SFB-Workshop Time Integration of PDEs

Fehlerschranken für exponentielle Matrix-Splitting-Verfahren

Marius Briel

08. Oktober 2019

uyegb@student.kit.edu

Allgemeines

Wer bin ich?

- Marius Briel
- Mathematik M.Sc. im ersten Semester
- Tutor Numerik I und II
- Hiwi

Allgemeines

Wer bin ich?

- Marius Briel
- Mathematik M.Sc. im ersten Semester
- Tutor Numerik I und II
- Hiwi

Bachelorarbeit

- Fehlerschranken für exponentielle Matrix-Splitting-Verfahren
- Paper von Jahnke und Lubich (2000)
- Betreuer PD Dr. Volker Grimm
- Abgabe am 31. Juli 2019

Überblick

Fehlerschranken für exponentielle Matrix-Splitting-Verfahren

1. Strang-Splitting

Überblick

Fehlerschranken für exponentielle Matrix-Splitting-Verfahren

1. Strang-Splitting
2. Fehlerschranken

Überblick

Fehlerschranken für exponentielle Matrix-Splitting-Verfahren

1. Strang-Splitting
2. Fehlerschranken
3. Anwendung auf die Schrödingergleichung

Strang-Splitting

Lineares Anfangswertproblem

Seien $A, B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und $u : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^m$.

$$\begin{cases} u'(t) = (A + B)u(t)\,, \\ u(0) = u_0 \end{cases} \tag{1}$$

Strang-Splitting

Lineares Anfangswertproblem

Seien $A, B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und $u : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^m$.

$$\begin{cases} u'(t) = (A+B)u(t)\,, \\ u(0) = u_0 \end{cases} \tag{1}$$

hat die Lösung

$$u(t) = e^{t(A+B)}\,.$$

Strang-Splitting

Konvergenz

- Iterationsvorschrift

$$u_{n+1} = e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} u_n$$

Strang-Splitting

Konvergenz

- Iterationsvorschrift

$$u_{n+1} = e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} u_n$$

- lokaler Fehler

$$e^{\tau(A+B)} - e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} = \frac{1}{24}\tau^3 \big(2[[A,B],A] + [[A,B],B]\big) + \mathcal{O}(\tau^4)$$

wobei $[A,B] = AB - BA$

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 1

Es gibt $\alpha \geq 0$ mit

$$||[A, B]v|| \leq c_1||(-A)^\alpha v||$$

für alle $v \in \mathbb{R}^m$.

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 1

Es gibt $\alpha \geq 0$ mit

$$||[A, B]v|| \leq c_1||(-A)^\alpha v||$$

für alle $v \in \mathbb{R}^m$.

Dann haben wir für den lokalen Fehler des Strang-Splittings die Schranke

$$||e^{\frac{1}{2}\tau B}e^{\tau A}e^{\frac{1}{2}\tau B}v - e^{\tau(A+B)}v|| \leq C_1\tau^2||(-A)^\alpha v||$$

für alle $v \in \mathbb{R}^m$. C_1 hängt nur von c_1 und $||B||$ ab.

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 1, Beweisskizze

- Variation-der-Konstanten-Formel (Lemma)

$$e^{\tau(A+B)}v = e^{\tau A}v + \int_0^\tau e^{sA}Be^{(\tau-s)(A+B)}v\ ds$$

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 1, Beweisskizze

- Variation-der-Konstanten-Formel (Lemma)

$$e^{\tau(A+B)}v = e^{\tau A}v + \int_0^\tau e^{sA}Be^{(\tau-s)(A+B)}v\, ds$$

- Fehler der Trapezregel ($= d$) in der ersten Peano-Form schreiben (Lemma)

