Numerieke Methoden voor Differentiaalvergelijkingen

Numerieke Methoden voor Differentiaalvergelijkingen

C. Vuik P. van Beek F. Vermolen J. van Kan

VSSD

Eerste druk 2006

Uitgegeven door:
VSSD
Leeghwaterstraat 42, 2628 CA Delft, The Netherlands
tel. +31 15 278 2124, telefax +31 15 278 7585, e-mail: hlf@vssd.nl
internet: http://www.vssd.nl/hlf
URL over dit boek: http://www.vssd.nl/hlf/a018.htm

Printed in the Netherlands

ISBN-10 90-71301-74-5
ISBN-13 9789071301742

NUR 919

Trefwoorden: numerieke wiskunde

Voorwoord

De meeste (praktische) problemen zijn niet meer met pen en papier op te lossen. De oplossing kan alleen benaderd worden door gebruik te maken van numerieke methoden. Heel vaak kunnen hiervoor subroutines uit bestaande programma pakketten gebruikt worden. Hierbij zijn er verschillende methoden, die gebruikt kunnen worden. Het doel van dit boek is om een verstandige keuze uit deze methoden te kunnen maken, dat wil zeggen: de problemen worden snel opgelost en de gemaakte benaderingsfout is klein.
In dit boek worden numerieke methoden besproken voor het oplossen van differentiaalvergelijkingen. We beperken ons tot gewone differentiaalvergelijkingen, uitgezonderd het hoofdstuk over de warmte-vergelijking waarin een partiële differentiaalvergelijking behandeld wordt. Een aantal numerieke basistechnieken zoals interpolatie, numerieke integratie en het oplossen van niet-lineaire vergelijkingen, kunnen ook buiten de context van differentiaalvergelijkingen gebruikt worden.
De meeste numerieke wiskundeboeken zijn nogal theoretisch van aard of bestaan uit numerieke recepten. Dit boek is bedoeld als een tussenvorm.

Aan het einde van dit boek worden een aantal boeken gegeven voor verdere studie.

Hoofdstukken, paragrafen en opgaven met een *, vallen buiten het Delft Instellings Pakket.

C. Vuik
Delft, januari 2007

Inhoud

VOORWOORD V

1 INLEIDING 1
- 1.1 Enkele historische opmerkingen 1
- 1.2 Wat is numerieke wiskunde? 1
- 1.3 Waarom numerieke wiskunde? .2
- 1.4 Afrondfouten 3
- 1.5 Het O-symbool van Landau 7
- 1.6 Herhaling begrippen uit de analyse 8
- 1.7 Samenvatting 10
- 1.8 Opgaven 10

2 INTERPOLATIE 11
- 2.1 Inleiding 11
- 2.2 Lineaire interpolatie 11
- 2.3 Lagrange interpolatie 14
- 2.4 Interpolatie met functiewaarden en afgeleiden * 16
  - 2.4.1 Taylorpolynoom 16
  - 2.4.2 Interpolatie in het algemeen 17
  - 2.4.3 Hermite interpolatie 18
- 2.5 Interpolatie met splines 20
- 2.6 Samenvatting 23
- 2.7 Opgaven 23

3 NUMERIEK DIFFERENTIËREN 25
- 3.1 Inleiding 25
- 3.2 Eenvoudige differentieformules voor de eerste afgeleide 25
- 3.3 Algemene formules voor de eerste afgeleide 29

3.4 Relatie tussen differentieformules en interpolatie * 31
3.5 Differentieformules voor hogere afgeleiden 32
3.6 Richardson's extrapolatie 34
3.6.1 Inleiding . 34
3.6.2 Schatting van de fout in de praktijk 35
3.6.3 Nauwkeuriger formules via Richardson's extrapolatie* 36
3.7 Samenvatting 37
3.8 Opgaven 37

4 NIET-LINEAIRE VERGELIJKINGEN 38
4.1 Inleiding 38
4.2 Een eenvoudige nulpuntsmethode 38
4.3 Vaste punt iteratie 40
4.4 De Newton-Raphson methode 42
4.5 Stelsels niet-lineaire vergelijkingen 46
4.6 Samenvatting 46
4.7 Opgaven 47

5 NUMERIEKE INTEGRATIE 48
5.1 Inleiding 48
5.2 Eenvoudige numerieke integratieformules 48
5.3 Newton-Cotes formules 53
5.4 Gauss formules* 59
5.5 Samenvatting 60
5.6 Opgaven 60

