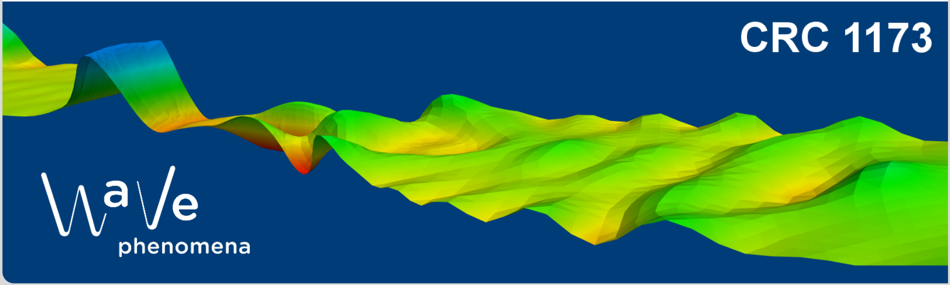
Runge–Kutta basierte lokale Zeitschrittverfahren

Kompaktseminar Hirschegg 2019

Institut für Angewandte und Numerische Mathematik, Karlsruher Institut für Technologie



Literatur

Marcus J. Grote, Michaela Mehlin, and Teodora Mitkova.
Runge-Kutta-based explicit local time-stepping methods for wave propagation.
SIAM J. Sci. Comput., 37(2):A747–A775, 2015.

Mamadou N'Diaye.
On the study and development of high-order time integration schemes for odes applied to acoustic and electromagnetic wave propagation problems.
Phd thesis, Université de Pau et des pays de l'Adour, December 2017.

Problem

CFL-Bedingung bei expliziten Verfahren zur Zeitintegration von hyperbolischen PDGLs

$$\tau \lesssim h_{\text{min}}$$

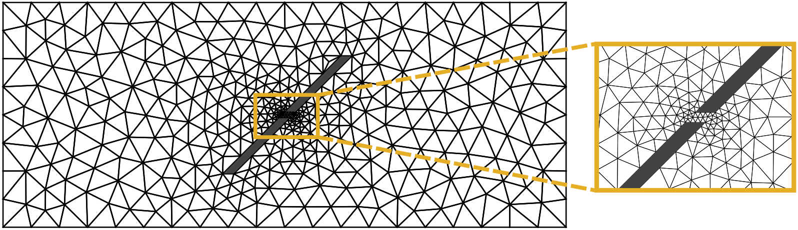


Bild von Andreas Sturm

- **Ziel:** effiziente Verfahren mit stabilen Lösungen für größere Schrittweiten

Lokale Zeitschrittverfahren (LTS)

Idee

- grobe Gitterelemente: explizites Verfahren mit Schrittweite τ
- feine Gitterelemente:
  - bedingungslos stabiles implizites Verfahren mit gleicher Schrittweite τ
    ➡ lokal implizite Verfahren
  - (dasselbe) explizite Verfahren mit kleinerer Schrittweite τ/p ($p \in \mathbb{N}$)
    ➡ explizite lokale Zeitschrittverfahren

Lokale Zeitschrittverfahren (LTS)

Idee

- grobe Gitterelemente: explizites Verfahren mit Schrittweite τ
- feine Gitterelemente:
  - bedingungslos stabiles implizites Verfahren mit gleicher Schrittweite τ
    ➡ lokal implizite Verfahren
  - (dasselbe) explizite Verfahren mit kleinerer Schrittweite τ/p ($p \in \mathbb{N}$)
    ➡ explizite lokale Zeitschrittverfahren

Literatur

- Chabassier, Imperiale 2016 ➡ Jonas Vortrag
- Piperno 2006, Verwer 2011,...
  - Discontinuous Galerkin FEM in Ort, Crank–Nicolson-Verfahren kombiniert mit Leapfrog-Verfahren in Zeit
  - volldiskrete Stabilitäts- und Fehleranalyse (+ genaue Konstruktion) von Hochbruck, Sturm 2016, 2019
- Grote et al. 2009, 2013, 2015,..., N'Diaye 2017 ➡ dieser Vortrag
- ...

Gliederung

Karlsruher Institut für Technologie

Wiederholung I: Runge–Kutta-Verfahren

Lokale Zeitschrittverfahren nach Grote et al.

Wiederholung II: Exponentielle Runge–Kutta-Verfahren

Lokale Zeitschrittverfahren mittels exponentiellen Runge–Kutta-Verfahren

Offene Fragen / Probleme

Gliederung

Wiederholung I: Runge–Kutta-Verfahren

Lokale Zeitschrittverfahren nach Grote et al.

