

Beschouw de partiële DV

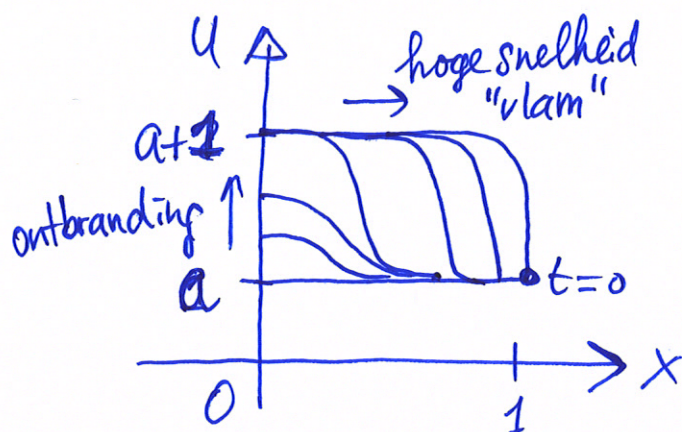
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \varepsilon \Delta u + D(1+u-u)e^{-\delta/u}$$

$\frac{\partial u}{\partial t}$ → tijdsafgeleide
 ε → diffusiecoëfficiënt
 $\Delta u = \text{div}(\text{grad}(u))$
 $D(1+u-u)e^{-\delta/u}$ → reactieterm
 $D = \frac{R e^{\delta}}{a \delta}$ → reactiesnelheid
 δ → activeeringsenergie
 a → warmteoverdracht
 Damkohlergetal

Dit is een model voor het temperatuurverloop $u(x, y, z, t)$ van een reagerende stof in een chemisch systeem

Hoe kom je aan oplossingen van deze pDV?

In één ruimtedimensie: $u(x, t)$ en $\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$



randvoorwaarden:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \text{ en } u \Big|_{x=1} = a$$

Nog steeds is de vraag: hoe krijg je deze grafieken?

Nog een stapje simpeler dan maar: $\varepsilon = 0$

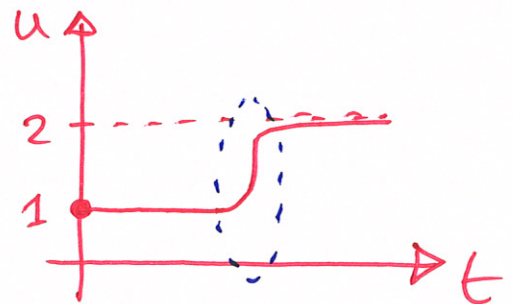
$\Rightarrow$ gewone DV!

$$(a=1): \begin{cases} u' = D(2-u)e^{-\varepsilon/u} \\ u(0) = 1 \end{cases}$$

$u(t)$ gezocht

scheiden van variabelen?

$$\frac{du}{dt} = D(2-u)e^{-\varepsilon/u}$$



$$\Leftrightarrow \underbrace{\int \frac{du}{D(2-u)e^{-\varepsilon/u}}}_{= ???} = \underbrace{\int dt}_{= t}$$

helaas ---

geen primitieve
beschikbaar

geen formule voor $u(t)$ bekend --- ook niet via andere "trucs".

$\leadsto$ numerieke oplossingen (m.b.v. de computer)

We gaan dit voor een algemenere situatie uitwerken

Bekijk $\begin{cases} u'(t) = f(u(t), t) \\ u(t_0) = u_0 \end{cases}$

$\uparrow$ gegeven $\uparrow$ gegeven

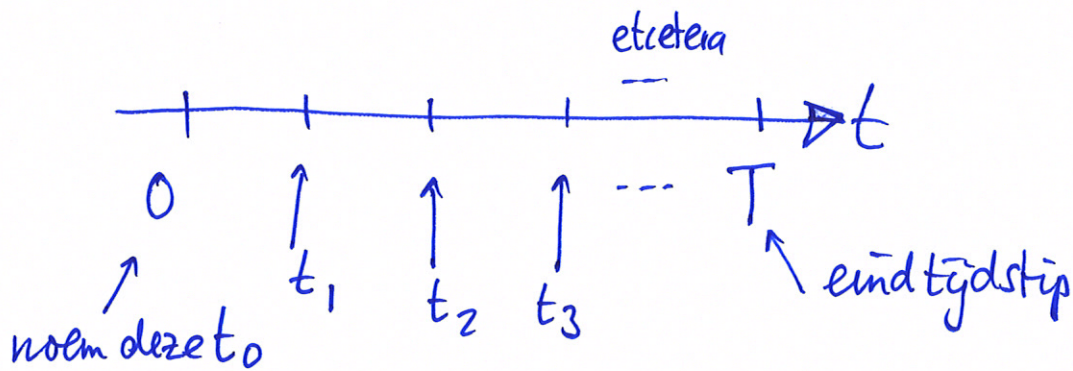
f kan ook "los" van t afhangen met alleen via $u(t)$

