

Anders Logg

”

Slutsatsen är att vi visserligen inte kan beräkna lösningen till en differentialekvation exakt, men att detta inte spelar någon roll eftersom vi kan beräkna lösningen med precis den noggrannhet vi behöver

Jag är nog egentligen mer ingenjör än matematiker. Jag gillar att bygga saker, saker som funkar och kan vara till nytta. Just nu arbetar jag med att bygga en maskin för lösning av differentialekvationer.

Differentialekvationer utgör själva kärnan av naturvetenskapen och det finns många berömda differentialekvationer: Schrödingerekvationen, Maxwells ekvationer, Navier–Stokes ekvationer, Newtons ekvation, Einsteins ekvation osv, listan kan göras lång. Om man kan bygga en maskin (ett datorprogram) som automatiskt löser differentialekvationer kan man därför åstadkomma ganska mycket.

Alla dessa ekvationer kan lösas med hjälp av datorprogram, men olika ekvationer kräver olika program. Att skriva ett datorprogram för att lösa en ekvation är tidskrävande och kräver ofta många års arbete. Därför tittar jag i min forskning på hur man kan utveckla ett datorprogram



som automatiskt kan generera nya datorprogram, ett för varje differentialekvation som matas in i maskinen. Tillsammans med andra forskare har jag kommit en bra bit på vägen och en första prototyp av maskinen står nu färdig.

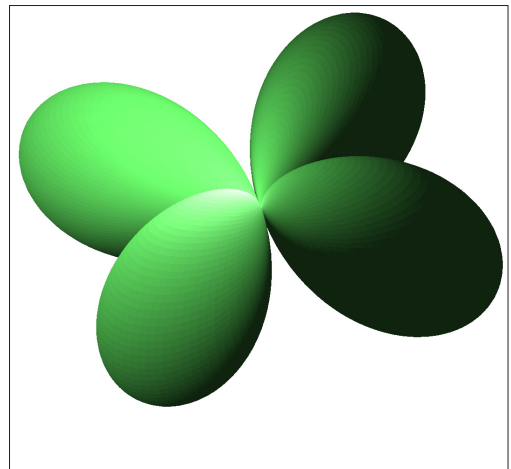
I texten jag har skrivit försöker jag förmedla att matematik är en experimentell vetenskap där datorn är experimentverkstaden. Med en laptop i ryggsäcken kan man därför utföra experiment och forska var man än befinner sig, vare sig det är på kontoret, hemma i soffan eller på en klippa vid havet.

Att lösa en differentialekvation

Naturen fullständigt vimlar av differentialekvationer! Åtminstone verkar det så för en matematiker. Ekvationerna dyker upp inom alla tänkbara ämnesområden och inom såväl fysik, kemi, biologi som ekonomi har differentialekvationerna en central position. Det är till och med så att hela ämnesområden växer fram när forskare samlas runt en differentialekvation och försöker lösa den! Hur ser då en differentialekvation ut? Ja, de kan till exempel se ut som den så kallade Schrödingerekvationen:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t).$$

Schrödingerekvationen är central inom kvantmekaniken och beskriver rörelsen hos små partiklar som till exempel elektroner. Genom att lösa Schrödingerekvationen kan man beräkna sannolikheten att finna elektronen i en viss position x vid en given tidpunkt t . Ofta åskådliggör man lösningen till Schrödingerekvationen genom att rita upp ett *elektronmoln* som visar var någonstans chansen är stor att elektronen skall påträffas. Ett sådant figur ser ni i bilden till höger. Men vad är då en differentialekvation för något



Figur 1. Elektronmoln

mystiskt egentligen? För det är ju uppenbarligen frågan om någonting mystiskt, åtminstone att döma av den knepiga Schrödingekvationen! En differentialekvation är som namnet säger en speciell sorts *ekvation*, och som bekant är en ekvation ett samband som uppfylls av någon okänd variabel. Ofta brukar den okända variabeln ha namnet x , som i ekvationen

$$2x = 6.$$

I denna ekvation är variabeln x ett *tal* och lösningen är $x = 3$. I Schrödingerekvationen heter den okända variabeln istället ψ som uttalas "psi" och är inte ett tal utan en *funktion*, som beror både på positionen x och tiden t . En differentialekvation skiljer sig alltså från en vanlig ekvation genom att lösningen är en funktion, som till exempel

$$\psi(x, t) = \sin(x) \cos(t)$$

eller

$$\psi(x, t) = \exp(-x^2/t).$$

En differentialekvation skiljer sig också från en vanlig ekvation genom att den innehåller en eller flera *derivator* av den okända funktionen. En derivata beskriver hur snabbt en funktion ändrar sig i rummet eller i tiden. I Schrödingekvationen finns det två stycken derivator. I vänsterledet hittar vi tidsderivatan