Wiederholung II: Exponentielle Runge–Kutta-Verfahren

Lokale Zeitschrittverfahren mittels exponentiellen Runge–Kutta-Verfahren

Offene Fragen / Probleme

Runge–Kutta-Verfahren (RKV)

Karlsruher Institut für Technologie

$$u'(t) = g(t, u(t)), \qquad u(0) = u_0$$

Allgemeines s-stufiges RKV

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i U'_{ni} & \\ U'_{ni} &= g(t_n + c_i \tau, U_{ni}), & i = 1, \dots, s \\ U_{ni} &= u_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} U'_{nj}, & i = 1, \dots, s \end{aligned}$$

- explizite RKV: $a_{ij} = 0$ für $i \leq j$

$$u(t_{n+1}) = u(t_n) + \tau \int_0^1 g(t_n + \tau r, u(t_n + \tau r)) \,\mathrm{d}r$$

RKV für lineare Probleme

$$u'(t) = Au(t) + g(t), \quad u(0) = u_0, \qquad A \text{ linearer Operator}$$

Anwenden von RKV

$$u_{n+1} = R(\tau A)u_n + \tau \sum_{i=1}^{s} Q_i(\tau A) g(t_n + c_i \tau)$$

mit

$$R(z) = 1 + zb^T (I - z\mathcal{A})^{-1}\mathbb{1} \qquad \text{(Stabilitätsfunktion)}$$

$$Q_i(z) = b^T (I - z\mathcal{A})^{-1} e_i, \qquad i = 1\ldots, s$$

- explizite RKV: R, Q_i Polynome
- implizite RKV: R, Q_i rationale Funktionen

$$\mathcal{A} = (a_{ij})_{i,j=1}^{s}, \qquad b = \begin{bmatrix} b_1 & \ldots & b_s \end{bmatrix}^T, \qquad \mathbb{1} = \begin{bmatrix} 1 & \ldots & 1 \end{bmatrix}^T$$

Gliederung

Wiederholung I: Runge–Kutta-Verfahren

Lokale Zeitschrittverfahren nach Grote et al.

Wiederholung II: Exponentielle Runge–Kutta-Verfahren

Lokale Zeitschrittverfahren mittels exponentiellen Runge–Kutta-Verfahren

Offene Fragen / Probleme

Allgemeine Vorgehensweise I

Karlsruher Institut für Technologie

In Raum diskretisierte lineare *homogene* (hyperbolische) PDGL

$$\mathbf{u}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{u}(t), \qquad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$$

Grote et al. (2009,) 2013, 2015,..., N'Diaye 2017

1. Zerlege $\mathbf{u} = \mathbf{P}_c\mathbf{u} + \mathbf{P}_f\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(c)} + \mathbf{u}^{(f)}$, wobei $\mathbf{P}_c + \mathbf{P}_f = \mathbf{I}$
2. Ansatz $(0 \leq \sigma \leq \tau)$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t_n + \sigma) &= \mathbf{u}(t_n) + \sigma \int_0^1 \mathbf{A}\mathbf{u}(t_n + \sigma r)\,\mathrm{d}r \\ &= \mathbf{u}(t_n) + \sigma \int_0^1 \mathbf{A}\mathbf{P}_c\mathbf{u}(t_n + \sigma r)\,\mathrm{d}r + \sigma \int_0^1 \mathbf{A}\mathbf{P}_f\mathbf{u}(t_n + \sigma r)\,\mathrm{d}r \end{aligned}$$

3. Wende (modifiziertes) explizites Verfahren auf groben Teil an

Allgemeine Vorgehensweise II

4. Definiere $\widetilde{\mathbf{u}}(\sigma) \approx u(t_n + \sigma)$ durch

$$\widetilde{\mathbf{u}}(\sigma) = G_c(\sigma) + \sigma \int_0^1 \mathbf{A}\mathbf{P}_f \widetilde{\mathbf{u}}(\sigma r)\,\mathrm{d}r, \qquad \widetilde{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{u}(t_n),$$

   wobei G_c unabhängig von $\widetilde{\mathbf{u}}$ („Inhomogenität")

5. Differenziere nach σ

$$\widetilde{\mathbf{u}}'(\sigma) = \mathbf{A}\mathbf{P}_f \widetilde{\mathbf{u}}(\sigma) + g_c(\sigma), \qquad \widetilde{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{u}(t_n),$$

