



Technische Universiteit Delft
Faculteit Elektrotechniek, Wiskunde en Informatica
Delft Institute of Applied Mathematics

**Het toepassen van complexe methodes voor het
schatten van afgeleiden (Engelse titel: Using
complex methods to estimate derivatives)**

Verslag ten behoeve van het
Delft Institute of Applied Mathematics
als onderdeel ter verkrijging

van de graad van

**BACHELOR OF SCIENCE
in
TECHNISCHE WISKUNDE**

door

JURJEN OUDE LUTTIKHUIS

**Delft, Nederland
December 2018**



BSc verslag TECHNISCHE WISKUNDE

“Het toepassen van complexe methodes voor het schatten van afgeleiden”
(Engelse titel: “Using complex methods to estimate derivatives ”)

JURJEN OUDE LUTTIKHUIS

Technische Universiteit Delft

Begeleider

Prof. Dr.ir. C. Vuik

Overige commissieleden

Prof. Dr. Ir. H.X. Lin

Drs. E.M. van Elderen

December, 2018

Delft

Inhoudsopgave

1	Inleiding	7
1.1	Complexe stap methode voor eerste afgeleide	7
1.1.1	Alternatief bewijs	8
1.1.2	Numeriek voorbeeld	8
1.1.3	Benodigde rekentijd	9
1.2	Hogere orde afgeleiden	9
2	Hogere orde afgeleiden met complexe stap methode	11
2.1	De tweede afgeleide	11
2.1.1	Tweede afgeleide met behulp van de eerste afgeleide	12
2.1.2	Tweede orde met complexe coëfficiënten	12
2.1.3	Hogere orde afgeleiden	13
3	Snelheid en accuratesse complexe methodes	15
3.1	Afleiding van Martins	15
3.2	Eerste afgeleide	15
3.3	Tweede afgeleide	16
3.3.1	Veranderende straal bij Stelling van Cauchy	18
3.3.2	Rekentijd	18
4	Toepassen op differentiaalvergelijkingen	21
4.1	Grenswaardeproblemen	21
4.1.1	Niet-lineaire differentiaalvergelijkingen	22
4.1.2	Resultaten	22
4.1.3	Andere functies	25
4.1.4	Uitgebreidere niet-lineaire differentiaalvergelijking	26
4.2	Beginwaardeproblemen	31
	Conclusie	35

Hoofdstuk 1

Inleiding

Om een beter overzicht te krijgen van de stand van de wetenschap over de complexe numerieke methoden om afgeleiden te berekenen zal eerst een inleiding worden uitgevoerd. De resultaten van deze inleiding staan in dit hoofdstuk beschreven.

Een standaard methode om numeriek de afgeleiden te berekenen is door middel van centrale differentie, die staat beschreven in vergelijking 1.1

$$f'(x_0) \sim \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \quad (1.1)$$

Dit is een snelle en simpele methode om de afgeleide te bepalen. Deze methode heeft als belangrijk nadeel dat als h klein wordt, de twee functieëvaluaties binnen de precisie van de computer hetzelfde kunnen worden. De berekende afgeleide wordt dan 0. Een methode die hiervan geen last heeft kan een verbetering zijn doordat een hogere precisie mogelijk wordt.

1.1 Complexe stap methode voor eerste afgeleide

De complexe stap methode voor de eerste afgeleide wordt besproken door Squire en Trapp [3]. Ze werken vanuit de centrale differentiemethode, die staat beschreven in vergelijking 1.1.

Vergelijking 1.1 is te herschrijven door de stapgrootte aan te passen naar ih , met i de imaginaire eenheid. Dat geeft:

$$f'(x_0) \sim \frac{f(x_0 + ih) - f(x_0 - ih)}{2ih} \quad (1.2)$$

Als $f(x)$ analytisch is, dan geldt dat $f(\bar{z}) = \overline{f(z)}$. Dat geeft ons dan:

$$f'(x_0) \sim \frac{f(x_0 + ih) - \overline{f(x_0 + ih)}}{2ih} \quad (1.3)$$

De reële delen vallen tegen elkaar weg, doordat $f(x_0 + ih)$ en zijn complex geconjugeerde van elkaar worden afgetrokken. De imaginaire delen worden dan bij elkaar opgeteld. Dan kom je tot de complexe stap methode:

$$f'(x_0) \sim \operatorname{Im}\left(\frac{f(x_0 + ih)}{h}\right). \quad (1.4)$$

Om de orde te bepalen maken ze gebruik van de stelling van Taylor. Dit is mogelijk voor een complexe functie $f(z)$ waarbij op de reële as de functie ook reële waarden geeft. De Taylor-expansie rond het reële punt x_0 geeft:

$$f'(x_0 + ih) = f(x_0) + ihf'(x_0) - \frac{h^2}{2!}f''(x_0) - \frac{ih^3}{3!}f^{(3)}(x_0) + \dots \quad (1.5)$$

Het is mogelijk om het imaginaire deel van uitdrukking 1.5 te nemen en dan door h te delen. Het resultaat is:

$$\text{Im}(f'(x_0 + ih))/h = f'(x_0) - h^2 f^{(3)}(x_0)/3! + \dots \quad (1.6)$$

Het linkerlid vormt nu een schatting voor $f'(x_0)$ met als orde $O(h^2)$.

1.1.1 Alternatief bewijs

Een andere mogelijkheid om tot deze complexe stap methode te komen is door gebruik te maken van de Cauchy-Riemann vergelijkingen, zoals beschreven door Martins [2]. De te gebruiken Cauchy-Riemann vergelijking voor een functie $f(z) = u + iv$, met $z = x + iy$, $u = \text{Re}(f(z))$ en $v = \text{Im}(f(z))$, is:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (1.7)$$

Als dan de definitie van de afgeleide wordt ingevuld voor $\frac{\partial v}{\partial y}$ in het rechterlid, dan krijgen we vergelijking 1.8.

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{v(x + i(y + h)) - v(x + iy)}{h} \quad (1.8)$$

Door ons te beperken tot de reële as, weten we verschillende variabelen van deze functie. Te weten $y = 0$, want we vullen alleen reële getallen in.

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{v(x + ih) - v(x)}{h} \quad (1.9)$$

Ook geldt $v(x) = 0$ aangezien de functie $f(x)$ reële waarden geeft op de reële as en $v(z) = \text{Im}(f(z))$, dat geeft:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\text{Im}(f(x + ih))}{h} \quad (1.10)$$

Aangezien van een reële functie de afgeleide in de reële richting wordt genomen, geldt $\frac{\partial u}{\partial x} = f'(x)$. Dan volgt direct dat geldt:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\text{Im}(f(x + ih))}{h} \quad (1.11)$$

Door hierin voor h een klein getal te kiezen in plaats van het limiet van h naar 0 krijgen we de complexe stad methode.

1.1.2 Numeriek voorbeeld

Squire en Trapp [3] gaven ook een voorbeeld waarbij duidelijk wordt wat het voordeel van een complexe stap methode is. Ze hebben de functie $f(x) = x^{9/2}$ genomen en de afgeleide gevalueerd in het punt $x_0 = 1.5$. Dit hoort de waarde te geven van 18.600812734259759. Deze waarde is in Fortran benaderd met vergelijkingen 1.1 en 1.4, met een steeds kleinere stapgrootte. De gemaakte fout hierbij staan in tabel 1.1. In deze tabel is duidelijk te zien dat de precisie van de centrale differentie bij een te klein wordende h weer afneemt door de afrondfout, waar de precisie van de complexe stap methode niet afneemt. Bij centrale differentie wordt voor een te kleine h de waarde voor de afgeleide zelf 0, doordat de punten links en rechts eenzelfde waarde hebben binnen de precisie van de computer.

Tabel 1.1: Fout bij numeriek berekenen van de afgeleide van $x^{9/2}$ in $x = 1.5$

h	Centrale differentie	Complexe stap
10^{-2}	0.12×10^{-2}	0.12×10^{-2}
10^{-3}	0.1205×10^{-4}	0.12×10^{-4}
10^{-4}	0.12×10^{-6}	0.12×10^{-6}
10^{-5}	0.12×10^{-8}	0.12×10^{-8}
10^{-6}	0.11×10^{-10}	0.12×10^{-10}
10^{-7}	0.82×10^{-9}	0.12×10^{-12}
10^{-8}	0.11×10^{-7}	0.1×10^{-14}
10^{-9}	0.11×10^{-7}	0.2×10^{-15}
10^{-10}	0.15×10^{-5}	0
10^{-11}	0.26×10^{-5}	0
10^{-12}	0.86×10^{-4}	0
10^{-13}	0.42×10^{-3}	0
10^{-14}	0.16×10^{-1}	0
10^{-15}	0.46×10^{-2}	0
10^{-16}	1.94	0
10^{-17}	18.60	0
10^{-18}	18.60	0
10^{-19}	18.60	0
10^{-20}	18.60	0

1.1.3 Benodigde rekentijd

Martins [2] beschijft ook het verschil in rekentijd en gebruikt computergeheugen tussen de complexe stap methode en de centrale differentie. Als voorbeeld wordt een vliegtuigvleugel genomen, waarop de spanning wordt berekend op alle ondersteunende elementen. Hierbij wordt gebruik gemaakt van fesmeh ontwikkeld door Holden [1]. Fesmeh is een pakket om deze berekingen uit te voeren. De gevonden relatieve rekentijd en geheugengebruik van de twee methodes staat in tabel 1.2.

Tabel 1.2: Rekentijd en gebruikt computergeheugen voor centrale differentie en complexe stap methode

Methode	Rekentijd	Geheugengebruik
Centrale differentie	0,88	0,78
Complexe stap	1,00	1,00

1.2 Hogere orde afgeleiden

Hogere orde afgeleiden van analytische functies zijn ook af te schatten met een complexe stap methode, dit door middel van de stelling van Cauchy [2]. De stelling van Cauchy luidt als volgt:

$$f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^{n+1}} \partial \xi. \quad (1.12)$$

De integraal in deze vergelijking valt af te schatten met de trapeziumregel. Maak hiervoor een cirkel met straal r rond z en neem daarbij m punten op deze cirkel. Dan komen we tot

vergelijking 1.13

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{mr} \sum_{j=1}^m \frac{f(z + re^{i\frac{2\pi j}{m}})}{e^{i\frac{2\pi jn}{m}}} \quad (1.13)$$

Martins stelt ook om een afgeleide van graad n te schatten dat hiervoor minimaal $n + 1$ punten nodig zijn. Het grote voordeel ten opzichte van centrale differentie is dat hierbij geen twee functiewaarden van elkaar worden afgetrokken. Deze kunnen met een afnemende stapgrootte h , voor een grotere precisie, hetzelfde worden. Bij de complexe methoden worden daarentegen meer punten op de integraal gevalueerd om een hogere precisie te bereiken. We gaan deze afleiding in stappen uitwerken om beter te begrijpen hoe Martins aan deze afleiding komt. Als eerst hebben we de trapeziumregel nodig:

$$\int_{x_L}^{x_R} F(x) dx \sim \frac{x_R - x_L}{2} (F(x_L) + F(x_R)) \quad (1.14)$$

Als we dit willen toepassen op de stelling van Cauchy, krijgen we voor $F(x)$ de functie $\frac{f(x)}{(x-z)^{n+1}}$. We integreren over een cirkel in plaats van een lijn, dus hebben we een coördinatentransformatie nodig:

$$x = e^{i\phi} \quad (1.15)$$

$$dx = ie^{i\phi} d\phi \quad (1.16)$$

Dit kunnen we toepassen op de stelling van Cauchy, waarbij we de integraal in m intervallen verdelen, dan krijgen we de volgende afschatting voor de afgeleide:

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{2\pi i} \sum_{j=1}^m \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{2} \left(\frac{f(\phi_j)}{(\phi_j - z)^{n+1}} + \frac{f(\phi_{j+1})}{(\phi_{j+1} - z)^{n+1}} \right) * ie^{i\phi} \quad (1.17)$$

We kunnen nu de ϕ_j gaan uitwerken, we nemen $\phi_j = e^{\frac{2\pi ij}{m}}$ dan krijgen we:

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{2\pi} \sum_{j=1}^m \frac{2\pi}{2m} \left(\frac{f(z + e^{\frac{2\pi ij}{m}})}{e^{\frac{2\pi ijn}{m}}} + \frac{f(z + e^{\frac{2\pi i(j+1)}{m}})}{e^{\frac{2\pi i(j+1)n}{m}}} \right) \quad (1.18)$$

Als we nu de straal van de cirkel willen kunnen aanpassen, hoeven we de uitkomst van deze som niet te corrigeren, de stelling van Cauchy geldt namelijk voor elke straal. We kunnen $e^{\frac{2\pi ij}{m}}$ vervangen door $re^{\frac{2\pi ij}{m}}$. De afstand tussen twee punten neemt wel toe, dus elke term van de som moet worden vermenigvuldigd met r . Dan krijgen we:

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{2\pi} \sum_{j=1}^m \frac{2\pi r}{2m} \left(\frac{f(z + re^{\frac{2\pi ij}{m}})}{r^{n+1} e^{\frac{2\pi ijn}{m}}} + \frac{f(z + re^{\frac{2\pi i(j+1)}{m}})}{r^{n+1} e^{\frac{2\pi i(j+1)n}{m}}} \right) \quad (1.19)$$

We zien dat elk punt op de cirkel precies 2 maal wordt berekend, dit kunnen we dus korter opschrijven tot:

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{mr^n} \sum_{j=1}^m \frac{f(z + re^{\frac{2\pi ij}{m}})}{e^{\frac{2\pi ijn}{m}}} \quad (1.20)$$

Er is een verschil tussen vergelijking 1.13 en 1.20. Martins deelt door r , waar deze afleiding leidt tot delen door r^n . Een praktijkvoorbeeld in hoofdstuk 3.1 zal aantonen welke van deze twee afleidingen correct is.

Nu we een overzicht hebben, zullen we op zoek gaan naar hogere orden afgeleiden met de complexe stap methode.

Hoofdstuk 2

Hogere orde afgeleiden met complexe stap methode

In de inleiding is de complexe stap methode beschreven voor de eerste afgeleiden, evenals een afchatting van een kringintegraal voor hogere orde afgeleiden. In dit hoofdstuk zal worden onderzocht of ook hogere orde afgeleiden zijn af te schatten met een complexe stap methode, zonder kringintegralen, hierbij beginnen we met de tweede afgeleide. Deze methodes zullen in het volgende hoofdstuk worden getest.

2.1 De tweede afgeleide

De tweede afgeleide kan ook reëel worden geschat met centrale differentie. Hiervoor wordt met centrale differentie $f'(x \pm \frac{h}{2})$ berekent, waarna met deze waardes $f''(x)$ wordt bepaald. Als dat in één vergelijking wordt gezet geeft dat:

$$f''(x) \sim \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}. \quad (2.1)$$

Ook hierbij bestaat het risico dat er 0 uitkomt doordat binnen de precisie van de computer deze waardes hetzelfde worden gezien. Ook nu kunnen we een complexe stapgrootte ih toepassen:

$$f''(x) \sim \frac{f(x+ih) - 2f(x) + f(x-ih)}{(ih)^2}. \quad (2.2)$$

Het uitwerken van $(ih)^2$ geeft $-h^2$. Er geldt als we ons beperken tot analytische functies dat $f(\bar{z}) = \overline{f(z)}$, dus dat geeft:

$$f''(x) \sim -\frac{f(x+ih) - 2f(x) + \overline{f(x+ih)}}{h^2}. \quad (2.3)$$

In dit geval worden de complex geconjugeerden getallen bij elkaar opgeteld, dan zijn het de reële delen die bij elkaar worden opgeteld en de imaginaire delen die wegvallen.

$$f''(x) \sim -\frac{Re(f(x+ih)) - 2f(x) + Re(\overline{f(x+ih)})}{h^2}. \quad (2.4)$$

Aangezien de reële delen van complex geconjugeerde getallen hetzelfde zijn, valt vergelijking 2.4 korter op te schrijven tot:

$$f''(x) \sim -\frac{2Re(f(x+ih)) - 2f(x)}{h^2}. \quad (2.5)$$

We zien hier dat er twee getallen van elkaar worden afgetrokken, die bij een kleinere h dichter bij elkaar komen te liggen, waarmee het risico dat ze tegen elkaar wegvallen nog niet geweken is.

2.1.1 Tweede afgeleide met behulp van de eerste afgeleide

Het resultaat van Squire en Trapp voor de eerste afgeleide kan natuurlijk ook gebruikt worden om de tweede orde afgeleide te bepalen. Vooreen punt x passen we centrale differentie toe, waarin $f(x + h_2)$ en $f(x - h_2)$ al de waarde van de eerste afgeleide zijn die bepaald is met de complexe stap methode met stapgrootte h_1 , dan krijgen we:

$$f''(x) \sim \frac{\frac{\operatorname{Im}(f(x+h_2+ih_1))}{h_1} - \frac{\operatorname{Im}(f(x-h_2+ih_1))}{h_1}}{2h_2} \quad (2.6)$$

Dit kan iets netter worden uitgewerkt tot:

$$f''(x) \sim \frac{\operatorname{Im}(f(x + h_2 + ih_1)) - \operatorname{Im}(f(x - h_2 + ih_1))}{2h_1h_2} \quad (2.7)$$

In vergelijking 2.7 is het niet mogelijk om voor h_2 ook een complexe stap te nemen zoals Squire en Trapp hebben gedaan voor de eerste orde. We krijgen dan namelijk twee schattingen van de eerste afgeleide voor het punt x , waarbij het enige verschil de precisie is. Daaruit valt niet de tweede afgeleide te halen.

2.1.2 Tweede orde met complexe coëfficiënten

De formule voor de tweede afgeleide is in een algemene vorm, waarbij de coëfficiënten nog niet bepaald zijn is gelijk aan:

$$f''(x) \sim \frac{a}{h^2}f(x-h) + \frac{b}{h^2}f(x) + \frac{c}{h^2}f(x+h) \quad (2.8)$$

Als we hiervoor een complexe h kiezen krijgen we:

$$f''(x) \sim -\frac{a}{h^2}f(x-ih) - \frac{b}{h^2}f(x) - \frac{c}{h^2}f(x+ih) \quad (2.9)$$

We kunnen de Taylorexpanisie van $f(x-ih)$ en $f(x+ih)$ bepalen:

$$f(x-ih) \sim f(x) - ihf'(x) - \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{ih^3}{3!}f^{(3)}(x) + O(h^4) \quad (2.10)$$

$$f(x+ih) \sim f(x) + ihf'(x) - \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{ih^3}{3!}f^{(3)}(x) + O(h^4) \quad (2.11)$$

Dit kunnen we invullen in 2.9, voor $f(x)$, $f'(x)$ en $f''(x)$ krijgen onderstaande termen, waarbij die voor de eerste twee moeten wegvallen en voor de tweede afgeleide tot 1 moeten optellen:

$$f(x) : -\frac{a}{h^2} - \frac{b}{h^2} - \frac{c}{h^2} = 0 \quad (2.12)$$

$$f'(x) : \frac{ai}{h} + 0 - \frac{ci}{h} = 0 \quad (2.13)$$

$$f''(x) : \frac{a}{2} + 0 + \frac{c}{2} = 1 \quad (2.14)$$

Als dit stelsel wordt uitgewerkt, krijgen we $a = 1$, $b = -2$ en $c = 1$. De standaard centrale differentie voor de tweede afgeleide, we zien wel dat hierbij de $\frac{ih^3}{3!}f^{(3)}(x)$ wegvalt, dus dat bij een complexe stap nog steeds een orde van h^2 hebben.

We kunnen hierbij voor a, b en c complexe getallen toestaan, het stelsel levert dan geen nieuwe oplossingen op. De complexe delen van de coëfficiënten worden 0.

2.1.3 Hogere orde afgeleiden

Martins gebruikte de midpuntregel voor het afschatten van integraal van de stelling van Cauchy, er zijn echter ook preciezere methodes om integralen af te schatten, we zullen hier gebruik maken van de Simpsonregel. Deze methode luidt als volgt:

$$\int_{x_L}^{x_R} F(x)dx \sim \frac{x_R - x_L}{6} (F(x_L) + 4F(x_M) + F(x_R)) \quad (2.15)$$

Hierbij geldt dat $x_M = \frac{x_R + x_L}{2}$. Als we dit willen toepassen op de stelling van Cauchy, krijgen we voor $F(x)$ de functie $\frac{f(x)}{(x-z)^{n+1}}$. We integreren over een cirkel in plaats van een lijn, dus hebben we een coördinatentransformatie nodig:

$$x = e^{i\phi} \quad (2.16)$$

$$dx = ie^{i\phi} d\phi \quad (2.17)$$

Dit kunnen we toepassen op de stelling van Cauchy, waarbij we de integraal in m intervallen verdelen, dan krijgen we de volgende afschatting voor de afgeleide:

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{2\pi i} \sum_{j=1}^m \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{6} \left(\frac{f(\phi_j)}{(\phi_j - z)^{n+1}} + 4 \frac{f(\phi_{j+0.5})}{(\phi_{j+0.5} - z)^{n+1}} + \frac{f(\phi_{j+1})}{(\phi_{j+1} - z)^{n+1}} \right) * ie^{i\phi} \quad (2.18)$$

We kunnen nu de ϕ_j gaan uitwerken, we nemen $\phi_j = e^{\frac{2\pi i j}{m}} + z$ dan krijgen we:

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{2\pi} \sum_{j=1}^m \frac{2\pi}{6m} \left(\frac{f(z + e^{\frac{2\pi i j}{m}})}{e^{\frac{2\pi i j n}{m}}} + 4 \frac{f(z + e^{\frac{2\pi i(j+0.5)}{m}})}{e^{\frac{2\pi i(j+0.5)n}{m}}} + \frac{f(z + e^{\frac{2\pi i(j+1)}{m}})}{e^{\frac{2\pi i(j+1)n}{m}}} \right) \quad (2.19)$$

Als we nu de straal van de cirkel willen kunnen aanpassen, hoeven we de uitkomst van deze som niet te corrigeren, de stelling van Cauchy geldt namelijk voor elke straal. We kunnen $\phi_j = e^{\frac{2\pi i j}{m}} + z$ vervangen door $\phi_j = r e^{\frac{2\pi i j}{m}} + z$. De afstand tussen twee punten neemt wel toe, dus elke term van de som moet worden vermenigvuldigt met r . Dan krijgen we:

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{2\pi} \sum_{j=1}^m \frac{2\pi r}{6m} \left(\frac{f(z + r e^{\frac{2\pi i j}{m}})}{r^{n+1} e^{\frac{2\pi i j n}{m}}} + 4 \frac{f(z + r e^{\frac{2\pi i(j+0.5)}{m}})}{r^{n+1} e^{\frac{2\pi i(j+0.5)n}{m}}} + \frac{f(z + r e^{\frac{2\pi i(j+1)}{m}})}{r^{n+1} e^{\frac{2\pi i(j+1)n}{m}}} \right) \quad (2.20)$$

We zien dat $\frac{f(z + r e^{\frac{2\pi i j}{m}})}{e^{\frac{2\pi i j n}{m}}}$ twee maal wordt berekend, éénmaal met j en éénmaal met $j + 1$, waarbij j één lager is. Dit kunnen we dus efficiënter opschrijven als:

$$f^{(n)}(z) \sim \frac{n!}{6mr^n} \sum_{j=1}^m 2 \frac{f(z + r e^{\frac{2\pi i j}{m}})}{e^{\frac{2\pi i j n}{m}}} + 4 \frac{f(z + r e^{\frac{2\pi i(j+0.5)}{m}})}{e^{\frac{2\pi i(j+0.5)n}{m}}} \quad (2.21)$$

Nu we verschillende methodes hebben geconstrueerd, zowel voor de tweede als hogere afgeleiden, zullen deze methodes moeten worden getest. De manieren om deze methodes te testen en de resultaten hiervan staan in het volgende hoofdstuk.