gegeven

hoe gaan we dit doen?

(3)

- * verdeel de t -as ("de tijd t ")
in eindelijk veel stukken:
gelijke



- * noem ieder stukje: Δt

dan is $t_0 = 0$

$$t_1 = t_0 + \Delta t = \Delta t$$

$$t_2 = t_1 + \Delta t = 2\Delta t$$

$\vdots$

$$t_N = T = N \cdot \Delta t$$

N = aantal stappen
om in $t = T$ te komen

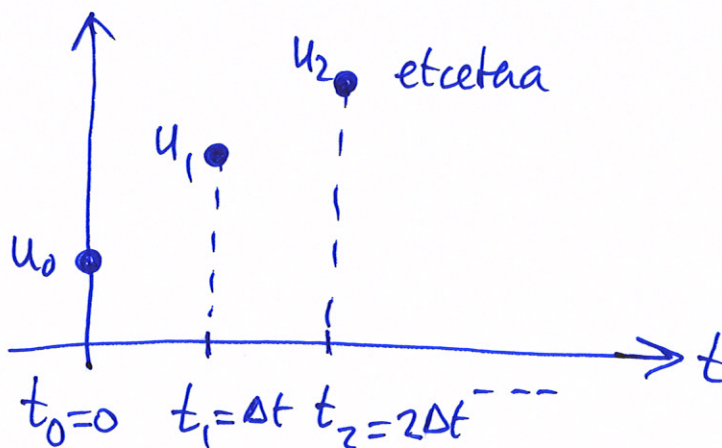
- * Noem de exacte (onbekende) waarden in $t_0, t_1, \dots, t_N$:
 $u(t_0), u(t_1), \dots, u(t_N)$

- * Noem de benaderingen via de computer (die we nog moeten construeren): $u_0, u_1, \dots, u_N$

Dwz $u(t_0) \approx u_0, u(t_1) \approx u_1, \dots, u(t_N) \approx u_N$

$\downarrow u(t_0) = u_0$ (wel exact! want beginvoorwaarde gegeven!)

in een diagram:



- hoe kom je aan de $u_1, u_2, \dots$?
- hoe goed is je benadering?
- hoe hangt alles van Δt (of N) af?
- wat gebeurt er voor $\Delta t \rightarrow 0$ ("convergentie")?
- zijn er adders onder het gras ---? --- ja

Bekijk een definitie van afgeleide:

$$u'(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(t+\Delta t) - u(t)}{\Delta t}$$

$$\left(\text{of } \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(t) - u(t-\Delta t)}{\Delta t} \quad \text{of } \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(t+\Delta t) - u(t-\Delta t)}{2\Delta t} \right)$$

of -----

voor "kleine" Δt : $u'(t) \approx \frac{u(t+\Delta t) - u(t)}{\Delta t}$

De DV zegt: $u' = f$



$$u(t+\Delta t) \approx u(t) + \Delta t \cdot u'(t)$$

$$= u(t) + \Delta t \cdot f(u(t), t)$$

$u(t) \sim u$ op een bepaald tijdstip

$u(t+\Delta t) \sim u$ op een volgend tijdstip

Δt : kiezen we

f : gegeven.

Stel $u(t)$ bekend, dan kunnen we hiermee $u(t+\Delta t)$ uitrekenen.