Lokaler Fehler, Theorem 1, Beweisskizze

- Variation-der-Konstanten-Formel (Lemma)

$$e^{\tau(A+B)}v = e^{\tau A}v + \int_0^\tau e^{sA}Be^{(\tau-s)(A+B)}v\,ds$$

- Fehler der Trapezregel ($= d$) in der ersten Peano-Form schreiben (Lemma)
- lokaler Fehler des Strang-Splitting-Verfahrens:

$$e^{\frac{1}{2}\tau B}e^{\tau A}e^{\frac{1}{2}\tau B}v - e^{\tau(A+B)}v$$

$$= e^{\tau A}v + \frac{1}{2}\tau\big(Be^{\tau A} + e^{\tau A}B\big)v - \Big(e^{\tau A}v + \int_0^\tau e^{sA}Be^{(\tau-s)A}v\,ds\Big) + r$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2}\tau\big(Be^{\tau A} + e^{\tau A}B\big)v - \int_0^\tau e^{sA}Be^{(\tau-s)A}v\,ds}_{=:d} + r$$

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 2

Es gibt $\beta \geq 1 \geq \alpha$ mit

$$||[A,B]v|| \leq c_1||(-A)^\alpha v|| \text{ und } ||[A,[A,B]]v|| \leq c_2||(-A)^\beta v||$$

für alle $v \in \mathbb{R}^m$.

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 2

Es gibt $\beta \geq 1 \geq \alpha$ mit

$$||[A, B]v|| \leq c_1||(-A)^\alpha v|| \text{ und } ||[A, [A, B]]v|| \leq c_2||(-A)^\beta v||$$

für alle $v \in \mathbb{R}^m$.

Dann haben wir für den lokalen Fehler des Strang-Splittings die Schranke

$$||e^{\frac{1}{2}\tau B}e^{\tau A}e^{\frac{1}{2}\tau B}v - e^{\tau(A+B)}v|| \leq C_2\tau^3||(-A)^\beta v||$$

für alle $v \in \mathbb{R}^m$. C_2 hängt nur von c_1, c_2 und $||B||$ ab.

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 2, Beweisskizze

- baut auf dem Beweis von Theorem 1 auf

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 2, Beweisskizze

- baut auf dem Beweis von Theorem 1 auf
- Fehler der Trapezregel ($= d$) in der zweiten Peano-Form schreiben (Lemma)

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 2, Beweisskizze

- baut auf dem Beweis von Theorem 1 auf
- Fehler der Trapezregel ($= d$) in der zweiten Peano-Form schreiben (Lemma)
- lokaler Fehler des Strang-Splitting-Verfahrens:

$$e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} v - e^{\tau(A+B)} v = d + r = d + \underbrace{\tilde{d} + \tilde{r}}_{=r}$$

wobei $\tilde{d} =$

$$\frac{\tau^2}{8}(B^2 e^{\tau A} + 2Be^{\tau A}B + e^{\tau A}B^2)v - \int_0^\tau e^{sA} B \int_0^{\tau - s} e^{\sigma A} B e^{(\tau - s - \sigma)A} v \, d\sigma \, ds$$

Fehlerschranken

Lokaler Fehler, Theorem 2, Beweisskizze

- baut auf dem Beweis von Theorem 1 auf
- Fehler der Trapezregel ($= d$) in der zweiten Peano-Form schreiben (Lemma)
- lokaler Fehler des Strang-Splitting-Verfahrens:

$$e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} v - e^{\tau(A+B)} v = d + r = d + \underbrace{\tilde{d} + \tilde{r}}_{=r}$$

wobei $\tilde{d} =$

$$\frac{\tau^2}{8}(B^2 e^{\tau A} + 2Be^{\tau A}B + e^{\tau A}B^2)v - \int_0^\tau e^{sA} B \int_0^{\tau - s} e^{\sigma A} B e^{(\tau - s - \sigma)A} v \, d\sigma \, ds$$

- $\tilde{d}$ ist Fehler einer Quadraturformel, welche für konstante Funktionen exakt ist

Fehlerschranken

Globaler Fehler, Theorem 3

Es gibt $\alpha \leq \beta = 1$ mit

$$||[A, B]v|| \leq c_1||(-A)^\alpha v|| \text{ und } ||[A, [A, B]]v|| \leq c_2||(-A)^\beta v||$$

für alle $v \in \mathbb{R}^m$.

Fehlerschranken

Globaler Fehler, Theorem 3

Es gibt $\alpha \leq \beta = 1$ mit

$$||[A, B]v|| \leq c_1||(-A)^\alpha v|| \text{ und } ||[A, [A, B]]v|| \leq c_2||(-A)^\beta v||$$

für alle $v \in \mathbb{R}^m$.