Hoofdstuk 3

Snelheid en accuratesse complexe methodes

In dit hoofdstuk zullen de verschillende methodes worden getest op accuratesse en snelheid. We beginnen met de afleiding van Martins[2]. Vervolgens testen we de verschillende methodes voor de eerste afgeleide en daarna voor de tweede afgeleide.

3.1 Afleiding van Martins

Eerst zullen we testen of de gegeven afleiding in paragraaf 1.2 correct is. Dit doen we met een schatting voor de tweede afgeleide en $r \neq 1$, omdat er geen verschil optreed bij de eerste afgeleide of voor $r = 1$. We nemen als functie:

$$f(x) = x^{\frac{9}{2}} \quad (3.1)$$

We schatten de tweede afgeleide af in het punt $x = 1.5$, met 100 punten voor een accuraat resultaat en $r = 0.1$. Dit doen we met de afleiding van Martins en de gevonden vergelijking 1.20. De resultaten staan in Tabel 3.1. In deze tabel is te zien dat de afleiding van Martins er een factor 10 naast zit, waar de gegeven afleiding wel overeen komt met de analytische waarde. De afleiding van Martins lijkt niet correct te zijn.

Tabel 3.1: Tweede afgeleide voor $f(x) = x^{\frac{9}{2}}$

Methode	Afgeleide
Martins	4.34
Afleiding	43.4
Analytisch	43.4

3.2 Eerste afgeleide

Ondanks dat er in de literatuurstudie al een resultaat staat met betrekking tot de rekentijd, zal hier een eigen test worden uitgevoerd. Dit zullen we toepassen op centrale differentie en de complexe stapmethode. De methode volgend uit de stelling van Cauchy wordt hierbuiten gelaten aangezien de complexe stapmethode sneller zal zijn, met eenzelfde resultaat.

We zullen hierbij twee verschillende functies testen, allereerst een simpele functie met een simpele afgeleide. Vervolgens ook een ingewikkeldere functie met een lastige afgeleide. Voor de simpele functie kiezen we weer functie 3.1.

De afgeleide van deze functie is bekend, dus we kunnen nu ook de rekentijd vergelijken met het berekenen van de analytische afgeleiden. Om tot een goede vergelijking te komen zal de afgeleide berekend worden voor de natuurlijke getallen van 1 tot 10 miljoen. Aangezien de rekentijd kan variëren door achtergrondprocessen op de computer, zal dit vijf maal worden herhaald. Dan komen we tot de volgende resultaten:

Tabel 3.2: Rekentijd voor $f(x) = x^{\frac{9}{2}}$

Methode	Rekentijd	Relatieve rekentijd
Centrale differentie	58.4 seconden	0.87
Complexe stap	67.2 seconden	1.00
Analytisch	32.0 seconden	0.48

We zien hier eenzelfde verschil in de rekentijd voor de complexe stap methode ten opzichte van de centrale differentie zoals gevonden in de literatuurstudie. Hierbij geldt wel dat de complexe stap methode preciezer is, zoals te zien is in de literatuurstudie. Duidelijk is ook te zien dat analytisch berekenen voor deze functie sneller is.

We nemen nu een ingewikkeldere functie om de rekentijd hiervan te bepalen. Een ingewikkeldere functie zal meer rekentijd vergen per functieëvaluatie, waarbij mogelijk de complexe stapmethode in het voordeel komt doordat er maar één functieëvaluatie nodig is. We nemen:

$$f(x) = \cos(x^2)^2 \quad (3.2)$$

Van deze functie is de afgeleide analytisch te bepalen, dit levert ons de volgende functie op:

$$f'(x) = -4x \sin(x^2) \cos(x^2) \quad (3.3)$$

Hiervan zullen we weer op eenzelfde manier de benodigde rekentijd bepalen. De resultaten hiervan staan in Tabel 3.3. Hierin valt te zien dat de complexe stapmethode de kortste rekentijd heeft.

Tabel 3.3: Rekentijd voor $f(x) = \cos(x^2)^2$

Methode	Rekentijd	Relatieve rekentijd
Centrale differentie	107.0 seconden	1.08
Complexe stap	98.8 seconden	1.00
Analytisch	205.1 seconden	2.08

3.3 Tweede afgeleide

We zullen nu de eerst de precisie van de verschillende gevonden complexe stapmethodes bepalen. We zullen de schattingen van de stelling van Cauchy (vergelijkingen 1.20 en 2.21), complexe stap invullen in centrale differentie (vergelijking 2.5) en de eerste orde complexe stap methode (vergelijking 2.7) vergelijken met de methode van centrale differentie. We gebruiken weer de functie $f(x) = x^{\frac{9}{2}}$ in het punt $x = 1.5$. De tweede afgeleide voor dit punt is 43.4018963799. Voor centrale differentie, in vergelijkingen 2.5 en 2.7 kan de h steeds kleiner worden gemaakt, daarvan zien we het resultaat in Tabel 3.4. Voor vergelijking 2.7 hebben we $h1$ en $h2$ aan elkaar gelijk gesteld.

In Tabel 3.4 zien we het te verwachte gedrag bij centrale differentie, de fout neemt eerst af en daarna toe, waarna de afschatting van de afgeleide 0 wordt doordat binnen de precisie van

Tabel 3.4: Fout bij numeriek berekenen van de tweede afgeleide van $x^{9/2}$ in $x = 1.5$

h	Centrale differentie	Complexe stap	Complexe stap 1e afgeleide invullen
10^{-1}	0.60×10^{-1}	0.60×10^{-1}	0.89×10^{-5}
10^{-2}	0.60×10^{-3}	0.60×10^{-3}	0.89×10^{-9}
10^{-3}	0.60×10^{-5}	0.60×10^{-5}	0.32×10^{-11}
10^{-4}	0.80×10^{-8}	0.63×10^{-6}	0.11×10^{-10}
10^{-5}	0.99×10^{-5}	0.79×10^{-5}	0.92×10^{-9}
10^{-6}	0.17×10^{-3}	0.55×10^{-2}	0.22×10^{-8}
10^{-6}	0.59×10^{-1}	0.56×10^{-1}	0.30×10^{-7}
10^{-8}	7.87	9.89	0.29×10^{-6}
10^{-9}	43.40	43.40	0.40×10^{-5}
10^{-10}	8.88×10^2	43.40	0.88×10^{-5}
10^{-11}	8.88×10^6	43.40	0.12×10^{-4}
10^{-12}	8.88×10^8	43.40	0.41×10^{-2}
10^{-13}	8.88×10^{10}	43.40	0.23×10^{-1}
10^{-14}	43.40	43.40	0.11
10^{-15}	43.40	43.40	2.35

de computer dezelfde waarde van elkaar wordt afgetrokken. De complexe stapmethode geeft eenzelfde resultaat, maar bereikt niet de precisie van centrale differentie. De complexe stapmethode voor de eerste afgeleide gebruiken levert wel betere resultaten op met een kleinere fout dan bij centrale differentie. De fout bij het gebruiken van de complexe stapmethode voor de eerste afgeleide kan mogelijk nog worden verkleind door $h1$ en $h2$ niet aan elkaar gelijk te kiezen, maar te variëren. Dan krijgen we het resultaat in Tabel 3.5. $h1$ is de stapgrootte van de complexe stap en $h2$ van de centrale differentie.

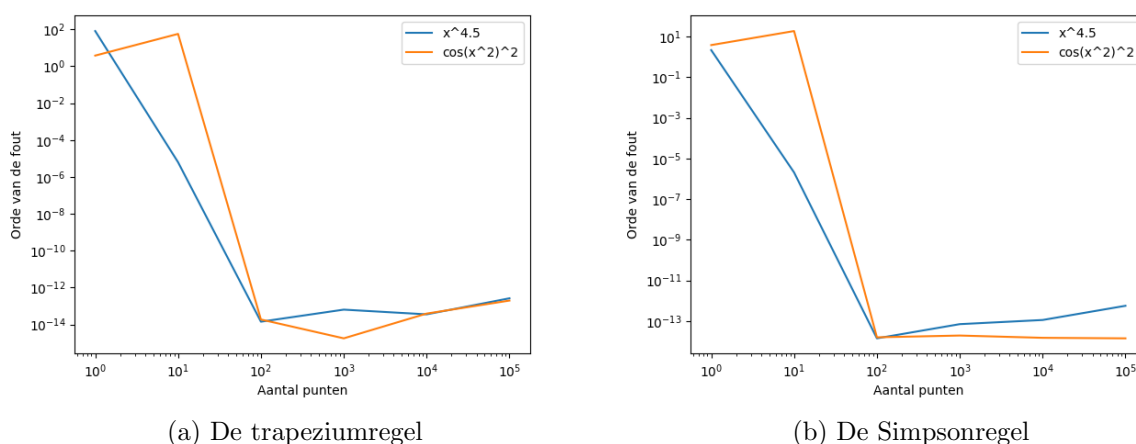
Tabel 3.5: Precisie voor complexe stap methode eerste afgeleide invullen met wisselende $h1$ en $h2$

h1 \ h2	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}	10^{-11}
10^{-1}	.89E-6	.12	.12	0.12	.12	.12	.12	.12	.12	.12	.12
10^{-2}	.12	.89E-9	.12E-2	.12E-2	.12E-2	.12E-2	.12E-2	.12E-2	.12E-2	.11E-2	.86E-5
10^{-3}	.12	.12E-2	.33E-11	.12E-4	.12E-4	.12E-4	.12E-4	.11E-4	.55E-5	.18E-4	.18E-4
10^{-4}	.12	.12E-2	.12E-4	.11E-10	.12E-6	.12E-6	.45E-7	.28E-6	.11E-4	.61E-4	.13E-3
10^{-5}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.92E-9	.46E-8	.23E-7	.26E-6	.41E-5	.95E-5	.64E-4
10^{-6}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.20E-8	.22E-8	.26E-7	.16E-6	.58E-5	.13E-4	.98E-4
10^{-7}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.15E-8	.37E-8	.30E-7	.16E-6	.30E-5	.28E-5	.34E-4
10^{-8}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.16E-8	.16E-8	.38E-7	.29E-6	.57E-5	.57E-5	.61E-4
10^{-9}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.14E-8	.33E-8	.38E-7	.13E-6	.40E-5	.11E-4	.23E-3
10^{-10}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.15E-8	.33E-8	.38E-7	.23E-6	.36E-5	.88E-5	.40E-4
10^{-11}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.15E-8	.33E-8	.28E-7	.28E-6	.28E-5	.12E-5	.12E-4
10^{-12}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.14E-8	.29E-8	.41E-7	.25E-6	.38E-5	.43E-5	.44E-4
10^{-13}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.15E-8	.58E-8	.32E-7	.45E-6	.38E-5	.24E-5	.16E-3
10^{-14}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.14E-8	.15E-8	.28E-7	.12E-6	.25E-5	.63E-5	.16E-3
10^{-15}	.12	.12E-2	.12E-4	.12E-6	.15E-8	.40E-8	.34E-7	.16E-6	.31E-5	.16E-4	.32E-4

In Tabel 3.5 valt te zien dat voor niet te kleine waarden van $h1$ en $h2$ deze om te wisselen

zijn zonder een andere orde van de fout te krijgen. Het gelijk nemen van h_1 en h_2 levert een kleinere fout op dan te verwachten valt vanuit de omliggende waardes, waarbij 10^{-3} voor h_1 en h_2 het beste resultaat blijkt op te leveren. Vanaf 10^{-6} voor h_1 maakt deze stap geen verschil meer in de grootte van de fout, deze is dan altijd kleiner dan de fout die komt met h_2 .