Maar dan ook mogelijk om $u(t+2\Delta t)$ te bepalen:

$$u(t+2\Delta t) \approx u(t+\Delta t) + \Delta t \cdot f(u(t+\Delta t), t+\Delta t)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\substack{\uparrow \text{ gekozen} \\ \uparrow \text{ zo juist bepaald}}} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\substack{\uparrow \text{ bekend}}}$

en dan ook:

$$u(t+3\Delta t) \approx u(t+2\Delta t) + \Delta t \cdot f(u(t+2\Delta t), t+2\Delta t)$$

te berekenen.

etcetera ---

Noem $u(t+2\Delta t) = u_2$

$u(t+3\Delta t) = u_3$

Dan krijgen we: $u_1 = u_0 + \Delta t \cdot f(u_0, t_0)$

$$u_2 = u_1 + \Delta t \cdot f(u_1, t_1)$$

$$u_3 = u_2 + \Delta t \cdot f(u_2, t_2)$$

$\vdots$

$$u_N = u_{N-1} + \Delta t \cdot f(u_{N-1}, t_{N-1})$$

(6)

Het "recept" wordt: op $t=0$: $\begin{cases} u_0 = \dots \\ t_0 = 0 \end{cases}$

$$\begin{cases} u_{n+1} = u_n + \Delta t f(u_n, t_n) \\ t_{n+1} = t_n + \Delta t \end{cases} \quad n = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

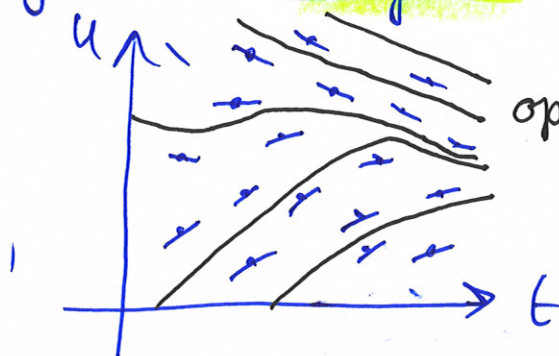
↑
vanwege
 u_{n+1}

Deze methode heet Euler-Forward
afgekort als EF of Expliciet Euler

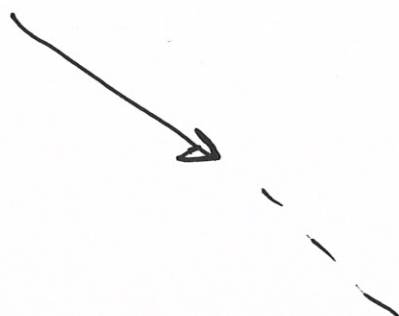
Een zogenaamd expliciete methode: je kunt de volgende benaderingen direct uitrekenen vanuit de vorige zonder extra berekeningen.