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

som anger hur snabbt funktionen ψ ändrar sig i punkten x vid tiden t . I högerledet hittar vi den speciella rumsderivatan

$$\Delta \psi(x, t)$$

som i runda slängar anger hur mycket funktionen ψ kröker sig i punkten x vid tiden t . En differentialekvation är alltså *en ekvation som uttrycker ett samband mellan derivator av någon obekant funktion*. Det har visat sig att det ofta ligger nära till hands att modellera naturen med just differentialekvationer, och det är därför differentialekvationerna har fått en sådan

enorm betydelse för naturvetenskapen. Men låt oss börja från början, med en lite enklare modell än Schrödingerekvationen.

En enkel modell

En enkel process som kan modelleras med en enkel differentialekvation är radioaktivt sönderfall. Vi tänker oss att vi startar med en viss mängd av någon radioaktiv isotop, till exempel Radium-226, och vi vill veta hur mycket som finns kvar av isotopen efter en viss tid. För att komma fram till en modell för sönderfallet behöver vi fundera över hur detta går till. Vad som händer när ett litet prov av en radioaktiv isotop sönderfaller är att de olika atomerna i provet faller sönder var och en och bildar nya isotoper som eventuellt också är radioaktiva och fortsätter sönderfalla. Ett rimligt antagande är därför att ju fler atomer det finns kvar av den ursprungliga radioaktiva isotopen, desto fler atomer är det som kan sönderfalla, vilket i sin tur bör resultera i en större *sönderfallshastighet*. Egentligen är detta ett ändligt förlopp, men om vi väljer att modellera mängden atomer som reella tal så börjar vi närma oss en differentialekvation som ju har med derivator och hastigheter att göra. Vi gör antagandet att sönderfallshastigheten är proportionell mot den kvarvarande mängden av den radioaktiva isotopen. För att uttrycka denna mycket enkla modell som en differentialekvation behöver vi införa en beteckning för den kvarvarande mängden av den radioaktiva isotopen. Vi låter $u(t)$ betyda den kvarvarande mängden av den radioaktiva isotopen vid tiden t . Sönderfallshastigheten ges då av tidsderivatan

$$-\frac{du(t)}{dt}.$$

Eftersom derivatan är negativ (den kvarvarande mängden minskar) behövs det ett minustecken. Uppmärksamma läsare kanske noterar att vi här skriver tidsderivatan med beteckningen du/dt istället för $\partial u/\partial t$. Det brukar man göra när en funktion bara beror på en variabel, i det här fallet tiden t , och inte flera variabler som funktionen ψ i Schrödingere-

ekvationen som beror på både x och t . För att ytterligare förvillan kan man också skriva derivatan med beteckningen $u'(t)$ som vi kommer att göra i fortsättningen. Sönderfallshastigheten skall alltså vara proportionell mot $u(t)$, och vi har då kommit fram till vår differentialekvation för radioaktivt sönderfall:

$$-u'(t) = cu(t).$$

Konstanten c anger hur snabbt sönderfallet sker. Ju större konstant c , desto snabbare sker sönderfallet. För att bestämma värdet på konstanten c måste vi utföra ett experiment och mäta hur snabbt sönderfallet sker, men låt oss för enkelhets skull anta att denna konstant har värdet $c = 1$. För att vi utifrån vår modell skall kunna beräkna sönderfallet av den radioaktiva isotopen, måste vi också veta hur mycket som finns från början, vid tiden $t = 0$. Låt oss anta att denna mängd ges av $u(0) = 1$. Detta kallas för ett *begynnelsevillkor*. Med $c = 1$ och begynnelsevillkoret $u(0) = 1$ får vi då slutligen differentialekvationen

$$\begin{cases} u'(t) &= -u(t) \\ u(0) &= 1 \end{cases} \quad (1)$$

som en modell för radioaktivt sönderfall.