Voor de afschatting uit de stelling van Cauchy kan de precisie worden verhoogd door het aantal punten m toe te laten nemen, dan krijgen we, als we voor de straal $r = 1$ nemen, Figuur 3.1a en 3.1b. Hierin is links de trapeziumregel te zien en rechts de Simpsonregel. Voor de simpele functie zien we dat de fout met 6 ordes afneemt bij een vertienvoudiging van het aantal punten. De theorie stelt dat dit 3 respectievelijk 5 is. Voor de ingewikkeldere functie is te zien dat er meer punten nodig zijn voordat de precisie toeneemt, maar dan gaat de precisie in één keer naar het maximale mogelijk.



Figuur 3.1: De fout bij het numeriek berekenen van de tweede afgeleide van $x^{9/2}$ in $x = 1.5$ voor de schattingen met de stelling van Cauchy

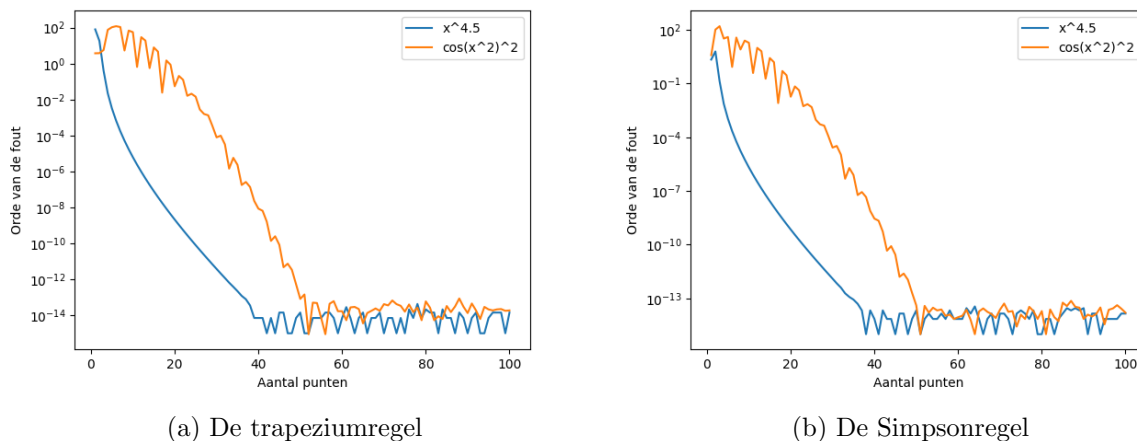
Om dit gedrag beter te bestuderen, kijken we nu naar $m = 1, 2, \dots, 100$. Dan is beter te zien hoe de precisie zich ontwikkelt. Hiervoor kijken we naar Figuur 3.2a en 3.2b. Nu is duidelijk te zien dat een simpele functie de orde van de fout per punt extra steeds minder afneemt, want dan daalt de afstand tussen twee punten ook minder. Voor een complexere functie zien we nu dat de fout wat schommelt rond de trend, vandaar dat de fout bij 10 punten groter kan zijn dan bij 1. Hier neemt de fout juist steeds sneller af bij elk extra punt, doordat de functie ingewikkelder is, zijn er ook meer punten nodig. Er valt te zien dat de Simpsonmethode niet beter is dan de trapeziumregel, maar per punt zijn er wel 2 functieëvaluaties nodig in plaats van 1.

3.3.1 Veranderende straal bij Stelling van Cauchy

In deze paragraaf zullen we kijken of een andere straal betere en/of slechtere resultaten oplevert bij de stelling van Cauchy. Dit zullen we eerst doen met de trapeziumregel. We hebben alleen gekozen voor een kleinere straal, omdat dan de afstand tussen de verschillende punten kleiner wordt, waarmee de fout hoort af te nemen. De resultaten staan in Tabel 3.6. Hierin is te zien dat voor een kleinere straal de fout sneller afneemt, maar dat de minimale fout wel groter blijft.

3.3.2 Rekentijd

De methodes voor de tweede afgeleide zullen ook worden getest op de rekestijd, de procedure zal hierbij dezelfde zijn als voor de eerste afgeleide, maar nu met 1 miljoen waardes in plaats



Figuur 3.2: De fout bij het numeriek berekenen van de tweede afgeleide van $x^{9/2}$ in $x = 1.5$ voor de afschattingen met de stelling van Cauchy, voor $m = 1, 2, \dots, 100$

Tabel 3.6: Precisie met de stelling van Cauchy bij verschillende straal en aantal punten

Aantal punten straal	10	20	30	40	50	60	70	80	90
0.0001	1.97E-09	3.37E-10	1.52E-09	1.88E-11	1.28E-09	1.29E-09	1.42E-10	5.57E-10	5.09E-10
0.001	6.96E-12	5.97E-12	2.53E-11	5.81E-13	1.11E-11	1.21E-11	2.69E-12	4.33E-12	5.32E-12
0.1	1.44E-13	1.42E-13	1.67E-13	1.29E-13	3.28E-13	7.24E-14	1.41E-13	1.65E-13	1.66E-13
1	6.22E-06	2.10E-09	3.80E-12	7.11E-15	7.11E-15	7.11E-15	0.0	2.13E-14	0.0

van 10 miljoen aangezien de rekestijd al aardig zal toenemen. We nemen weer Functie 3.1. Voor de stapgrootte nemen we degene met de hoogste precisie. Bij de afschatting met de stelling van Cauchy zetten we het aantal punten op 40, de ondergrens voor het bereiken van de precisie. De rekestijd voor deze functies staat in Tabel 3.7.

Tabel 3.7: Rekestijd voor $f(x) = x^{9/2}$

Methode	Rekestijd	Relatieve rekestijd
Centrale differentie	10.0 seconden	2.94
Complexe stap	10.8 seconden	3.18
Gebruiken 1e orde complexe stap	15.7 seconden	4.62
Stelling van Cauchy	882.0 seconden	259.41
Analytisch	3.4 seconden	1.00

Het is duidelijk dat de afschatting met de stelling van Cauchy zeer langzaam is en daarmee niet erg bruikbaar. De complexe stap methode voor de tweede afgeleide is iets langzamer dan centrale differentie en het gebruik van de eerste orde complexe stap methode is duidelijk langzamer. Voor een simpele functie blijft het analytisch berekenen het snelst.

De rekestijd zullen we nu berekenen voor de Functie 3.2, om overflow te voorkomen nemen we $r = 0.0001$ bij de methode met de stelling van Cauchy en $h_1 = h_2 = 10^{-4}$ bij de methode met de 1e orde complexe stap methode. Deze resultaten staan in Tabel 3.8. Met een complexere functie is er over de gehele linie een langere rekestijd, vooral de analytische methode duurt langer. Gebruik maken van de eerste orde complexe stap methode is nu de snelste optie, met

centrale differentie er vlak achter. Het gebruik van de stelling van Cauchy is relatief weinig langer geworden, maar blijft veruit de langzaamste methode.

Tabel 3.8: Rekening voor $f(x) = \cos(x^2)^2$

Methode	Rekening	Relatieve rekening
Centrale differentie	23.1 seconden	0.41
Complexe stap	26.0 seconden	0.46
Gebieden 1e orde complexe stap	21.7 seconden	0.39
Stelling van Cauchy	1053.3 seconden	18.77
Analytisch	56.1 seconden	1.00

Hoofdstuk 4

Toepassen op differentiaalvergelijkingen

We zullen kijken naar de mogelijke toepassingen van de verschillende complexe methodes bij het oplossen van differentiaalvergelijkingen. We zullen hierbij niet de functie benaderen, maar op een interval punten plaatsen waarvan de waarde van de functie wordt berekend. We beginnen met grenswaardeproblemen, waarna we beginwaardeproblemen zullen onderzoeken.

4.1 Grenswaardeproblemen

Als er sprake is van een grenswaardeprobleem, is het mogelijk om eindige differentie toe te passen. Voor een differentiaalvergelijking zoals in vergelijking 4.3 kunnen we de tweede afgeleide afschatten met één van de gevonden complexe methodes. Hiervoor hebben we een grid van punten nodig over een beperkt interval.

$$-y'' + q(x)y = f(x) \tag{4.1}$$

$$y(0) = y_0 \tag{4.2}$$

$$y(1) = y_1 \tag{4.3}$$

We nemen bijvoorbeeld vergelijking 2.7 voor het afschatten van de tweede afgeleide. Als we een equidistant raster nemen tussen 0 en 1 met n punten, wordt $x_j = \frac{j}{n}$. Dan krijgen we voor een aproximatie voor $y_j = y(x_j)$ en afstand h tussen twee punten:

$$-\frac{\operatorname{Im}(y(x_{j+1} + ih)) - \operatorname{Im}(y(x_{j-1} + ih))}{2h^2} + q_j y_j = f_j \tag{4.4}$$

Hierbij hebben we het probleem dat we per punt x_j twee onbekende hebben, namelijk y_j en $y(x_j + ih)$. Dit resulteert dus in een stelsel van n vergelijkingen en $2n$ onbekende, dat kunnen we niet oplossen. De complexe stapmethode is dus niet toepasbaar op lineaire differentiaalvergelijkingen, we zullen in de volgende sectie niet-lineaire differentiaalvergelijkingen onderzoeken of het daar wel mogelijk is om toe te passen.

4.1.1 Niet-lineaire differentiaalvergelijkingen

We zullen nu kijken naar niet-lineaire grenswaardeproblemen, we nemen eerst een eenvoudig voorbeeld:

$$-y'' + y^4 = x \quad (4.5)$$

$$y(0) = 0 \quad (4.6)$$

$$y(1) = 0 \quad (4.7)$$

De gebruikelijke oplossingsmethode hiervoor is met de eindige differentiemethode een stelsel van niet-lineaire vergelijkingen te maken, waarna deze met de methode van Newton-Rapson worden opgelost. Voor stelsels is hierbij de Jacobiaan nodig, die vaak wordt afgeschat door middel van een numerieke benadering. Hier kunnen we wel een verschil maken met een complexe numerieke methode, aangezien deze Jacobiaan de afgeleide bevat van een functie die we kennen.

