfangswertproblem für $\mathbf{y} = \mathbf{y}(x), \quad 0 \le x \le 3$

$$\begin{array}{rcrr} y_1' & = & -1999 y_1 & -1998 y_2 \\ y_2' & = & 999 y_1 & +998 y_2 \end{array}, \text{ Anfangsbedingungen } \begin{array}{rr} y_1(0) & = 1 \\ y_2(0) & = -1 \end{array}.$$

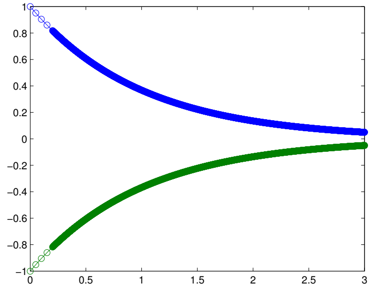
- Lösung zu den gegebenen Anfangsbedingungen: $y_1 = e^{-x}$; $y_2 = -e^{-x}$.
- Allgemeine Lösung enthält auch Terme mit e^{-1000x}
- Obwohl die e^{-1000x}-Terme sehr rasch abklingen (oder, so wie hier, in der Lösung gar nicht vorkommen), bereiten sie expliziten Verfahren große Schwierigkeiten.

Ein einfaches steifes System (3)

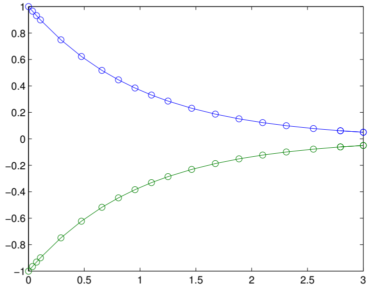
Gegeben: Anfangswertproblem für $\mathbf{y} = \mathbf{y}(x)$, $\quad 0 \leq x \leq 3$

$$\begin{array}{rcrr} y_1' & = & -1999y_1 & -1998y_2 \\ y_2' & = & 999y_1 & +998y_2 \end{array}, \text{ Anfangsbedingungen } \begin{array}{rl} y_1(0) & = 1 \\ y_2(0) & = -1 \end{array} .$$

`ode45`: extrem kleine Schrittweite
≈ 3400 Datenpunkte



`ode15s`: große Schrittweite
19 Datenpunkte



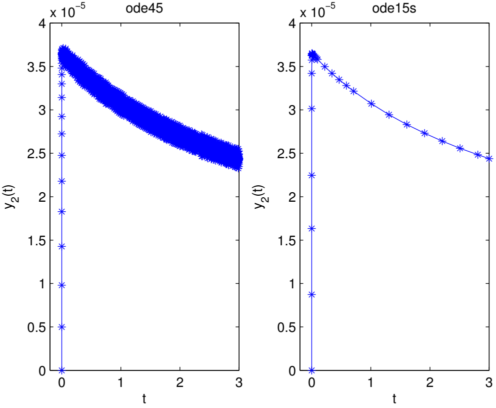
Noch ein steifes Problem

MATLABs Standard-Löser ode45 im Vergleich zu ode15s

Die *Robertson-Differentialgleichung*, ein oft verwendetes Testproblem, beschreibt die Kinetik einer autokatalytischen chemischen Reaktion. Gegeben: DG-System für $\mathbf{y} = \mathbf{y}(t)$ mit $y(0) = (1, 0, 0)$

$$\begin{aligned}
\dot{y}_1 &= -0.04\, y_1 + 10^4 y_2\, y_3, \\
\dot{y}_2 &= 0.04\, y_1 - 10^4 y_2\, y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2, \\
\dot{y}_3 &= 3 \cdot 10^7 y_2^2.
\end{aligned}$$

- Zuerst extrem rascher Anstieg, dann langsamer Abfall von y_2.
- Extrem großer Unterschied zwischen den einzelnen Reaktionsraten→steifes System.
- ode45 hat höhere Ordnung, aber ode15s rechnet genauer und schneller.