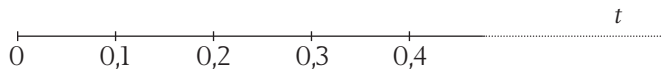
En enkel metod

Hur löser man då en differentialekvation? I några enstaka fall, som till exempel vår modell för radioaktivt sönderfall, kan man faktiskt ”lösa” differentialekvationer med papper och penna, men i allmänhet behöver man en dator. För vår differentialekvation (1) ges lösningen av funktionen

$$u(t) = \exp(-t).$$

Funktionen $\exp(-t)$ kallas för en *exponentialfunktion* och skrivs ibland e^{-t} . Vi skulle då kunna hävda att vi har löst differentialekvationen, eftersom vi har hittat lösningen $u(t) = \exp(-t)$. Men vad är $\exp(-t)$ för något? Ja, ett sätt att definiera $\exp(-t)$ är följande: *Funktionen $\exp(-t)$ ges av lösningen $u(t)$ till differentialekvationen (1).* Har vi då verkligen löst differentialekvationen? Vi har ju fortfarande inte hittat lösningen (även om vi har gett den ett namn). För att beräkna lösningen måste vi alltså även i detta enkla fall ta datorn till hjälp!

Hur löser man då en differentialekvation med hjälp av datorn? Principen är väldigt enkel. Beräkningsområdet, som anges av begränsningar i tid och rum, delas upp i små, små delar. I vårt fall delar vi in tiden i små tidsintervall. Antag att vi vill beräkna hur mycket som finns kvar av den radioaktiva isotopen vid tiden $t = 2$. Vi delar då upp tidsintervallet från tiden $t = 0$ till tiden $t = 2$ i exempelvis 20 delar, vardera av längden $k = 0,1$



Figur 2. En uppdelning av intervallet $[0,2]$ i delintervall av längden $k = 0,1$.

Vi använder nu denna uppdelning för att beräkna värdet av lösningen $u(t)$ vid tidpunkterna $t_0 = 0$, $t_1 = 0,1$, $t_2 = 0,2$ osv fram till $t_{20} = 2$. Vid tiden $t_0 = 0$ vet vi att lösningen $u(t)$ har värdet $u(0) = 1$ eftersom detta bestäms av begynnelsevillkoret, men vilket värde har lösningen i nästa tidpunkt, vid tiden $t_1 = 0,1$? För att beräkna detta värde använder vi det grundläggande sambandet

$$u(t_1) - u(t_0) \approx (t_1 - t_0) \cdot u'(t_0),$$

som säger att förändringen av u ges av förändringen av t multiplicerad med derivatan. Ju större förändring av t och ju större derivata, desto större blir förändringen av u . Om vi nu flyttar över $u(t_0)$ till högerledet och skriver k istället för $(t_1 - t_0)$, kommer vi fram till följande metod för att beräkna värdet av $u(t_1)$:

$$u(t_1) \approx u(t_0) + ku'(t_0). \quad (2)$$

Denna enkla metod har fått namnet *framåt Euler*. Det finns även bakåt Euler och en uppsjö av andra metoder för lösning av differentialekvationer, men framåt Euler är den enklaste, dock inte den bästa. Låt oss då använda framåt Euler för att beräkna värdet av $u(t)$ vid tidpunkten $t_1 = 0,1$. Från vår differentialekvation (1) vet vi att derivatan vid tiden $t_0 = 0$ är