Als we gebruik maken van de eindige differentiemethode, hebben we eerst een afstand h nodig tussen de punten x_i . We zullen beginnen we met 10^{-2} . Dan krijgen we voor een punt $u_i \sim y(x_i)$:

$$\frac{-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}}{h^2} + u_i^4 = x_i \quad (4.8)$$

Dan krijgen we op deze manier $N = 1/h = 10^2$ intervallen, met bijbehorende punten. Voor $x_0 = 0$ en $x_N = 1$ geldt dat $u_0 = 0$ en $u_N = 0$ wegens de randvoorwaarden.

We hebben nu een systeem van N vergelijkingen van de vorm:

$$f_i(u_0, \dots, u_N) = \frac{-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}}{h^2} + u_i^4 - x_i = 0 \quad (4.9)$$

Om de oplossing van dit stelsel te vinden passen we de Newton-Rapson methode toe. Dit is een iteratief proces dat van een beginschatting \underline{u}^0 een betere schatting \underline{u}^1 maakt en zo verder. Hiervoor moet het stelsel worden gelineariseerd. Dit doen we op de volgende manier:

$$f(\underline{u}^k) \sim f_i(\underline{u}^{k-1}) + J(\underline{u}^{k-1})(\underline{u}^k - \underline{u}^{k-1}) \quad (4.10)$$

Met in de Jacobiaan, waarin e_i de eenheidsvector is voor het i -de element, en $\epsilon = 10^{-20}$ de stapgrootte:

$$\frac{\partial f_j}{\partial u_i} = \frac{Im(f_j(\underline{u}^{k-1} + i\epsilon e_i))}{\epsilon} \quad (4.11)$$

Uit vergelijking 4.10 kunnen we dan de schatting \underline{u}^k halen door te stellen dat $f(\underline{u}^k)$ gelijk moet zijn aan 0:

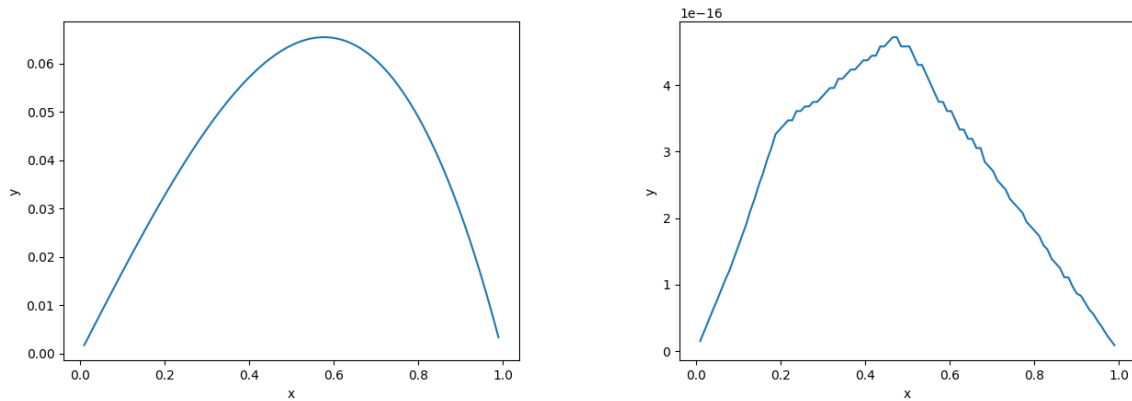
$$\underline{u}^k = \underline{u}^{k-1} - J^{-1}(\underline{u}^{k-1})f(\underline{u}^{k-1}) \quad (4.12)$$

4.1.2 Resultaten

Om te zien of deze methode goed werkt zullen we het vergelijken met centrale differentie om de Jacobiaan af te schatten. Voor stapgrootte h in de centrale differentie nemen we eerst dezelfde stapgrootte als tussen de punten. Als we kijken naar het resultaat na 10 stappen zien we in Figuur 4.1.

In dit figuur zien we links de oplossing en rechts het verschil tussen de complexe stap methode en centrale differentie. Hierin is te zien dat het verschil zeer klein is.

Het is ook belangrijk om te weten hoe snel de convergentie van Newton-Rapson zich voordoet met de complexe stapmethode, we nemen de waarde na 10 stappen als de 'exacte' oplossing en berekenen de fout volgens vergelijking 4.13.



(a) Uitkomst niet lineair stelsel met complexe stapmethode

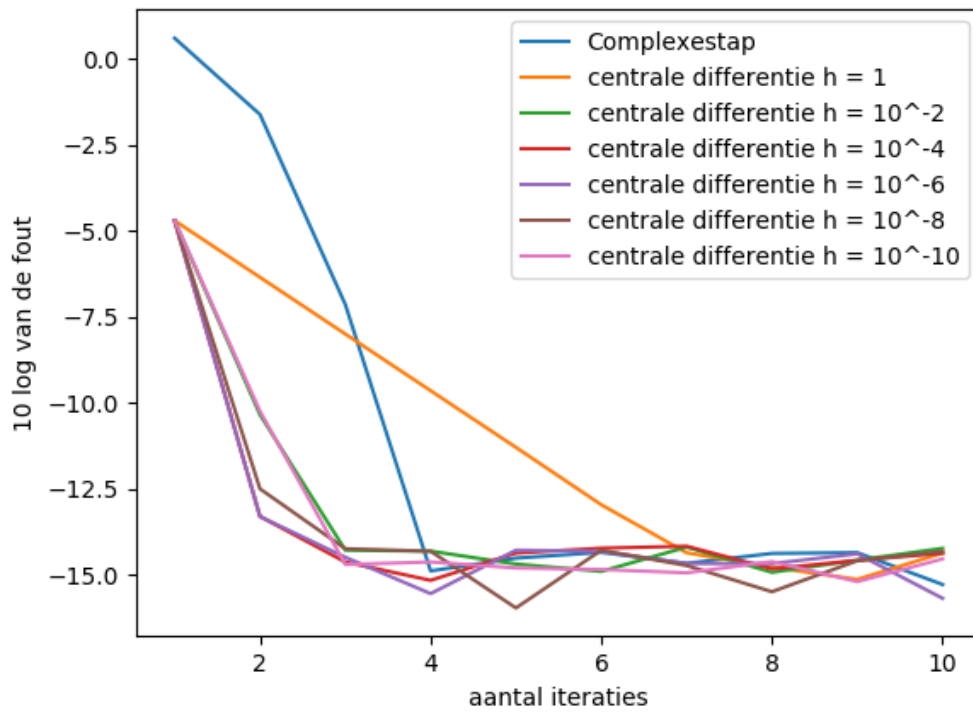
(b) Het verschil met centrale differentie voor de Jacobiaan

Figuur 4.1: De oplossing met de complexe stapmethode en het verschil met centrale differentie

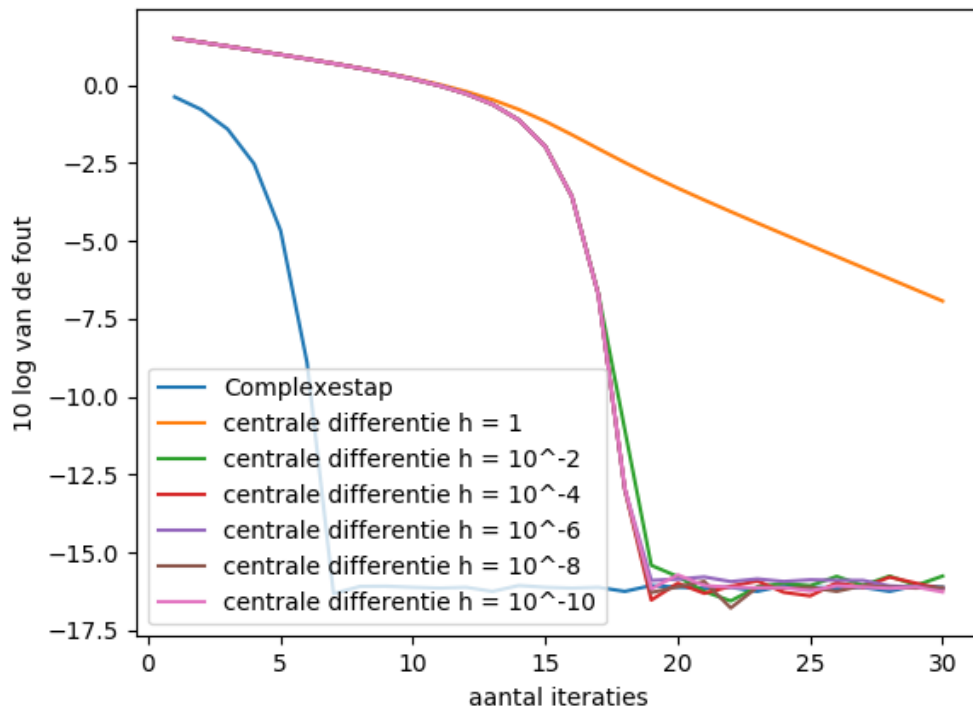
$$fout = \frac{\|u_{complex} - u_{exact}\|_2}{\|u_{exact}\|_2} \quad (4.13)$$

Een ander belangrijk aspect is om te kijken of de stapgrootte van de centrale differentie binnen de Jacobiaan nog uitmaakt, dus we zullen we ook verschillende stapgroottes uitproberen. Als we vervolgens kijken naar hoe de fout zich ontwikkelt na de verschillende iteraties krijgen we Figuur 4.2. Hierin zien we dat de orde van de fout voor de complexe stapmethode eerst steeds sneller afneemt tot het na 4 iteraties constant blijft. De centrale differentie begint met een kleinere fout en is dan ook na 3 iteraties geconvergeerd als de h voldoende klein is, anders gaat de convergentie langzamer. Een zeer kleine h heeft weinig invloed op het resultaat.

Tot nu toe hebben we gekeken naar het interval $[0, 1]$, dit kunnen we ook uitbreiden naar bijvoorbeeld $[0, 10]$, waarbij het aantal punten niet toeneemt. Dan krijgen we de resultaten van Figuur 4.3. Hierin is duidelijk het voordeel te zien van de complexe stapmethode, deze convergeert sneller dan met centrale differentie. We zien hierbij dat zolang de afstand tussen verschillende punten voldoende groot is, er geen verschil is. Het grotere interval zorgt wel voor een hoger aantal benodigde iteraties om tot de oplossing te komen.