6 NUMERIEKE TIJDSINTEGRATIE VOOR BEGINWAARDEPROBLEMEN 62
6.1 Inleiding 62
6.2 Theorie van beginwaardeproblemen 62
6.3 Eenstapsmethoden 64
6.4 Testvergelijking en versterkingsfactor. 68
6.5 Stabiliteit 69
6.6 Lokale en globale afbreekfout, consistentie en convergentie 71
6.7 Globale afbreekfout en foutschattingen 78
6.8 Numerieke methoden voor stelsels differentiaalvergelijkingen 80
6.9 Stabiliteit van numerieke methoden voor teststelsels 84
6.10 Stijve differentiaalvergelijkingen . 91
6.11 Meerstapsmethoden* 97
6.12 Samenvatting 100
6.13 Opgaven 100

7 DE EINDIGE DIFFERENTIEMETHODE VOOR RANDWAARDEPROBLEMEN 103
7.1 Inleiding 103

7.2 De eindige differentiemethode 104
7.3 Herhaling van enkele lineaire algebra begrippen 105
7.4 Consistentie, stabiliteit en convergentie. 106
7.5 De conditie van de discretisatiematrix 109
7.6 Neumann randvoorwaarde 110
7.7 Het algemene probleem* 111
7.8 De convectie-diffusie vergelijking 112
7.9 Niet-lineaire randwaardeproblemen 114
7.10 Samenvatting 115
7.11 Opgaven 116

8 DE INSTATIONAIRE WARMTEVERGELIJKING* 117
8.1 Inleiding 117
8.2 Afleiding van de instationaire warmtevergelijking 117
8.3 De gediscretiseerde vergelijking 118
8.4 Samenvatting 121

LITERATUUR 122

TREFWOORDEN 124

1 Inleiding

1.1 Enkele historische opmerkingen

De moderne toegepaste wiskunde begint in de 17e en 18e eeuw met mensen als Stevin, Descartes, Newton en Euler. Numerieke aspecten maakten op natuurlijke wijze deel uit van de analyse; de term numerieke wiskunde was echter onbekend. Numerieke methoden bedacht door Newton, Euler en later Gauss spelen ook vandaag nog een belangrijke rol.

In de 18e en 19e eeuw werden voor allerlei deelgebieden van de natuurkunde, zoals de mechanica en de stromingsleer, fundamentele wetten geformuleerd in de vorm van eenvoudig ogende wiskundige vergelijkingen. Deze bleken, tot veler teleurstelling, alleen in heel speciale gevallen analytisch te kunnen worden opgelost. De opkomende techniek ontwikkelt zich dan ook goeddeels los van de wiskunde. De komst van de computer heeft hierin verandering gebracht. Met gebruik van de computer is het mogelijk met gedetailleerde en realistische wiskundige modellen en numerieke methoden nauwkeurige kwantitatieve informatie te verwerven, betreffende een veelheid van verschijnselen en processen in de natuur en in de techniek. De toepassing van computers en numerieke methoden is algemeen geworden. Steekproeven wijzen uit dat in ca. 70% van de artikelen in de vaktijdschriften van de ingenieurs-wetenschappen wiskundige modellen en methoden worden gebruikt, die niet triviaal zijn.

Berekeningen zijn meestal goedkoper dan experimenten; verder kunnen experimenten onmogelijk of gevaarlijk zijn. Vaak kunnen experimenten alleen op verkleinde schaal worden uitgevoerd, wat de resultaten minder betrouwbaar maakt.

1.2 Wat is numerieke wiskunde?

Numerieke wiskunde is de leer der methoden voor het getalsmatig benaderen van oplossingen van wiskundige vergelijkingen met eindige rekenprocessen.

In grote delen van de wiskunde zijn de belangrijkste concepten die van afbeelding en verzameling. Voor de numerieke wiskunde moet hieraan worden toegevoegd het concept van berekenbaarheid. Berekenbaarheid houdt in dat het resultaat verkregen kan worden met een eindig aantal operaties (zodat de rekentijd eindig is) op een eindige deelverzameling van de rationele getallen (omdat het geheugen van de computer eindig is). In het algemeen zal het resultaat een benadering zijn van de oplossing van het wiskundige probleem. De meeste wiskundige vergelijkingen bevatten immers operatoren, die op een oneindig voortlopend proces gebaseerd zijn, zoals integralen en afgeleiden. Verder zijn de oplossingen functies, waarvan het domein en bereik ook irrationele getallen bevatten.