Die Robertson-Differentialgleichung

Das Testproblem von vorhin

Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}
\dot{y}_1 &= -0.04\, y_1 + 10^4 y_2\, y_3, \\
\dot{y}_2 &= 0.04\, y_1 - 10^4 y_2\, y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2, \\
\dot{y}_3 &= 3 \cdot 10^7 y_2^2.
\end{aligned}$$

Jacobi-Matrix

$$D_f = \begin{bmatrix} -0{,}04 & 10^4\, y_3 & 10^4 y_2 \\ 0{,}04 & -10^4\, y_3 - 6 \cdot 10^7 y_2 & -10^4 y_2 \\ 0 & 6 \cdot 10^7 y_2 & 0 \end{bmatrix}$$

Eigenwerte für $\mathbf{y} = [1; \quad 0{,}1; \quad 0{,}1]$ sind

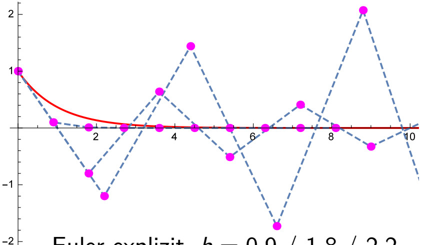
$$\lambda_1 = -6 \cdot 10^6; \quad \lambda_2 = -10^3; \quad \lambda_3 = 1 \cdot 10^{-14}$$

Steifigkeit daher $S = 6 \cdot 10^{20}$!

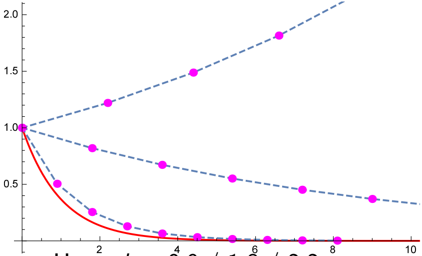
Gegeben: Anfangswertproblem für $y(x)$

$$\begin{aligned} y' &= -y \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

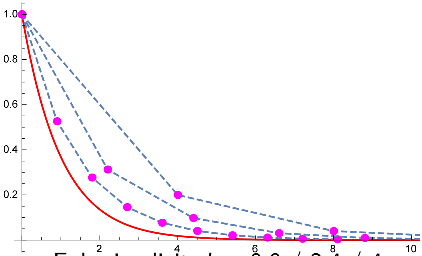
Mit wachsendem x divergieren das explizite Euler- und das Heun-Verfahren bei Schrittweiten $h > 2$. Das implizite Eulerverfahren berechnet – unabhängig von h – korrekt $y(x) \to 0$ für $x \to \infty$.



Euler explizit, $h = 0{,}9$ / $1{,}8$ / $2{,}2$



Heun, $h = 0{,}9$ / $1{,}8$ / $2{,}2$



Euler implizit, $h = 0{,}9$ / $2{,}4$ / 4

Stabilität

Ein Verfahren heißt stabil bei Schrittweite h, wenn für das Modellproblem

$$y' = -y \qquad y(0) = 1$$

die numerische Lösung mit wachsendem x nach Null konvergiert.

- Es gibt verschiedene Definitionen für Stabilität eines numerischen Verfahrens.
- Allgemein kann man sich merken: Implizite Verfahren – immer stabil, expliziten Verfahren – nur bei kleinen Schrittweiten stabil.
- Stabilitätsprobleme treten vor allem bei steifen Differentialgleichungen auf. Für solche Probleme sind implizite Verfahren besser geeignet.

Stabilitätsgebiet

eine Definition für allgemeinere Modellprobleme

Diese Stabilitäts-Definition verwendet die Testgleichung

$$y' = \lambda y \qquad y(0) = 1$$

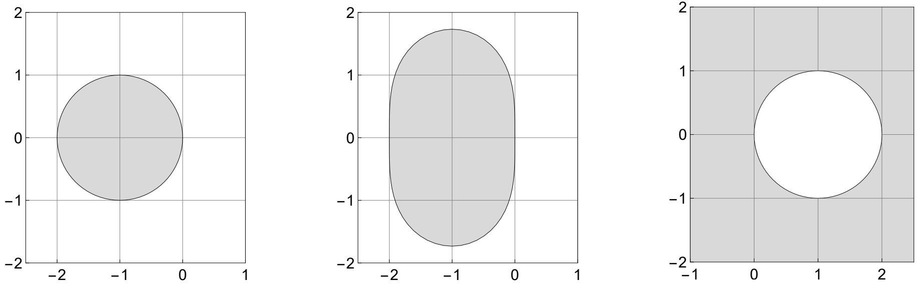
Sie untersucht dabei $\lambda \in \mathbb{C}$.