6. Löse Differentialgleichung durch
   - p-mal explizites Verfahren mit Schrittweite τ/p ($p \in \mathbb{N}$)
     - ➡ explizite lokale Zeitschrittverfahren
   - implizites Verfahren mit Schrittweite τ
     - ➡ lokal implizite Verfahren

7. Setze $\mathbf{u}_{n+1} = \widetilde{\mathbf{u}}_1 \approx \widetilde{\mathbf{u}}(\tau)$, wobei $\mathbf{u}_{n+1} \approx \mathbf{u}(t_{n+1})$

Lokale Zeitschrittverfahren mit RKV

Differentialgleichung in Schritt ❹

$$\widetilde{\mathbf{u}}'(\sigma) = \mathbf{A}\mathbf{P}_f \widetilde{\mathbf{u}}(\sigma) + g_c(\sigma), \qquad \widetilde{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{u}(t_n)$$

mit

$$g_c(\sigma) = \mathbf{A}\mathbf{P}_c \sum_{i=1}^{s} \alpha_i i (\sigma \mathbf{A})^{i-1} \mathbf{u}(t_n)$$

Lokale Zeitschrittverfahren mit RKV

Differentialgleichung in Schritt ❹

$$\widetilde{\mathbf{u}}'(\sigma) = \mathbf{AP}_f \widetilde{\mathbf{u}}(\sigma) + g_c(\sigma), \qquad \widetilde{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{u}(t_n)$$

mit

$$g_c(\sigma) = \mathbf{AP}_c \sum_{i=1}^{s} \alpha_i i (\sigma \mathbf{A})^{i-1} \mathbf{u}(t_n)$$

- Explizites RKV p-mal mit Schrittweite $\frac{\tau}{p}$ $(p \in \mathbb{N})$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \bar{\mathbf{u}}_1, \qquad \text{wobei} \quad \bar{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{u}_n,$$

$$\bar{\mathbf{u}}_{(m+1)/p} = R\big(\tfrac{\tau}{p}\mathbf{AP}_f\big)\bar{\mathbf{u}}_{m/p} + \frac{\tau}{p}\sum_{i=1}^{s} Q_i\big(\tfrac{\tau}{p}\mathbf{AP}_f\big) g_c(c_i\tau), \quad m = 0, \dots, p-1$$

(Grote, Mehlin, Mitkova 2015)

Lokale Zeitschrittverfahren mit RKV

Differentialgleichung in Schritt 4

$$\widetilde{\mathbf{u}}'(\sigma) = \mathbf{AP}_f \widetilde{\mathbf{u}}(\sigma) + g_c(\sigma), \qquad \widetilde{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{u}(t_n)$$

mit

$$g_c(\sigma) = \mathbf{AP}_c \sum_{i=1}^{s} \alpha_i i (\sigma \mathbf{A})^{i-1} \mathbf{u}(t_n)$$

- Implizites RKV mit Schrittweite τ

$$\mathbf{u}_{n+1} = R(\tau \mathbf{AP}_f)\mathbf{u}_n + \tau \sum_{i=1}^{s} Q_i(\tau \mathbf{AP}_f) g_c(c_i \tau)$$

(N'Diaye 2017)

Gliederung

Wiederholung I: Runge–Kutta-Verfahren

Lokale Zeitschrittverfahren nach Grote et al.

Wiederholung II: Exponentielle Runge–Kutta-Verfahren

Lokale Zeitschrittverfahren mittels exponentiellen Runge–Kutta-Verfahren

Offene Fragen / Probleme

Exponentielle Runge–Kutta-Verfahren

Karlsruher Institut für Technologie

$$u'(t) = Au(t) + g(t, u(t)), \quad u(0) = u_0, \qquad A \text{ linearer Operator}$$

Motivation: Variation-der-Konstanten-Formel

$$u(t_{n+1}) = \mathrm{e}^{\tau A} u(t_n) + \tau \int_0^1 \mathrm{e}^{\tau(1-r)A} g(t_n + \tau r, u(t_n + \tau r))\,\mathrm{d}r$$

Verfahren

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= \mathrm{e}^{\tau A} u_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i(\tau A) G_{ni} \\ G_{ni} &= g\big(t_n + c_i \tau, U_{ni}\big) \\ U_{ni} &= \mathrm{e}^{c_i \tau A} u_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij}(\tau A) G_{nj} \end{aligned}$$