Figuur 4.2: De logaritme van de fout na de verschillende iteraties



Figuur 4.3: De logaritme van de fout na de verschillende iteraties op het interval $[0, 10]$

4.1.3 Andere functies

We hebben gekeken naar Functie 4.6, maar verschillende functies kunnen andere resultaten geven. We zullen daarom nu kijken naar meerdere verschillende functies:

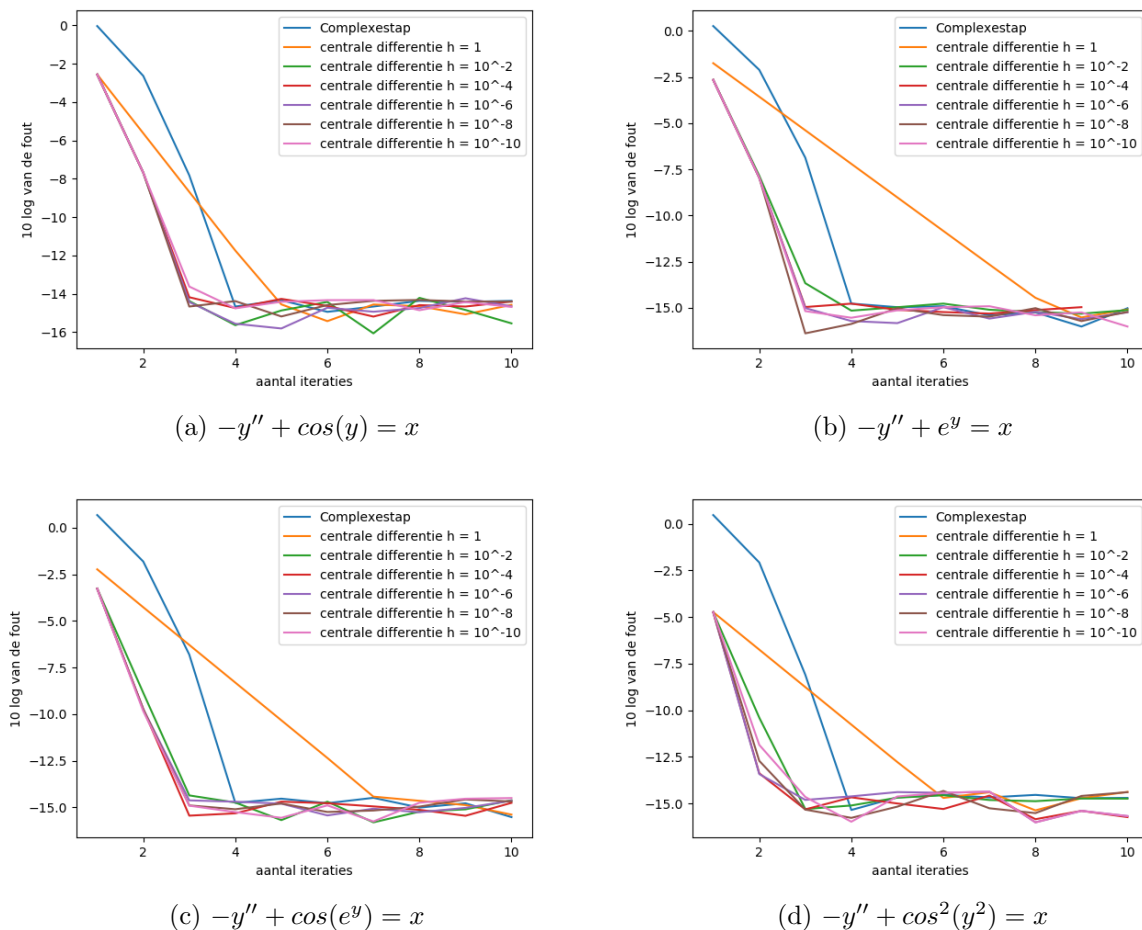
$$-y'' + \cos(y) = x \quad (4.14)$$

$$-y'' + e^y = x \quad (4.15)$$

$$-y'' + \cos(e^y) = x \quad (4.16)$$

$$-y'' + \cos^2(y^2) = x \quad (4.17)$$

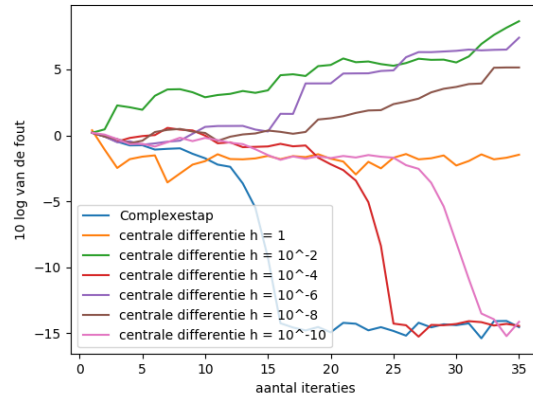
Als we dan weer naar de fout kijken bij de verschillende opties, dan krijgen we de resultaten van Figuur 4.4. Er ontstaat weer eenzelfde patroon als bij de $-y'' + y^4 = x$. De fout van de complexe stapmethode blijft iets tot de vierde iteratie van Newton-Rapson significant, waar de beste stapgroottes van centrale differentie al na drie iteraties is geconvergeerd. Centrale differentie met $h = 1$ is blijft langzaam convergeren. De beste h voor centrale differentie varieert in de derde iteratie, in het éne geval is 10^{-4} de beste en in een ander geval 10^{-8} .



Figuur 4.4: De logaritme van de fout met verschillende functies

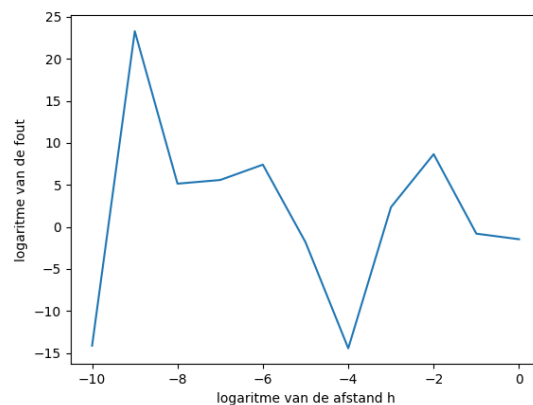
Hier is het ook mogelijk om naar een groter interval te kijken, zeker voor de functie $\cos^2(y^2)$ kan dat inzicht opleveren wegens het heftig oscillerende karakter van deze functie voor een grotere y . Alleen het interval aanpassen naar $[0, 10]$ levert geen convergentie op, de afstand tussen de

punten wordt dan te groot. Het interval $[0, 5]$ met 500 in plaats van 100 levert dat wel op, dan hebben we dezelfde afstand tussen punten als op het interval $[0, 1]$. Dan krijgen we de resultaten van Figuur 4.5. Hierin zien we duidelijk dat er meer iteraties nodig zijn voordat convergentie optreedt, waarbij de complexe stapmethode de snelste methode is en dat bij centrale differentie niet voor alle h convergentie optreedt. Alleen $h = 10^{-4}$ en $h = 10^{-10}$ convergeren.



Figuur 4.5: De logaritme van de fout na de verschillende iteraties

Dat alleen $h = 10^{-4}$ en $h = 10^{-10}$ convergeren is bijzonder, daarom kunnen we voor wat meer inzicht ook de tussenliggende stapgroottes uitrekenen om zo een beter beeld te krijgen van wat er aan de hand is. De resultaten hiervan staan in Figuur 4.6. Dit geeft niet veel inzicht, nog steeds blijven $h = 10^{-4}$ en $h = 10^{-10}$ de enige die goed convergeren. Wel zien we als trend dat dichter bij $h = 10^{-4}$ beter werkt, waarbij $h = 10^{-10}$ een uitzonderlijke uitschieter is.



Figuur 4.6: De logaritme van de fout bij verschillende stapgroottes voor de centrale differentie

4.1.4 Uitgebreidere niet-lineaire differentiaalvergelijking

Één differentiaalvergelijking geeft niet een volledig beeld van wanneer de complexe stapmethode toepasbaar is, daarom zullen we nu naar een uitgebreidere differentiaalvergelijking kijken. We kijken nu naar:

$$-y'' + y^2 y' + y = x \quad (4.18)$$

$$y(0) = 0 \quad (4.19)$$

$$y(1) = 0 \quad (4.20)$$

We zullen weer Newton-Rapson gebruiken met $h = 10^{-2}$. Dan krijgen we voor een punt $u_i \sim y(x_i)$:

$$\frac{-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}}{h^2} + u_i^2 \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + u_i = x_i \quad (4.21)$$

Dit levert het onderstaande stelsel van vergelijkingen op, waarbij i van 1 tot $N - 1$ loopt:

$$f_0(u_0, \dots, u_N) = \frac{-u_{i+1} + 2u_i}{h^2} + u_i^2 \frac{u_{i+1}}{2h} + u_i - x_i = 0 \quad (4.22)$$

$$f_i(u_0, \dots, u_N) = \frac{-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}}{h^2} + u_i^2 \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + u_i - x_i = 0 \quad (4.23)$$

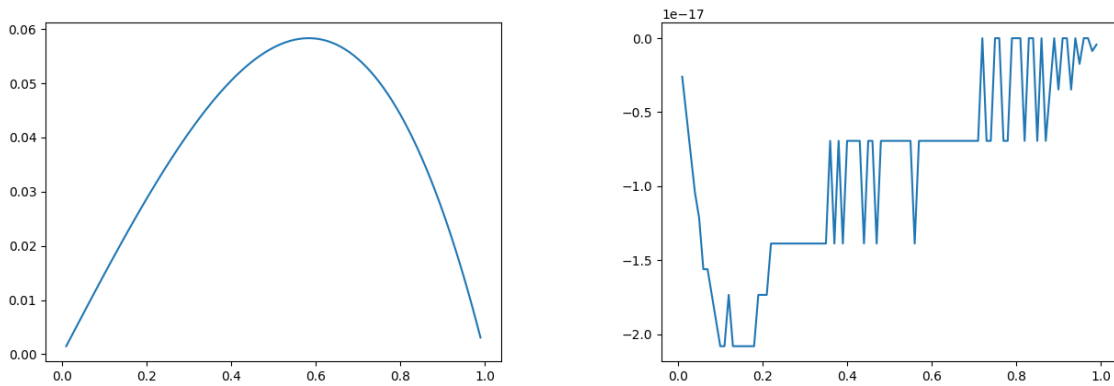
$$f_N(u_0, \dots, u_N) = \frac{2u_i - u_{i-1}}{h^2} + u_i^2 \frac{-u_{i-1}}{2h} + u_i - x_i = 0 \quad (4.24)$$

Dit zal dan op eenzelfde manier met Newton-Rapson komen tot:

$$\underline{u}^k = \underline{u}^{k-1} - J^{-1}(\underline{u}^{k-1})f(\underline{u}^{k-1}) \quad (4.25)$$

Na 10 stappen van de Newton-Rapsonmethode krijgen we de resultaten van Figuur 4.7. Als we gebruik maken van centrale differentie, nemen we $h = 10^{-2}$. In de linker afbeelding zien we de uitkomst, een nette en te verwachte oplossing. Rechts zien we een miniem verschil tussen de complexe stapmethode en centrale differentie, er lijken dus nog geen voordelen te zitten aan de complexe stapmethode in dit geval.