Stabilitätsgebiet eines Verfahrens

Die Menge aller $\lambda \in \mathbb{C}$, für die das numerische Verfahren mit fixer Schrittweite $h = 1$ bei obiger Testgleichung eine nach Null konvergierende Folge von Näherungswerten liefert.

Stabilitätsgebiet

Die Stabilitätsgebiete dreier Verfahren sind hier als graue Regionen in der komplexen Ebene dargestellt. Von links nach rechts: explizites Euler-Verfahren, Heun-Verfahren, implizites Euler-Verfahren



Interpretation bei allgemeiner Schrittweite

Numerische Lösung von $y' = \lambda y$ mit Schrittweite h ist nur stabil, wenn λh im Stabilitätsgebiet liegt.

Stabilitätsgebiet

Was bedeutet diese Definition - warum auch komplexe λ?

Stabilität ist vor allem ein Problem bei steifen Systemen. Dabei sind die Eigenwerte λ der Jacobi-Matrix bestimmend: Für alle λ muss λh im Stabilitätsgebiet liegen.

Beispiel: System

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -\frac{8}{5} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}$$

Eigenwerte $\lambda_{1,2} = -\frac{4}{5} \pm i\frac{3}{5}$ liegen im Stabilitätsgebiet des expliziten Eulerverfahrens. Numerische Lösung mit Schrittweite $h = 1$ konvergiert.

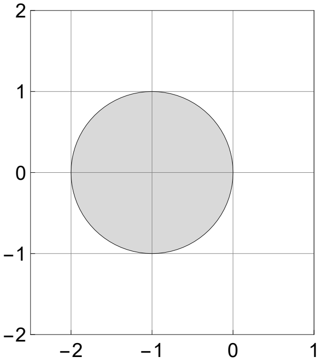
Prüfungsfrage: Stabilitätsgebiet

Die graue Region zeigt das Stabilitätsgebiet des expliziten Eulerverfahrens.
Für welche Gleichungen ist dieses Verfahren bei Schrittweite $h = 1$ numerisch sinnvoll?

$$y' = -y/5$$

$$y' = -5y$$

$$y'' + y' + y = 0$$



Prüfungsaufgabe: Steifigkeit

Gegeben ist für $y_1 = y_1(x)$ und $y_2 = y_2(x)$ das System von Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\begin{aligned} y_1' &= -1011 y_1 + 1005 y_2 \\ y_2' &= 1005 y_1 - 1011 y_2 \end{aligned}$$

1. Geben Sie ein Maß für die Steifigkeit dieses Systems an.
2. Wie groß darf die Schrittweite h eines expliziten Eulerverfahrens für eine sinnvolle Näherungslösung dieser Aufgabe höchstens sein?

Fehlerordnung p und Genauigkeit

Zusammenhang Schrittweite h — globaler Diskretisierungsfehler g

Schrittweite und Fehler

stehen bei Fehlerordnung p im Verhältnis

$$\frac{g_2}{g_1} \approx \left(\frac{h_2}{h_1}\right)^p$$

Hohes p — hohe Genauigkeit für $h \to 0$

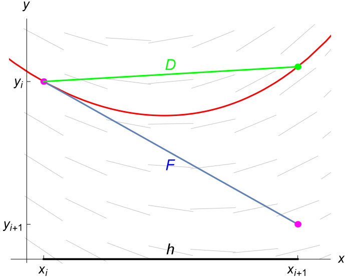
Warnung!