Dann haben wir für den globalen Fehler des Strang-Splittings die Schranke

$$||u_n - u(n\tau)|| \leq C\tau^2 \log n \, ||u_0|| \quad (n \geq 2).$$

C hängt nur von c_1, c_2, $||B||$ und κ ab.

Fehlerschranken

Globaler Fehler, Theorem 3, Beweisskizze

- Teleskopsumme liefert

$$||u_n - u(n\tau)|| \leq \sum_{j=0}^{n-1} ||(e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} - e^{\tau(A+B)}) u(j\tau)||$$

Fehlerschranken

Globaler Fehler, Theorem 3, Beweisskizze

- Teleskopsumme liefert

$$||u_n - u(n\tau)|| \leq \sum_{j=0}^{n-1} ||(e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} - e^{\tau(A+B)})u(j\tau)||$$

- Summanden separat abschätzen
  - Falls $j \geq 1$, Theorem 2 verwenden
  - Falls $j = 0$, zweite Peano-Form wie im Beweis von Theorem 2 verwenden

Anwendung auf die Schrödingergleichung

Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = -\triangle_x u(x,t) + V(x)u(x,t) \underset{\star}{\longrightarrow} i\hat{u}'(t) = -D^2\hat{u}(t) + W\hat{u}(t)$$

Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \triangle_x u(x,t) - V(x)u(x,t) \underset{\star}{\longrightarrow} \hat{u}'(t) = D^2\hat{u}(t) - W\hat{u}(t)$$

$\star$ Pseudo-Spektralmethode

$$D = \mathrm{diag}\big((ik)_{k=-N,\dots,N-1}\big), \quad W = F_{2N}\mathrm{diag}\big(V(x_l)_{l=-N,\dots,N-1}\big)F_{2N}^{-1}$$

Anwendung auf die Schrödingergleichung

Kommutatorschranken

Sei $V \in C^5((-\pi,\pi),\mathbb{R})$. Dann gilt

$$\left|\left|[-D^2 + I, W]v\right|\right| \leq c_1 \left|\left|(-D^2+I)^{\frac{1}{2}} v\right|\right|, \tag{2}$$

$$\left|\left|[-D^2 + I, [-D^2 + I, W]]v\right|\right| \leq c_2 \left|\left|(-D^2+I) v\right|\right| \tag{3}$$

mit Konstanten c_1 und c_2, die unabhängig von N und $v \in \mathbb{R}^{2N}$ sind.

Anwendung auf die Schrödingergleichung

Aus Theorem 1 und Theorem 2 folgt:

Sei $V \in C^5((-\pi, \pi), \mathbb{R})$.

Dann ist der Fehler des Strang-Splitting-Verfahrens in der Pseudo-Spektraldiskretisierung der Schrödingergleichung durch

$$||u^n - u(\cdot, n\tau)||_{\mathcal{L}^2} \leq C\tau ||u^0||_{H^1} ,$$

$$||u^n - u(\cdot, n\tau)||_{\mathcal{L}^2} \leq C\tau^2 ||u^0||_{H^2}$$

beschränkt. Die Konstanten C sind unabhängig von N, n, τ und u^0.

Anwendung auf die Schrödingergleichung

Aus Theorem 3 folgt:

Sei $V \in C^5((-\pi, \pi), \mathbb{R})$ nichtnegativ.

Dann ist der Fehler des Strang-Splitting-Verfahrens in der Pseudo-Spektraldiskretisierung der Wärmeleitungsgleichung durch

$$||u^n - u(\cdot, n\tau)||_{\mathcal{L}^2} \leq C\tau^2 \log(n)||u^0||_{\mathcal{L}^2}$$

beschränkt. Die Konstanten C sind unabhängig von N, n, τ und u^0.

Fazit

Implementierung in Python

- scharfe Fehlerschranken

Fazit

Implementierung in Python

- scharfe Fehlerschranken

Unbeschränkte Operatoren

- Spezialfall: Matrizen

Fazit

Implementierung in Python

- scharfe Fehlerschranken

Unbeschränkte Operatoren

- Spezialfall: Matrizen

Fehlerschranken ✓

- Schwerpunkt der Bachelorarbeit: Beweise

Vielen Dank!