$$u'(0) = -u(0) = -1.$$

Eftersom $k = 0,1$, innebär detta enligt (2) att

$$u(t_1) \approx 1 + 0,1 \cdot (-1) = 0,9.$$

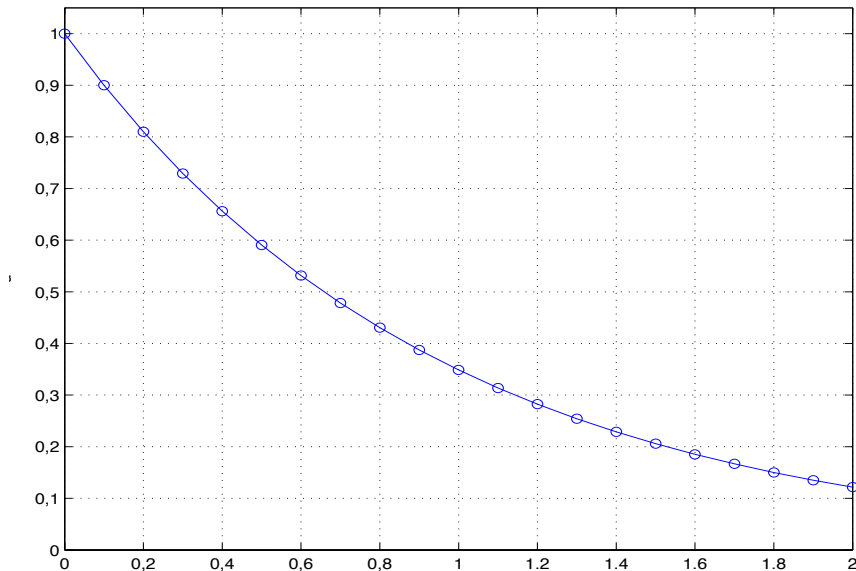
Vid tiden $t_1 = 0,1$, har alltså den kvarvarande mängden av vår radioaktiva isotop minskat från 1 till 0,9. När vi nu vet $u(t_1)$ kan vi beräkna $u(t_2)$ enligt samma formel:

$$\begin{aligned} u(t_2) &\approx u(t_1) + ku(t_1) \\ &\approx 0,9 + 0,1 \cdot (-0,9) = 0,81. \end{aligned}$$

På samma sätt kan vi beräkna $u(t_3)$, $u(t_4)$ osv. Vi tar en miniräknare eller en dator till hjälp och får följande resultat:

t	$t_0 = 0$	$t_1 = 0,1$	$t_2 = 0,2$	$t_3 = 0,3$...	$t_{18} = 1,8$	$t_{19} = 1,9$	$t_{20} = 2$
$u(t)$	$u(t_0)=1$	$u(t_1)=0,9$	$u(t_2)=0,81$	$u(t_3)=0,729$...	$u(t_{18})=0,15009$	$u(t_{19})=0,13509$	$u(t_{20})=0,12158$

Från lösningen av differentialekvationen kan vi se att mängden av den radioaktiva isotopen vid tiden $t = 2$ har avtagit från $u(0) = 1$ till $u(2) \approx 0,12$. Vi kan också rita in värdena från vår tabell i ett koordinatsystem för att på ett enkelt sätt åskådliggöra lösningen (figur 3).



Figur 3. Den beräknade lösningen till differentialekvationen (1) på intervallet $[0,2]$.

Nära skjuter haren!

Låt oss för säkerhets skull kontrollera vår lösning. Enligt tabellen gäller alltså att $u(2) \approx 0,12158$, men är detta den riktiga lösningen till differentialekvationen? Eftersom vi råkar känna till den exakta lösningen, som ges av $u(t) = \exp(-t)$ kan vi enkelt kontrollera vår beräkning. Några enkla knapptryckningar på en miniräknare ger

$$u(2) = \exp(-2) \approx 0,13534$$

vilket inte verkar stämma med vår beräknade lösning! Detta beror på att lösningen till en differentialekvation i de allra flesta fall endast kan beräknas approximativt. Men de goda

nyheterna är att vi faktiskt kan beräkna lösningen precis så noggrant som vi behöver! För att få en mer noggrann lösning behöver vi dela in tidsintervallet i mindre delar. Om vi istället väljer ett tidssteg som är lite mindre, till exempel $k = 0,01$ istället för $k = 0,1$, och tar 200 tidssteg istället för 20, får vi lösningen

$$u(2) = \exp(-2) \approx 0,13398$$

vilket ligger närmare det rätta värdet. För att få ett ännu bättre värde kan man minska tidssteget ytterligare. Med tidssteget $k = 0,000001$, vilket innebär att vi måste ta två miljoner steg för att nå fram till sluttiden $t = 2$, blir lösningen korrekt med fem decimaler:

$$u(2) = \exp(-2) \approx 0,13534.$$

Slutsatsen är att vi visserligen inte kan beräkna lösningen till en differentialekvation exakt, men att detta inte spelar någon roll eftersom vi kan beräkna lösningen med precis den noggrannhet vi behöver. En annan slutsats är att ju högre noggrannhet vi kräver, desto mer arbete krävs (av en dator) för att beräkna lösningen. En annan god nyhet är att man med moderna beräkningsmetoder kan ange vilken noggrannhet man önskar, och sedan väljs tidsstegets storlek automatiskt för att ge den önskade noggrannheten. I dessa sammanhang talar man också om något som kallas *adaptivitet*, vilket innebär att tidsstegens storlek kan variera för att öka effektiviteten; om inte alla tidsstegen är små behöver man inte ta så många tidssteg och då går beräkningen snabbare. Visst verkar det enkelt? Det är det också. Och det beror inte på att vi valt en väldigt enkel differentialekvation. Det fina är att det är lika lätt att beräkna lösningen till en komplicerad differentialekvation som en enkel – metoden är densamma: framåt Euler, eller (oftast) någon variant av framåt Euler.

Kaos

Ett lite mer spännande problem är det världsberömda *Lorenzsystemet*, som ges av de tre kopplade differentialekvationerna

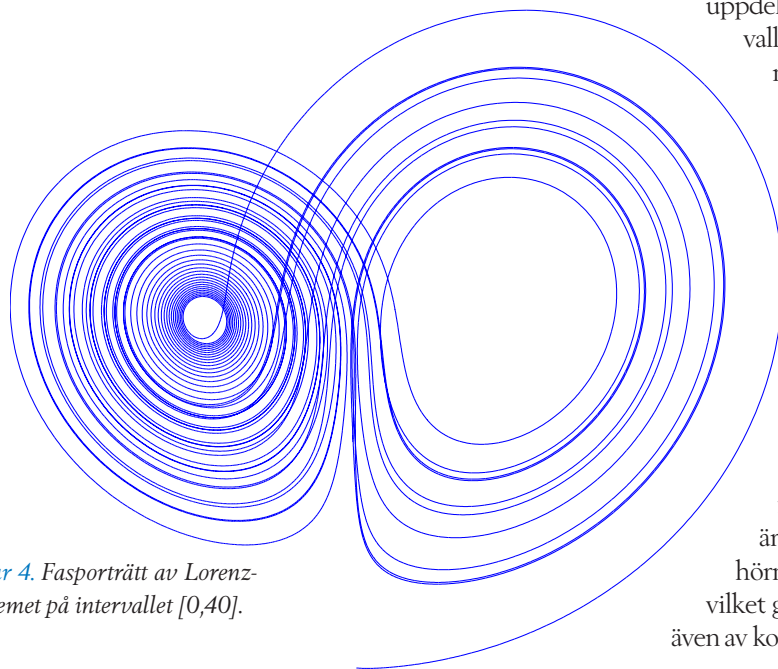
$$\begin{cases} u_1'(t) = \sigma(u_2(t) - u_1(t)) \\ u_2'(t) = ru_1(t) - u_2(t) - u_1(t)u_3(t) \\ u_3'(t) = u_1(t)u_2(t) - bu_3(t), \\ u(0) = (1, 0, 0) \end{cases} \quad (3)$$

där konstanterna σ , r och b har värdena $\sigma = 10$, $r = 28$ och $b = 8/3$. Skrivsättet $u(0) = (1, 0, 0)$ betyder att begynnelsevillkoren för de tre lösningarna (*komponenterna*) $u_1(t)$, $u_2(t)$ och $u_3(t)$ är $u_1(0) = 1$, $u_2(0) = 0$ och $u_3(0) = 0$. Lorenzsystemet består, till skillnad från den enkla differentialekvationen (1), av tre stycken olika differentialekvationer. Det tre ekvationerna är kopplade, dvs de beror av varandra och bildar tillsammans ett *system*. Lorenzsystemet uppfanns på sextioalet av Edward Lorenz som en (mycket grovt) förenklad vädermodell, men säger i denna enkla form inte mycket alls om vädret. Däremot har det en viktig egenskap gemensam med vår väderlek, nämligen den berömda *fjärilseffekten*. Fjärilseffekten säger att en pytteliten påverkan kan få mycket stora effekter på sikt: en fjärils vingslag i Malmö kan orsaka en orkan i Kiruna. (Fast riktigt så instabil är lyckligtvis inte vår väderlek.) Man brukar säga att Lorenzsystemet är *kaotiskt* och menar då att lösningarna till Lorenzsystemet kan bli lite hur som helst. Kaos! Detta bör tolkas på rätt sätt. Lösningen till Lorenzsystemet är entydigt bestämd och kan beräknas. Däremot räcker det att ändra begynnelsevillkoret ytterst lite för att få en helt annan lösning. På denna punkt skiljer sig Lorenzsystemet enormt från vår enkla differentialekvation (1). Om vi ändrar begynnelsevillkoret från $u(0) = 1$ till $u(0) = 1,01$ i (1) blir lösningen ungefär densamma, men om vi ändrar begynnelsevillkoret i Lorenzsystemet lika mycket går det inte att känna igen lösningen. Ur beräkningssynpunkt innebär detta att lösningarna till Lorenzsystemet är svårberäknade; det krävs mycket datorkraft för att beräkna lösningen med hög noggrannhet. Figur 4 nedan visar lösningen till