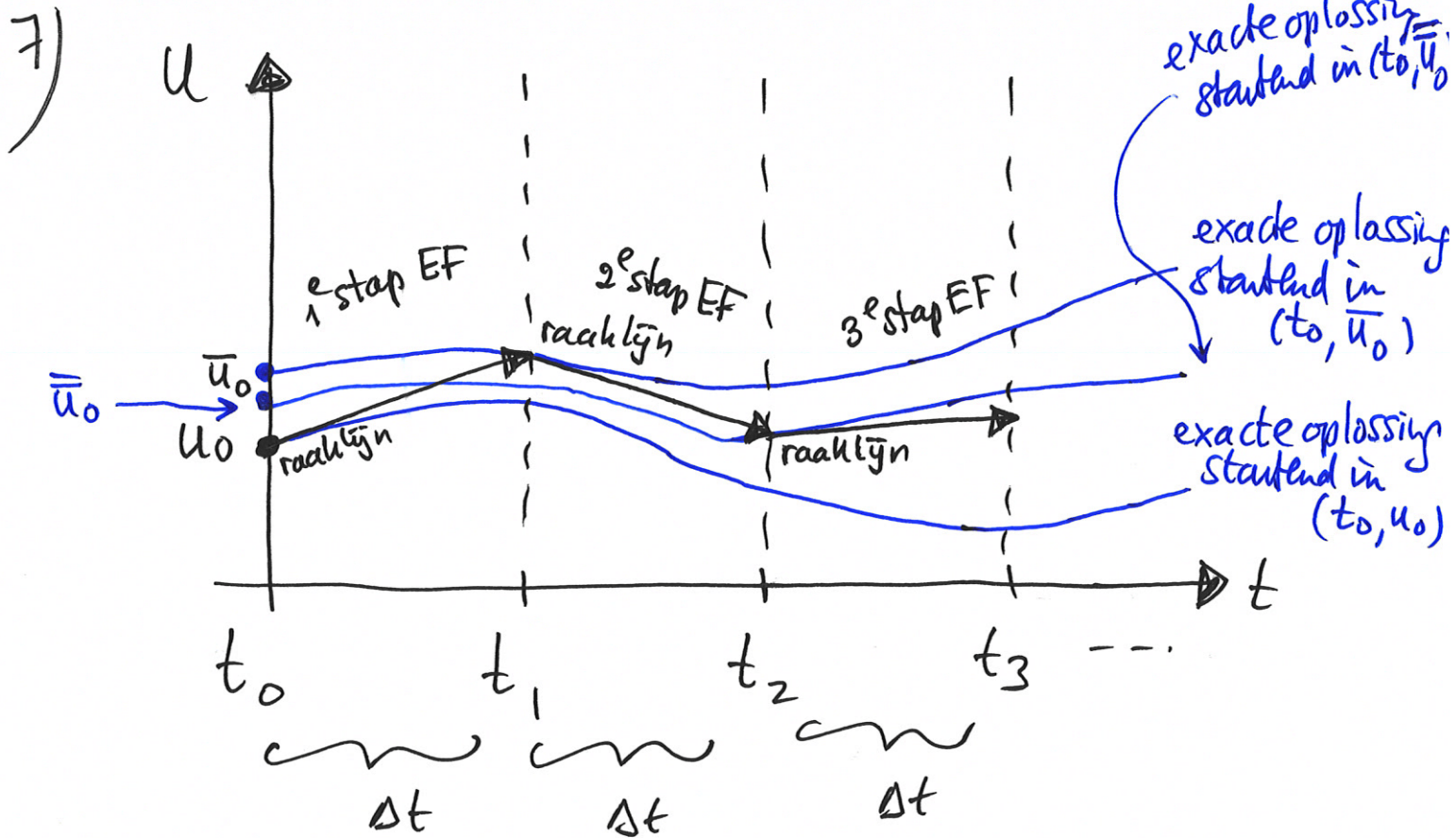
Grafische interpretatie van EF

Herinner je het richtingsveld van een gegeven DV



oplossingen van de DV
volgen het richtingsveld





- hoe goed is deze benadering? (nauwkeurigheid)
 - wat als de beginvoorwaarde u_0 iets verstoord wordt? (bijv. door een afronding)
 - zijn er "betere" methoden ---?
- "numerieke stabiliteit"

→ numerieke oplossing: $u_{n+1} = u_n + \Delta t f(u_n, t_n)$

→ Taylor rond tijdstip t_n :
$$u(t_{n+1}) = u(t_n) + (t_{n+1} - t_n) u'(t_n) + \frac{(t_{n+1} - t_n)^2}{2} u''(t_n) + \dots$$

$$\approx u(t_n) + \Delta t u'(t_n) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 u''(t_n)$$

$$\left(\frac{d}{dt} = f(u(t_n), t_n) \right)$$

⇒ op het interval (t_n, t_{n+1}) is het verschil tussen de benaderingsformule en de (bijna) exacte Taylorm formule $\approx \frac{1}{2} (\Delta t)^2 u''(t_n)$

De zogenaamde lokale fout hangt dus af van $(\Delta t)^2$ en $u''(t_n)$.

kan sterk variëren
(afhankelijk van richtingsveld)
⇒ suggereert dat de fout kwadratisch afneemt met Δt .