We zullen ook weer de convergentiesnelheid uitzoeken, ten opzichte van centrale differentie,

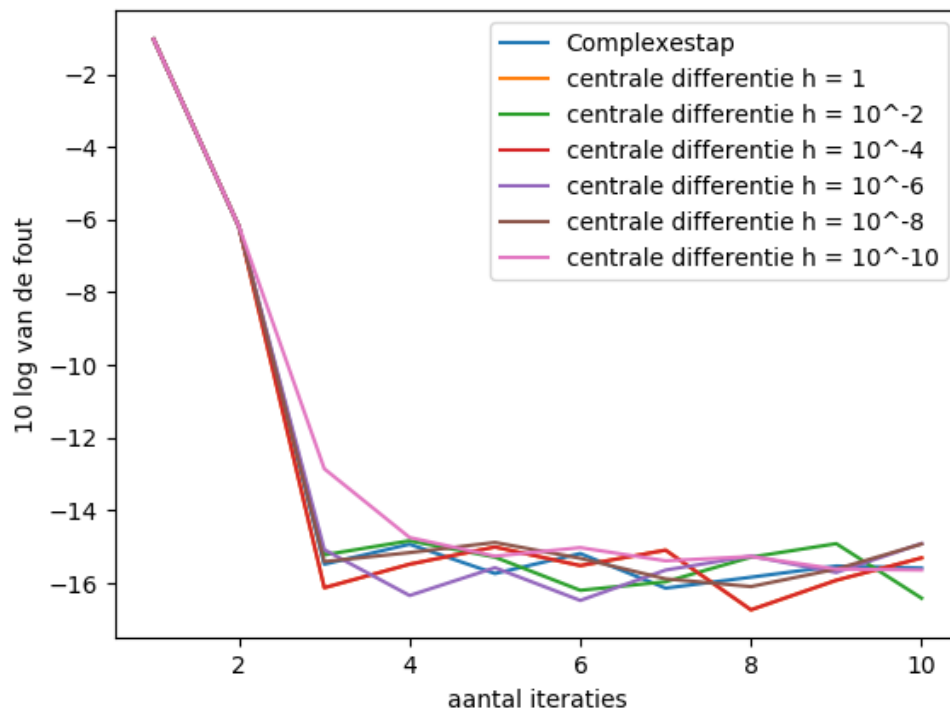


(a) Uitkomst niet lineair stelsel met complexe stapmethode

(b) Het verschil met centrale differentie voor de Jacobiaan

Figuur 4.7: De oplossing met de complexe stapmethode en het verschil met centrale differentie

door voor elke iteratie de fout te bepalen. Dan krijgen we de resultaten van Figuur 4.8. In dit figuur zien we dat alle methodes bijna even snel convergeren, alleen de centrale differentie met een $h = 10^{-10}$ heeft een extra stap nodig. Het verschil tussen centrale differentie met $h = 10^{-4}$ en $h = 1$ is zo klein dat in het figuur $h = 1$ volledig wegvalt.



Figuur 4.8: De logaritme van de fout na de verschillende iteraties

Nu zullen we ook weer kijken naar het interval $[0, 10]$, waarbij het aantal punten niet zal toenemen. Deze resultaten staan in Figuur 4.9. We zien weer een groter benodigd aantal iteraties om tot de oplossing te komen, maar elke methode convergeert even snel tot eenzelfde resultaat. Bij deze differentiaalvergelijking lijkt geen voordeel te zitten in de complexe stapmethode.

Bij het toepassen van centrale differentie voor de Jacobiaan wordt er een fout gemaakt, deze kan door middel van de Stelling van Taylor worden bepaald. Dit kan door de Taylorseries van u_{i+1} en u_{i-1} van elkaar af te halen en vervolgens door $2h$ te delen. Dan krijgen we:

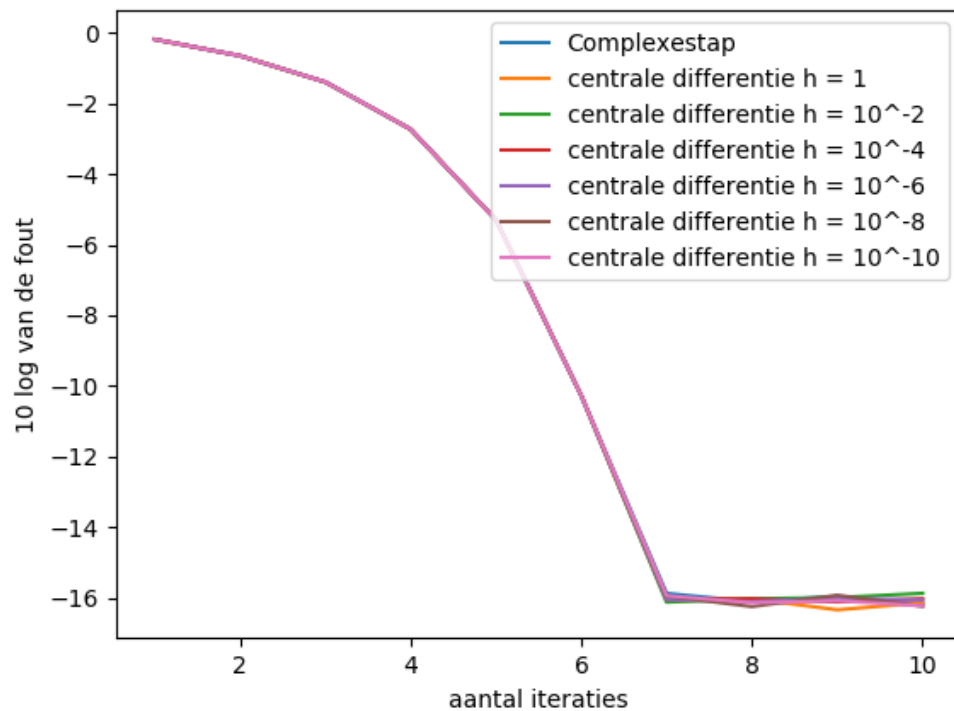
$$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = u'_i + \frac{h^2}{6}u'''_i + \mathcal{O}(h^4) \quad (4.26)$$

Voor functies die als derde en hogere orde afgeleide 0 dat er geen afbreekfout wordt gemaakt en dat de complexe stapmethode geen voordeel biedt, maar er zijn functies die dat niet hebben. Als we kijken naar Functie 4.27, heb je wel functies die een derde orde afgeleide heeft en zal centrale differentie fouten maken.

$$-y'' + \sin(y)y' + \sin(y) = x \quad (4.27)$$

Als we dan meteen naar het interval $[0, 10]$ kijken, met 500 punten zodat er mogelijk wel sprake is van convergentie, komen we tot de resultaten van Figuur 4.10. Hierin zien we dat er nog geen sprake is van convergentie, alleen de complexe stapmethode komt iets dichterbij.

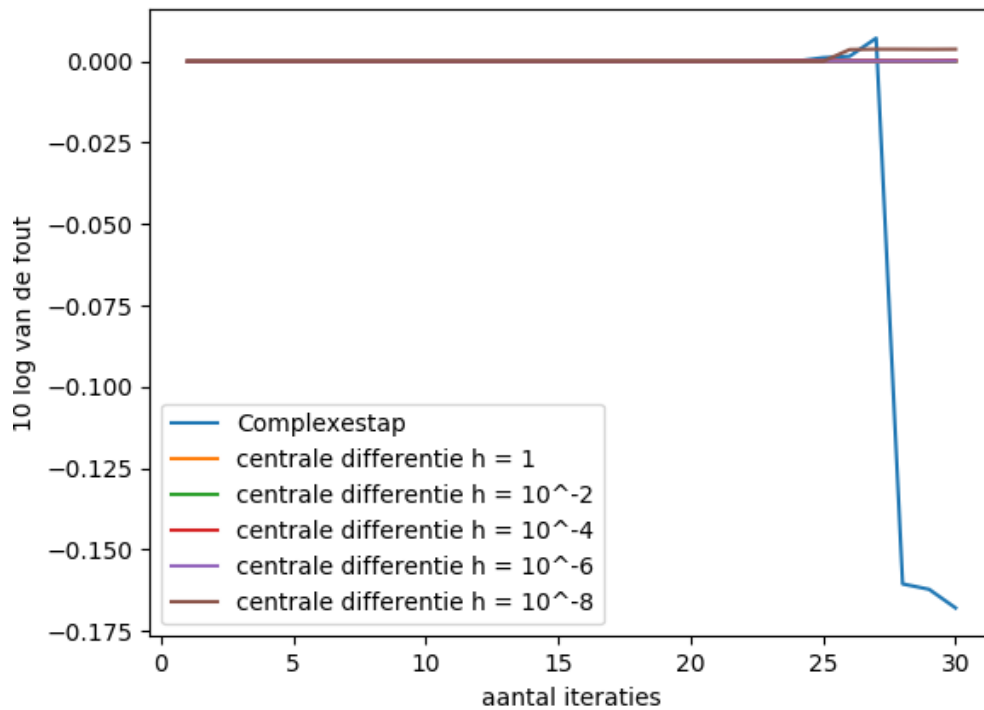
Om dit probleem op te lossen zullen we op zoek moeten naar een verbeterde beginschatting, waarop Newton-Rapson zal worden toegepast. We bereiken een betere beginschatting door eerst een numerieke oplossing te bepalen van $-y'' + \sin(y) = x$, dus door de term met de eerste afgeleide nog weg te laten. Dit probleem kan Newton-Rapson met de complexe stapmethode



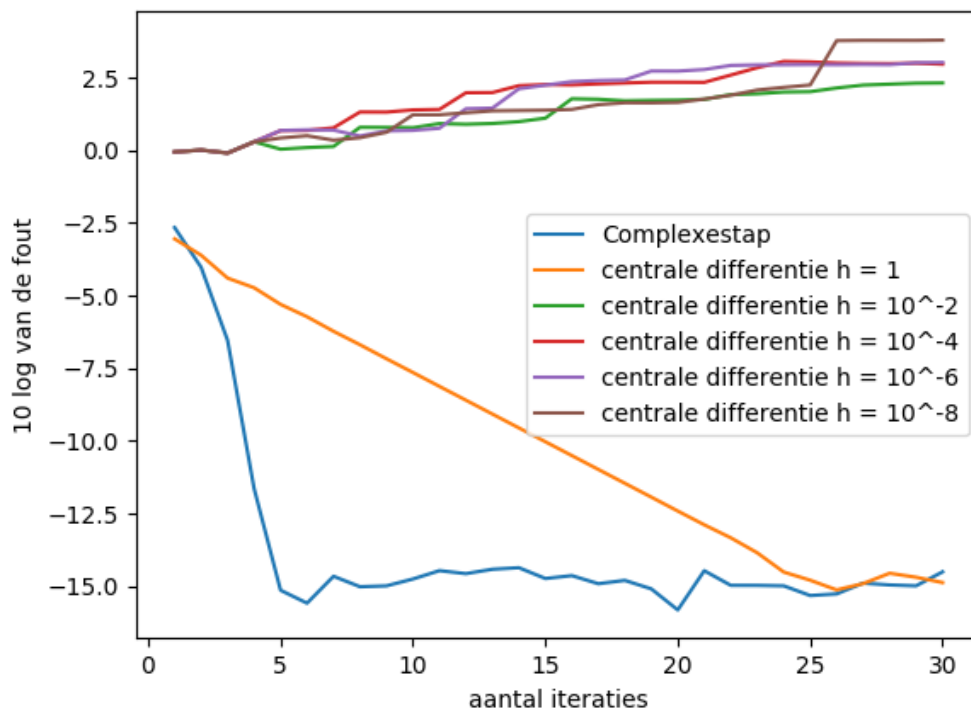
Figuur 4.9: De logaritme van de fout na de verschillende iteraties op het interval $[0, 10]$

wel oplossen, waarmee we een beginschatting hebben voor ons oorspronkelijke probleem, wat hiermee nu wel oplosbaar is.

Door dit proces uit te voeren krijgen we de resultaten zoals in Figuur 4.11. Hierin zien we een zeer duidelijk voordeel voor de complexe stapmethode door de snelle convergentie in 5 stappen. De centrale differentie werkt alleen met $h = 1$ na 25 stappen, de andere stapgroottes geven geen convergentie.