Lorenzsystemet på tidsintervallet $[0,40]$. Lösningen ges av de tre kurvorna $u_1(t)$, $u_2(t)$ och $u_3(t)$. Om man ritar dessa i ett tredimensionellt koordinatsystem får man ett så kallat *fasporträtt* av Lorenzsystemet.

1D, 2D, 3D!

Både vår enkla differentialekvation för radioaktivt sönderfall och Lorenzsystemet beror endast av tiden t , medan Schrödingerekvationen också beror på rumskoordinaten x . Förutom att göra en



Figur 4. Fasporträtt av Lorenzsystemet på intervallet $[0,40]$.

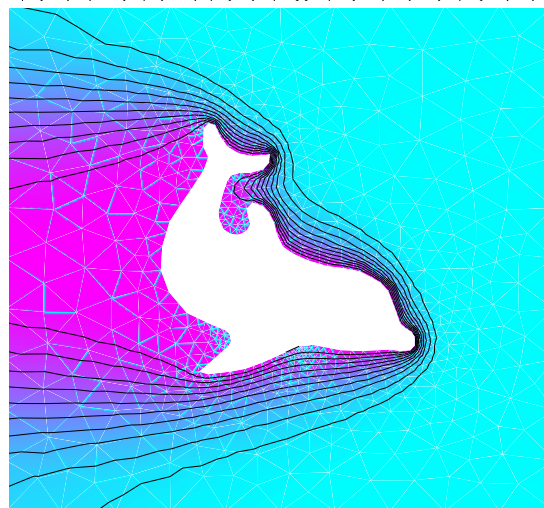
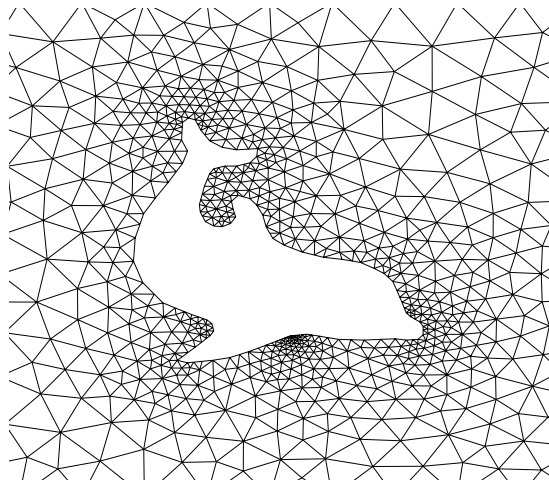
uppdelning av tiden i små delar (intervall), måste man då göra en uppdelning av rummet i små delar. Om problemet bara har en rumsdimension kan vi göra på samma sätt som när vi delar upp tiden och alltså stycka rummet i små intervall. Men hur delar vi upp ett tvådimensionellt område i små delar, eller för den delen ett tredimensionellt? En metod som visar sig fungera bra i två dimensioner är att dela upp området i *trianglar*, som i figuren ovan till höger. Triangeln är den enklaste polygonen (månghörningen) och är dessutom flexibel, vilket gör det lätt att göra uppdelningar även av komplicerade områden.