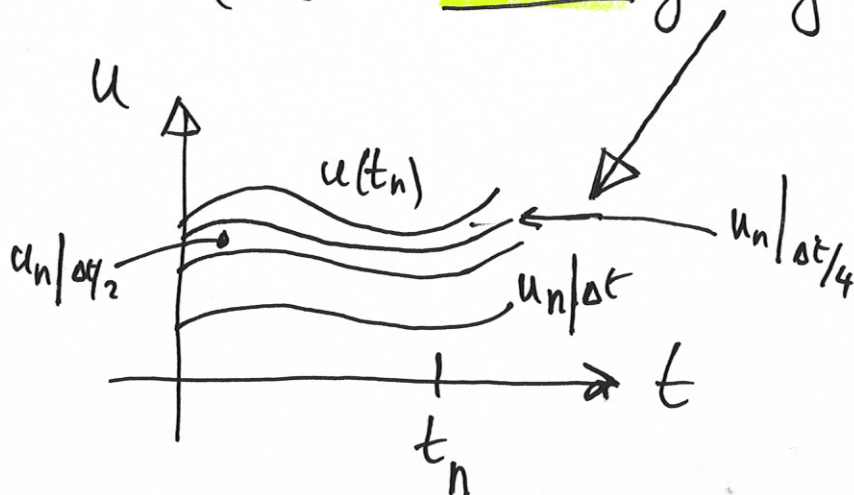
Echter dit is een lokale fout op (t_n, t_{n+1}) .

Als alle voorgaande lokale fouten worden opgeteld

vanaf $(t_0, t_1), (t_1, t_2), \dots, t/m (t_n, t_{n+1})$

dan "verlies" je een macht van Δt (lokale fouten worden opgeteld!) $\leftarrow$

⇒ de globale fout is $\approx$ constante (Δt) $\leftarrow$
(dus een lineaire foutafname)



Nu check numerieke stabiliteit:

(9)

Bekijk het testprobleem: $\begin{cases} u' = \lambda u \\ u(0) = u_0 \end{cases}$

en het verstoorde testprobleem: $\begin{cases} \tilde{u}' = \lambda \tilde{u} \\ \tilde{u}(0) = u_0 + \varepsilon \end{cases}$
↑
"klein"

Pas EF toe op beide problemen:

$$\begin{cases} u_{n+1} = u_n + \Delta t \cdot \lambda u_n & n=0, 1, \dots, N-1 \\ u_0 = u_0 \end{cases}$$

$$\text{en } \begin{cases} \tilde{u}_{n+1} = \tilde{u}_n + \Delta t \cdot \lambda \tilde{u}_n & n=0, 1, \dots, N-1 \\ \tilde{u}_0 = u_0 + \varepsilon \end{cases}$$

Het verschil tussen deze twee voldoet aan:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{n+1} - u_{n+1} &= \tilde{u}_n - u_n + \lambda \Delta t \tilde{u}_n - \lambda \Delta t u_n \\ &= (1 + \lambda \Delta t) (\tilde{u}_n - u_n) \\ &= (1 + \lambda \Delta t) (1 + \lambda \Delta t) (\tilde{u}_{n-1} - u_{n-1}) \\ &= (1 + \lambda \Delta t) (1 + \lambda \Delta t) (1 + \lambda \Delta t) (\tilde{u}_{n-2} - u_{n-2}) \\ &= \dots \\ &= (1 + \lambda \Delta t)^{n+1} (\tilde{u}_0 - u_0) \\ &= (1 + \lambda \Delta t)^{n+1} \cdot \varepsilon \end{aligned}$$

↖ "klein"

Als $|1 + \lambda \Delta t| < 1$, dan blijft de verstoring
op t_{n+1} binnen de perken (stabiele numerieke oplossing) (10)

Als $|1 + \lambda \Delta t| > 1$, dan wordt de
numerieke oplossing "opgeblazen" (instabiel)

Wat betekent dit concreet?

$$-1 < 1 + \lambda \Delta t < 1 \iff -2 < \lambda \Delta t < 0$$

$\Delta t > 0$ en λ wordt < 0 gekozen
(vanwege "stabiele" exacte oplossing)

Dus $\lambda \Delta t > -2$

Bijvoorbeeld $\lambda = -10^8$ (kan gebeuren in de praktijk)

dan $\Delta t < 2 \cdot 10^{-8}$ (zeer klein)

Een impliciete methode: Euler-Bachward (EB)

$$u_{n+1} = u_n + \Delta t \cdot f(u_{n+1}, t_{n+1})$$

$$\left(\text{gebaseerd op: } u'(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(t) - u(t - \Delta t)}{\Delta t} \right)$$

Pas nu hetzelfde principe toe als voor EF

checkzelf $\Rightarrow \tilde{u}_{n+1} - u_{n+1} = \frac{1}{1 - \lambda \Delta t} (\tilde{u}_n - u_n)$

$$\Rightarrow \tilde{u}_{n+1} - u_{n+1} = \frac{1}{(1 - \lambda \Delta t)^{n+1}} \cdot \varepsilon$$

is altijd
in absolute waarde < 1

dus altijd stabiel

!