Figuur 4.10: De logaritme van de fout na de verschillende iteraties op het interval $[0, 10]$



Figuur 4.11: De logaritme van de fout na de verschillende iteraties op het interval $[0, 10]$

4.2 Beginwaardeproblemen

Vooralsnog hebben we de methodes onderzocht met één differentiaalvergelijking en een grenswaardeprobleem, waaruit dan een stelsel van niet-lineaire vergelijkingen volgt. We kunnen ook de methodes aan een stelsel van differentiaalvergelijkingen onderwerpen, waarbij we nu een beginwaardeprobleem zullen gebruiken. We zullen eerst kijken naar het roofdier-prooimodel:

$$\frac{dx}{dt} = ax(t) - bx(t)y(t) \quad (4.28)$$

$$\frac{dy}{dt} = cx(t)y(t) - dy(t) \quad (4.29)$$

Hierin stelt x de hoeveelheid prooien voor, y de roofdieren en a tot en met d zijn constanten. Om dit stelsel op te lossen zijn er beginwaarden nodig:

$$x(0) = x_0 \quad (4.30)$$

$$y(0) = y_0 \quad (4.31)$$

$$(4.32)$$

De complexe stapmethode kan niet direct worden toegepast op de linkerleden van 4.29, daarvoor moeten we namelijk de functie $x(t)$ en $y(t)$ kennen. Als het stelsel wordt geïntegreerd om tot een oplossing te komen krijgen we:

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t ax(t) - bx(t)y(t) dt \quad (4.33)$$

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t cx(t)y(t) - dy(t) dt \quad (4.34)$$

Hierbij kunnen we weer niet de complexe stapmethode toepassen, die is namelijk niet bruikbaar voor het oplossen van integralen.

Willen we alsnog gebruik maken van de complexe stapmethode, dan zullen we eerst moeten discretiseren en weer de Newton-Rapson methode toe passen. Voor de discretisatie kiezen we Euler achterwaards, deze methode is impliciet, maar heeft een grotere regio waarin die stabiel is. Voor een tijdstap Δt krijgen we:

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} = ax_{n+1} - bx_{n+1}y_{n+1} \quad (4.35)$$

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = cx_{n+1}y_{n+1} - dy_{n+1} \quad (4.36)$$

Als we N tijdstappen maken, krijgen we het volgende stelsel van vergelijkingen:

$$f_1(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N) = \frac{x_1 - x_0}{\Delta t} - ax_1 + bx_1y_1 = 0 \quad (4.37)$$

$$f_i(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N) = \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta t} - ax_i + bx_iy_i = 0 \quad (4.38)$$

$$f_N(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N) = \frac{x_N - x_{N-1}}{\Delta t} - ax_N + bx_Ny_N = 0 \quad (4.39)$$

$$f_{N+1}(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N) = \frac{y_1 - y_0}{\Delta t} - cx_1y_1 + dy_1 = 0 \quad (4.40)$$

$$f_{N+i}(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N) = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta t} - cx_iy_i + dy_i = 0 \quad (4.41)$$

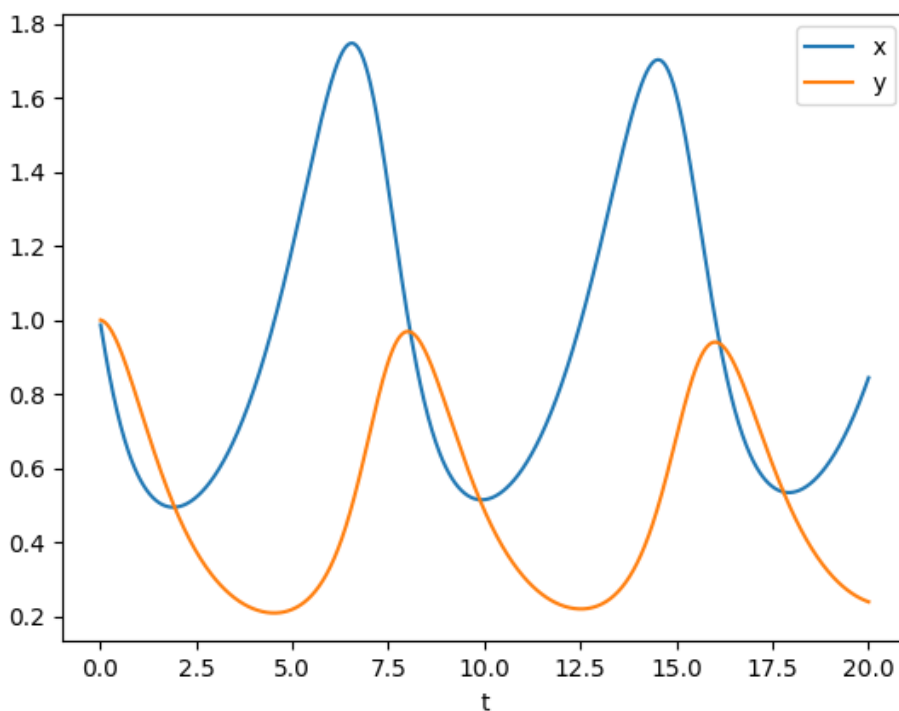
$$f_{2N}(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N) = \frac{y_N - y_{N-1}}{\Delta t} - cx_Ny_N + dy_N = 0 \quad (4.42)$$

Dit stelsel kan dan weer zoals eerder worden opgelost met Newton-Rapson:

$$\underline{u}^k = \underline{u}^{k-1} - J^{-1}(\underline{u}^{k-1})f(\underline{u}^{k-1}) \quad (4.43)$$

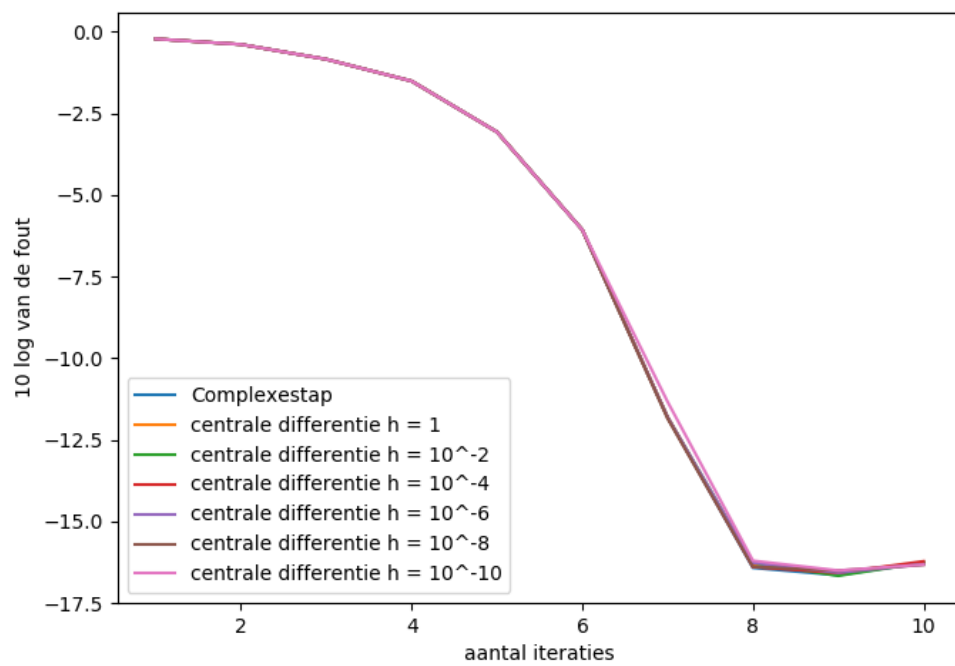
We nemen als constanten $a = 2/3$, $b = 4/3$, $c = d = 1$. Met deze constanten is het mogelijk om een evenwichtoplossing te vinden, dat geeft $x = 1$ en $y = 0.5$. Stel we nemen als beginwaarden $x_0 = 1$ en $y_0 = 1$, dan krijgen we als resultaat Figuur 4.12. We zien dat een kleine afwijking van de evenwichtoplossing in dit geval niet convergeert naar de evenwichtoplossing, maar periodiek lijkt te zijn.

Nu is het weer mogelijk om te kijken hoe snel de verschillende methodes convergeren naar



Figuur 4.12: Het verloop van het aantal roofdieren en prooien over de tijd

de correcte oplossing, na iedere iteratie van Newton-Rapson. We hebben weer de complexe stapmethode en verschillende stapgroottes bij centrale differentie. Dan krijgen we de resultaten die staan in Figuur 4.13. Het figuur laat zien dat de verschillende methodes precies even goed werken in dit geval.



Figuur 4.13: De logaritme van de fout na de verschillende iteraties

Conclusie

In de inleiding hebben we gezien dat het mogelijk is met een complexe stapmethode de afgeleide van reële functies te bepalen, voor lagere en hogere orde afgeleiden. De complexe stapmethode voor de eerste afgeleide heeft een kleinere foutmarge en een bredere keuze in stapgrootte h . De benodigde rekentijd is wel groter. Onze afleiding voor de hogere orde afgeleides is niet gelijk aan de in de literatuur vermelde vergelijking. Na het testen kunnen we concluderen dat de afleiding van Martins niet de correcte waarde geeft als de straal van de integraal ongelijk is aan één.

Vervolgens hebben we nieuwe methodes voor de tweede afgeleide ontwikkeld. De tweede afgeleide is benaderd door enerzijds gebruik te maken van de complexe stapmethode in de eerste afgeleide en anderzijds stapgrootte ih te gebruiken in de centrale differentie voor de tweede afgeleide. De derde aangepaste methode is verkregen door de integraal in de stelling van Cauchy met een andere methode te benaderen.

Als we kijken naar de snelheid en accuratesse van alle methodes komen we tot de conclusie dat de complexe stapmethode accurater is en afhankelijk van de functie ook sneller kan zijn. Voor de tweede afgeleide geldt dat de verschillende complexe methodes een precieuzer antwoord kunnen leveren, waarbij de juiste stapgrootte h belangrijk blijft. De methode met de stelling van Cauchy heeft de hoogste accuratesse, maar de methode waarmee de integraal wordt benaderd geeft geen verschil. De snelste methode hangt af van de functie waarvoor de afgeleide moet worden uitgerekend. De methode met de stelling van Cauchy kost de meeste rekentijd.

De toepassingen van complexe stapmethodes worden beperkt doordat de functie bekend moet zijn. Het is wel bruikbaar in het numeriek oplossen van niet-lineaire differentiaalvergelijkingen met de methode van Newton-Rapson, voor het bepalen van de afgeleide van het niet-lineaire gedeelte. Voor grenswaardeproblemen zien we dat er een even accuraat resultaat wordt behaald als de best presterende stapgrootte h van centrale differentie, maar er geen probleem is met het bepalen van de juiste stapgrootte. Er zijn ook in veel situaties minder iteraties nodig van Newton-Rapson met de complexe stapmethode. Voor een eenvoudig stelsel differentiaalvergelijkingen voor een beginwaardeprobleem kunnen we eenzelfde conclusie trekken.

Bibliografie

- [1] Holden, M. E. (1998). Aeroelastic Optimization using the Collocation Method. *PhD Thesis, Stanford*
- [2] Martins, J.; Kroo, I. & Alonso, J. (2000). An automated method for sensitivity analysis using complex variables. *AIAA-2000-0689*
- [3] Squire, W., & Trapp, G. (1998). Using complex variables to estimate derivatives of real functions. *SIAM, 40(1)*, 110-112