Beräkningsområdet runt delfinen kan användas för att beräkna temperaturen i vattnet runt delfinen. Om delfinen är varm och vattnet är kallt, kommer delfinen att värma upp det omgivande vattnet. Varmast blir det närmast delfinen, framförallt bakom delfinen. Detta åskådliggörs i figur 5 nedan till höger med färger; varmt vatten där det är rött och kallt vatten där det är blått.

I tre dimensioner delar vi upp rummet på liknande sätt, i *tetraedrar*. Tetraedern är den enklaste polyedern och är liksom triangeln flexibel nog att klara komplicerade geometrier. En tetraeder ser ut ungefär som ett juicepaket och liknar en pyramid, men har till skillnad från pyramiden fyra sidor som alla är trianglar. På nästa sida kan ni se en tetraeder som i sin tur är uppdelad i åtta mindre tetraedrar.

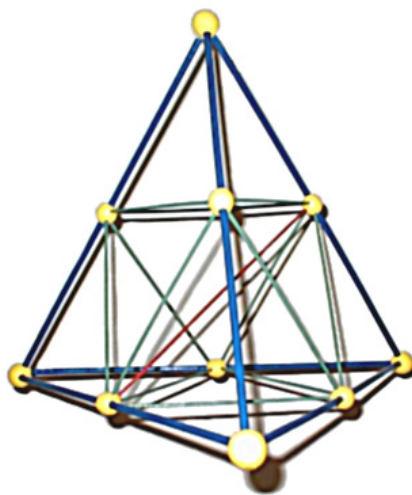
Kraftfulla datorer

I takt med utvecklingen av datorer med allt högre processorfrekvens (vilket innebär att fler beräkningssteg kan utföras inom rimlig tid) och allt mer minne (vilket innebär att vi kan utföra beräkningar på större problem), ökar möjligheten att genomföra noggranna beräkningar av lösningar till komplicerade differentialekvationer. Detta innebär att till exempel biltillverkare kan simulera krocktester i datorer, istället för att krocka bilar på riktigt (vilket är betydligt dyrare och mer tidskrävande). Klimatforskare kan simulera väderleken och med datorns hjälp studera effekten av ökade koldioxid-utsläpp, och dagligen löser meteorologerna på



Figur 5. Visualisering av beräkning av vattentemperaturen runt en delfin.

SMHI differentialekvationer för att beräkna morgondagens väder, även om det inte alltid blir rätt! För att lösa dessa riktigt tunga problem kopplar man samman flera datorer som tillsammans hjälps åt att utföra beräkningen. Ett sådant system av datorer kallas för en *paralleldator*. Olika länder och universitet slåss om att bygga den kraftfullaste paralleldatorn. Den största paralleldator som finns idag 2007 heter Blue Gene, finns i USA och består av 212992 processorer! Även om det ännu finns många problem som inte ens de kraftfullaste datorerna rår på, finns det gott hopp om att många av dessa problem skall kunna lösas i framtiden, när såväl datorer som beräkningsmetoder har utvecklats och är fantastiskt mycket bättre än de är idag.



Figur 6. En tetraeder som delas upp i flera mindre tetraedrar.

Att fundera vidare på

1. Beräkna lösningen till differentialekvationen (2) vid tiden $t=2$ med allt mindre tidssteg. Börja med $k=0,1$. Halvera sedan tidssteget till 0,05 osv. Hur stort är felet? (Jämför med den exakta lösningen $\exp(-2) \approx 0,135335283236613$.) Vad händer med felet när du halverar tidssteget?

2. Beräkna lösningen till differentialekvationen (1) med allt större tidssteg. Börja med $k=0,1$ och öka försiktigt tidssteget. Vad händer när k blir större än 1? Vad händer när k blir större än 2?

3. Försök att ta fram formeln

$$u(1) \approx \left(1 - \frac{1}{n}\right)^n$$

för lösningen till differentialekvationen (1) vid tiden $t=1$. Föreställ dig en lösning som beräknas med n stycken framåt Euler-steg som vardera är av storleken $k=1/n$ så att stegen precis når fram till $t=1$.

4. Kan du lista ut vilken differentialekvation som den denna formel löser?

$$u(t) \approx \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{tn}$$

Beräkna $u(1)$ för ett stort värde på n . Känner du igen det talet?

5. Beräkna lösningen till Lorenzsystemet (3) med framåt Euler. Experimentera med tidsstegets storlek och rita upp ett tjugigt fasporträtt.