- $A = 0$: normales RKV

Exponentielle RKV für lineare Probleme

$$u'(t) = Au(t) + g(t), \quad u(0) = u_0$$

Exponentielle RKV ➡ exponentielle Quadraturformel

$$u_{n+1} = \mathrm{e}^{\tau A} u_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i(\tau A) g(t_n + c_i \tau)$$

- rationale/polynomielle Approximation von $\mathrm{e}^{\tau A}$, $b_i(\tau A)$
  ➡ normales implizites/explizites RKV

RKV: $\quad u_{n+1} = R(\tau A) u_n + \tau \sum_{i=1}^{s} Q_i(\tau A) g(t_n + c_i \tau)$

Gliederung

Lokale Zeitschrittverfahren mittels exp. RKV I

In Raum diskretisierte lineare *homogene* (hyperbolische) PDGL

$$\mathbf{u}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{u}(t), \qquad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$$

1. Teile diskreten Operator $\mathbf{A}$ auf

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{ff} & \mathbf{A}_{fc} \\ \mathbf{A}_{cf} & \mathbf{A}_{cc} \end{pmatrix} = \mathbf{A}\mathbf{P}_f + \mathbf{A}\mathbf{P}_c = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{ff} & 0 \\ \mathbf{A}_{cf} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{A}_{fc} \\ 0 & \mathbf{A}_{cc} \end{pmatrix}$$

2. Wende exponentielles RKV an mit $g(\mathbf{u}(t)) = \mathbf{A}\mathbf{P}_c\mathbf{u}(t)$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathrm{e}^{\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f}\mathbf{u}_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i(\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f)(\mathbf{A}\mathbf{P}_c\mathbf{U}_{ni})$$

$$\mathbf{U}_{ni} = \mathrm{e}^{c_i \tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f}\mathbf{u}_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij}(\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f)(\mathbf{A}\mathbf{P}_c\mathbf{U}_{nj}), \quad i = 1, \dots, s$$

Lokale Zeitschrittverfahren mittels exp. RKV II

3. Ersetze Gleichung für innere Stufen durch $\mathbf{U}_{ni} = \mathrm{e}^{c_i \tau \mathbf{A}} \mathbf{u}_n$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathrm{e}^{\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f} \mathbf{u}_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i(\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f)\left(\mathbf{A}\mathbf{P}_c \mathrm{e}^{c_i \tau \mathbf{A}} \mathbf{u}_n\right)$$

Lokale Zeitschrittverfahren mittels exp. RKV II

❸ Ersetze Gleichung für innere Stufen durch $\mathbf{U}_{ni} = \mathrm{e}^{c_i \tau \mathbf{A}} \mathbf{u}_n$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathrm{e}^{\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f} \mathbf{u}_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i(\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f) \left(\mathbf{A}\mathbf{P}_c \mathrm{e}^{c_i \tau \mathbf{A}} \mathbf{u}_n\right)$$

❹ Approximiere $\mathrm{e}^{c_i \tau \mathbf{A}}$ durch „geeignete“ Polynome

❺ Approximiere $\mathrm{e}^{\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f}$ und $b_i(\tau \mathbf{A}\mathbf{P}_f)$ durch

- „geeignete“ rationale Funktionen
  - ➡ lokal implizite Verfahren nach N'Diaye
- „geeignete“ Polynome und p-maliges Anwenden des Verfahrens mit Schrittweite τ/p ($p \in \mathbb{N}$)
  - ➡ explizite lokale Zeitschrittverfahren nach Grote, Mehlin, Mitkova

Gliederung

Offene Fragen / Probleme I

- Effizienz der Verfahren von Grote, Mehlin, Mitkova 2015 und N'Diaye 2017?

  Beispiel: stetige FEM 1D für Laplace-Operator

  $$A = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ * & * & * & 0 & & 0 \\ 0 & * & * & * & & 0 \\ 0 & 0 & * & * & & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & * \end{pmatrix}$$

  RKV mit s Stufen ➡ $(s-1)$ benachbarte grobe Freiheitsgrade zu feinen Teil

- Warum $\mathbf{P}_c$ nur einmal, $\mathbf{P}_f$ s-mal?

Offene Fragen / Probleme II

- Wahl der Raumdiskretisierung:
  - stetige Finite Elemente Methode (FEM)
  - Discontinuous Galerkin FEM

- Wahl von $\mathbf{P}_c, \mathbf{P}_f$?
  Unterteilung des Gitters/der Freiheitsgrade, sodass CFL-Bedingung nur vom groben Teil des Gitters

- volldiskrete Stabilitäts- und Fehleranalyse