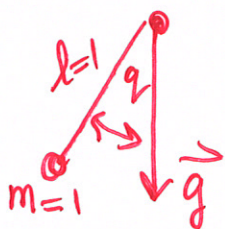
Wat is het nadeel van deze methode?

$$u_{n+1} - \Delta t \cdot f(u_{n+1}, t_{n+1}) - u_n = 0$$

Bekend getal
 ↑
 bekend uit vorige stap
 ↑
 gekozen
 bekende
 functie
 (maar meestal
niet-lineair)
 te bepalen! HOE...? (→ Newton-Raphson)
 zie eerder!

V6 slinger (zonder wrijving)

(12)



q is hier de hoek

hamiltoniaan

energie

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{1}{2} p^2 - \cos(q)$$

$$\vec{F} = m \vec{a}$$

$$\begin{cases} \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p, q) \\ \dot{q} = +\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(p, q) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{q} = p \\ \dot{p} = -\sin(q) \end{cases}$$

zie werkcollege

$$\ddot{q} = -\sin(q)$$

"neem $m=1, l=1, g=1$ "

EF op $\begin{cases} \dot{x} = a(x, y) \\ \dot{y} = b(x, y) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x_{n+1} = x_n + \Delta t a(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \Delta t b(x_n, y_n) \end{cases}$

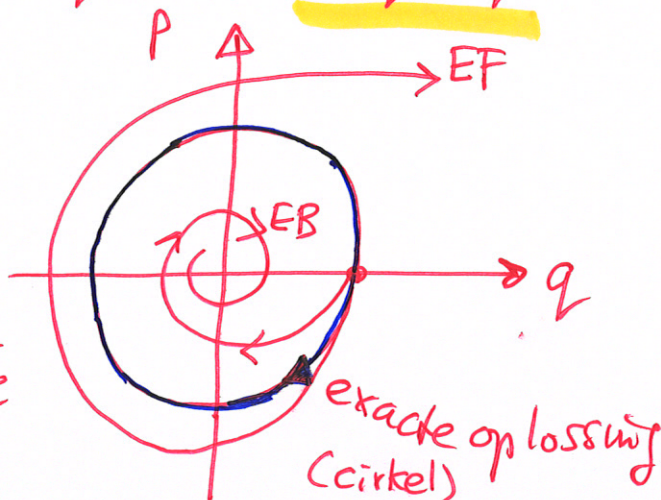
EB : $\begin{cases} x_{n+1} = x_n + \Delta t a(x_{n+1}, y_{n+1}) \\ y_{n+1} = y_n + \Delta t b(x_{n+1}, y_{n+1}) \end{cases}$

"symplectic Euler" : $\begin{cases} x_{n+1} = x_n + \Delta t a(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \Delta t \tilde{b}(\tilde{x}_{n+1}, y_n) \end{cases}$

voor kleine uitwijkingen ; $0 < q \ll 1$: $\sin(q) \approx q$

$$\Rightarrow \begin{cases} \dot{q} = p (= a(q, p)) \\ \dot{p} = -q (= b(q, p)) \end{cases}$$

faseplaatje



Störmer-Verlet methode

aantal deeltjes $N \gg 1$
(veel groter dan)

Hamiltoniaan: $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \vec{p}_i \cdot \vec{p}_i + \sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{N-1} V_{ij} \cdot \|\vec{q}_i - \vec{q}_j\|$

$\uparrow$ atoommassa $\uparrow$ potentiaal functies

Simpleste versie $N=1$

één deeltje ($\leftrightarrow$ "slinger" op blz 12)

$\ddot{q} = f(q)$

numerieke oplossing $\rightarrow q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1} = (\Delta t)^2 f(q_n), n=1, 2, 3, \dots$

twee startwaarden nodig!

q_0 is gegeven

$$q_1 = q_0 + \Delta t \underbrace{v_0}_{= \dot{q}_0} - \frac{(\Delta t)^2}{2} \underbrace{f''(q_0)}_{= \ddot{q}_0} \quad (\text{Taylor!})$$

(per def.) (uit model)

Zie ook wiskollege