Das gilt nur für glatte (=genügend oft differenzierbare) Funktionen

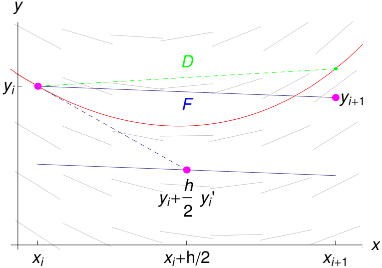
Enthält die Differentialgleichung nicht (oder nicht ausreichend oft) differenzierbare Terme, dann nützt hohes p gar nichts!

Lokaler Diskretisierungsfehler für $y' = f(x, y)$

Einfaches Euler-Verfahren, $p = 1$



Modifiziertes Euler-Verfahren, $p = 2$



$$D - F = \frac{h}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}\right) + O(h^2)$$

$$D - F = \frac{h^2}{24}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \cdots + f^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\right) + O(h^3)$$

Taylorreihenentwicklung liefert Ausdrücke für $D - F$.
Darin treten höhere Ableitungen von f auf.

Hohe Ordnung schlecht bei rauhem f!

Beim klassischen Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung liefert die Taylorreihenentwicklung für den lokalen Diskretisierungsfehler

$$D - F = \frac{h^4}{2880}\left(-\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} - 4f\frac{\partial^4 f}{\partial x^3 \partial y} - 6f^2\frac{\partial^4 f}{\partial x^2 \partial y^2} + \dots\right) + O(h^5)$$

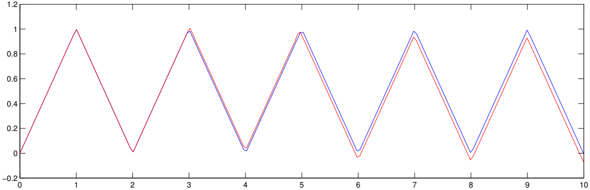
Darin treten partielle Ableitungen von f bis zur vierten Ordnung auf.

- Nur wenn diese Ableitungen existieren, gilt die hohe Fehlerordnung.
- Ist f nicht ausreichend differenzierbar, verwenden Sie lieber gleich ein Verfahren mit niedriger Ordnung.
- MATLABs Schrittweiten-Steuerung verlässt sich auf die Gültigkeit der Fehlerformeln, nicht ausreichend glattes f ruiniert die Schrittweitensteuerung.

Beispiele: $y' = f(x,y)$ für nicht glatte f

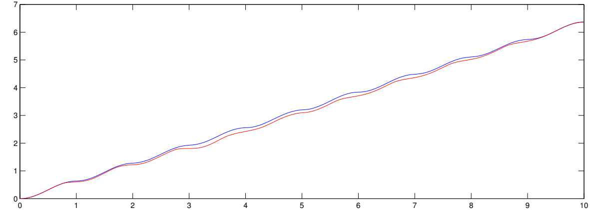
f ist Rechtecksfunktion $f(x,y) = \text{sign}(\sin(\pi x))$

Lösung $y(x)$



f ist Sinus-Halbwelle $f(x,y) = |\sin(\pi x)|$

Lösung $y(x)$



Die Lösungen von `ode15s` und `ode45` driften sichtlich auseinander.

Prüfungsaufgabe

Für die Differentialgleichung $y' = -\sin x$ mit Anfangsbedingung $y(0) = 1$ lautet die exakte Lösung $y(30) = \cos(30) = 0{,}154251$.
Mit Schrittweite $h = 1/2$ berechnen

	$y(30) =$
Das einfache Euler-Verfahren	$-0{,}0750628$
Das modifizierte Euler-Verfahren	$0{,}145377$
Das RK Verfahren 4. Ordnung	$0{,}154233$

Wie groß ist jeweils der globalen Diskretisierungsfehler?
Welche Schrittweite müssten Sie jeweils verwenden, wenn Sie $y(30)$ mit einem absoluten Fehler $< 10^{-6}$ berechnen wollen?

Die Differentialgleichung lautet nun $y' = |\sin(10x)|$, gleiche Anfangsbedingung, gleiche Schrittweite. Exakte Lösung $y(30) = 20{,}09779034$. Die numerischen Ergebnisse der drei Verfahren sind 19,8599 ; 20,1030 ; 20,1053.
Was können Sie hier zum Zusammenhang Ordnung–Schrittweite–Genauigkeit sagen?