Omdat in het algemeen slechts benaderingen van oplossingen verkregen kunnen worden, kunnen in de numerieke wiskunde slechts die problemen zinvol behandeld worden die bestand zijn tegen kleine verstoringen, oftewel stabiel zijn. De vraag naar de stabiliteit heeft de numerieke wiskunde gemeen met de klassieke wiskunde. Een belangrijk hulpmiddel bij de studie van stabiliteit is de *functionaalanalyse*. Deze discipline speelt ook een belangrijke rol bij de studie van de fout: het verschil tussen de numerieke benadering en de exacte oplossing.

De consequenties van het rekenen met een eindige deelverzameling van de rationele getallen, zijn velerlei. Zo kan een computer bijvoorbeeld geen onderscheid maken tussen polynomen van voldoend hoge graad. Zodoende kan men niet zonder meer vertrouwen op methoden die gebaseerd zijn op de hoofdstelling van de algebra (namelijk, dat een n^e graads polynoom precies n nulpunten heeft). De fouten die het gevolg zijn van het werken met een eindig aantal cijfers heten *afrondfouten*. Aan afrondfouten zal in het vervolg van dit hoofdstuk nog enige aandacht geschonken worden.

Een belangrijk aspect van de numerieke wiskunde is de nadruk op *efficiency*. Een vergroting van efficiency, dat wil zeggen vermindering van het aantal benodigde operaties en/of het benodigde geheugen, wordt elders in de wiskunde niet als een essentiële vooruitgang gezien, in de numerieke wiskunde echter wel. Deze vooruitgang is van groot praktisch belang. Het einde hiervan is nog lang niet in zicht. Hier liggen nog vele uitdagingen voor creatieve geesten. Verder zal nog veel overhoop gehaald worden door veranderingen in computerarchitectuur.

1.3 Waarom numerieke wiskunde?

Een groot voordeel van numerieke wiskunde is dat een numeriek antwoord verkregen kan worden voor problemen, die geen "analytische" oplossing hebben. Neem bijvoorbeeld de integraal

$$\int_0^{\pi} \sqrt{1+\cos^2(x)}dx \,,$$

die de lengte geeft van één boog van de kromme gegeven door $y = \sin x$. Er bestaat voor deze integraal geen oplossing in gesloten vorm. Echter met een numerieke methode kan de integraal eenvoudig bepaald worden. Een bijkomend voordeel is dat een numerieke methode alleen gebruik maakt van standaardfunctie-evaluaties en de operaties: optellen, aftrekken, vermenigvuldigen en delen. Omdat deze operaties precies de functies zijn die een computer kan uitvoeren, vormen numerieke wiskunde en computers een perfecte combinatie.

Een voordeel van een analytische methode is dat deze een oplossing geeft in termen van wiskundige functies. Hieruit kan men inzicht verkrijgen in het gedrag en de eigenschappen van de oplossing. Bij een numerieke oplossing is dit niet het geval. Aan de andere kant, er wordt vaak gebruik gemaakt van een visualizatie om inzicht in het gedrag van de oplossing te verkrijgen. Het maken van een grafiek met een numerieke methode is meestal efficiënter dan het evalueren van de analytische oplossing in een groot aantal punten.

1.4 Afrondfouten

Een computer werkt niet met oneindige precisie. Reële getallen worden in computers opgeslagen als

$$\pm 0.d_1 d_2 ... d_n \cdot \beta^e$$

waarbij $d_1 > 0$ en $0 \leq d_i < \beta$. We noemen dit een floating point getal (representatie) waarbij: de mantisse is $0.d_1 d_2 ... d_n$, de basis is β en e (geheel getal) is de exponent, waarbij $L < e < U$. Vaak is $\beta = 2$, (binaire representatie) $n = 24$ (*enkele precisie*). In dubbele precisie geldt $n = 56$. We zeggen dan dat de machine rekent met n cijfers.

Laat voor $x \in \mathbb{R}$ gelden

$$0.d_1 ... d_n \cdot \beta^e \leq x < 0.d_1 d_2 ... (d_n + 1) \cdot \beta^e$$

waarbij we x gemakshalve positief veronderstellen. Afronding houdt in dat x vervangen wordt door het dichtstbijzijnde floating point getal, dat we $fl(x)$ zullen noemen. De hierdoor veroorzaakte fout wordt *afrondfout* genoemd. Laten we schrijven

$$fl(x) = x(1 + \varepsilon). \tag{1.1}$$

We noemen $|fl(x) - x| = |\varepsilon x|$ de *absolute fout* en $\frac{|fl(x)-x|}{|x|} = |\varepsilon|$ de *relatieve fout*. Het verschil tussen de floating point getallen waar x tussen ligt is β^{e-n}. Door afronden geldt $|fl(x) - x| \leq \frac{1}{2}\beta^{e-n}$, zodat voor de absolute fout geldt:

$$|\varepsilon x| \leq \frac{1}{2}\beta^{e-n}.$$

Aangezien $|x| \geq \beta^{e-1}$ (omdat $d_1 > 0$) geldt voor de relatieve fout:

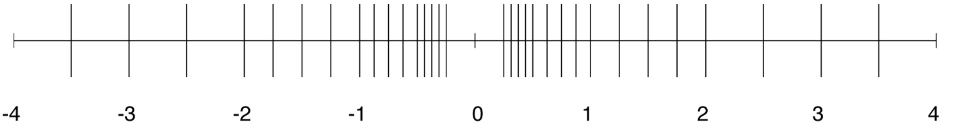
$$|\varepsilon| \leq eps \tag{1.2}$$

met de relatieve precisie van de computer *eps* gedefinieerd door

$$eps = \frac{1}{2}\beta^{1-n} \; . \tag{1.3}$$

Met $\beta = 2$ en $n = 24$ geldt dus $eps \cong 6 \cdot 10^{-8}$: er wordt met ongeveer 7 decimale cijfers gerekend.

Figuur 1.1 toont de ligging van de floating point getallen $0.1d_2d_3 \cdot \beta^e$; $e = -1, 0, 1, 2$ in het binaire stelsel ($\beta = 2$). Deze floating point getallen liggen ongelijk verdeeld en er is een gat bij 0. Als een rekenresultaat in dit gat terecht komt noemen we dit *underflow* ($x < 0.1\beta^L$). De meeste machines geven een waarschuwing, vervangen het resultaat door 0 en gaan door. Als de absolute waarde van een rekenresultaat te groot is, is er sprake van



Figuur 1.1 De ligging van $\pm 0.1d_2d_3 \cdot \beta^e$, $\beta = 2, e = -1, 0, 1, 2$.

overflow ($x \geq \beta^U$). De machine waarschuwt en stopt.

Hoe voeren computers rekenkundige operaties uit met floating point getallen? Rekenprocessoren zijn ingewikkeld. Meestal wordt het volgende model gebruikt ter benadering van de werkelijkheid. Laat $\circ$ een rekenkundige operatie zijn ($+, -, \times$ of /), en laten x en y twee floating point getallen zijn. Dan is de machine-uitkomst van de operatie:

$$z = fl(x \circ y) \tag{1.4}$$

met $x \circ y$ de exacte uitkomst. Deze is in het algemeen geen floating point getal, zodat er een fout gemaakt wordt. Volgens (1.1) geldt

$$z = \{x \circ y\}(1 + \varepsilon), \tag{1.5}$$

voor één of andere ε die aan (1.2) voldoet en $z \neq 0$.

Stel dat x en y geen floating point getallen zijn, maar benaderd worden met $fl(x)$ en $fl(y)$ dus $fl(x) = x(1 + \varepsilon_1)$, $fl(y) = y(1 + \varepsilon_2)$, dan geldt voor de absolute fout van het berekende antwoord:

$$|x \circ y - fl(fl(x) \circ fl(y))| \leq |x \circ y - fl(x) \circ fl(y)| + |fl(x) \circ fl(y) - fl(fl(x) \circ fl(y))|. \tag{1.6}$$

We zien dat de fout de som is van de doorwerking van de afrondfouten (storingen) in de data en de floating point fout, die gelijk is aan het verschil tussen een exacte bewerking en een floating point bewerking.

We zullen eerst een aantal voorbeelden geven om te laten zien, hoe afrondfouten doorwerken. Daarna zullen we de algemene rekenregels geven.

Voorbeeld 1.4.1

We nemen $x = \frac{5}{7}$ en $y = \frac{1}{3}$ en gebruiken een denkbeeldige machine waarin gerekend wordt met $\beta = 10$ en 5 cijfers. In Tabel 1.1 staan de resultaten van verschillende berekeningen toegepast op $fl(x) = 0.71429 \times 10^0$ en $fl(y) = 0.33333 \times 10^0$. We zullen laten zien hoe de tabel tot stand gekomen is. Na normalisatie vinden we voor de optelling:

$$fl(x) + fl(y) = (.71429 + .33333) \times 10^0 = 0.1047620000... \times 10^1$$

Dit resultaat moet naar 5 cijfers worden afgerond:

$$fl(fl(x) + fl(y)) = 0.10476 \times 10^1.$$