

Προβλήματα Αρχικών Τιμών

Έστω $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, $f: [a, b] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ μια συνάρτηση, και $y_0 \in \mathbb{R}$. Ένα τυπικό πρόβλημα αρχικών τιμών είναι:
Αναζητείται $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, τέτοια ώστε

$$\begin{aligned}y'(t) &= f(t, y(t)), & a \leq t \leq b, \\y(a) &= y_0.\end{aligned}\tag{1}$$

- ▶ f συνεχής $(t, y) \in [a, b] \times \mathbb{R}$. ($f \in C([a, b] \times \mathbb{R})$.)
- ▶ Η συνάρτηση y ορισμένη στο $[a, b]$, $y \in C^1[a, b]$, η οποία ικανοποιεί την (1) και την αρχική συνθήκη $ay(a) = y_0$, λέγεται λύση του ΠΑΤ (1).
- ▶ αν η f είναι m φορές συνεχώς παραγωγίσιμη στο $[a, b] \times \mathbb{R}$, τότε η λύση y είναι $m + 1$ συνεχώς παραγωγίσιμη στο $[a, b]$.

Χρόνος / Διακριτά χρονικά βήματα

Σκεφτόμαστε την μεταβλητή t ως χρόνο.

Οι αριθμητικοί αλγόριθμοι υπολογίζουν προσεγγίσεις σε **διακριτές χρονικές στιγμές**:

- ▶ Έστω

$$a = t^0 < t^1 < \dots < t^N = b$$

μια διάμεριση του $[a, b]$.

- ▶ Θεωρούμε τους διακριτούς χρόνους t^n .
- ▶ Αναζητούμε **προσεγγίσεις του y στους διακριτούς χρόνους t^n** :

$$y(t^i), \quad i = 0, \dots, N.$$

- ▶ Συμβολισμός: Θα λέμε

y^j την προσέγγιση του y η οποία προκύπτει από τον αριθμητικό μας αλγόρ

- ▶ Ή

$$y^j \approx y(t^i), \quad i = 0, \dots, N.$$

Η Άμεση μέθοδος του Euler

Χρησιμοποιούμε μια ομοιόμορφη διάμεριση, δηλαδή,

- ▶ $N \in \mathbb{N}$, ορίζουμε $h := (b - a)/N$ να είναι το βήμα διακριτοποίησης στο χρόνο (time step) και $t^i := a + ih, i = 0, \dots, N$.
- ▶ Τότε $t^{n+1} - t^n = h$.

Η Άμεση μέθοδος του Euler δίδει προσεγγίσεις y^1, \dots, y^N , οι οποίες ικανοποιούν

$$y^{n+1} = y^n + hf(t^n, y^n), \quad n = 0, \dots, N-1, \quad (2)$$

όπου $y^0 := y_0$ όπως στην (1). Η μέθοδος καλείται **άμεση** δεδομένου ότι το y^{n+1} μπορεί να υπολογισθεί κατευθείαν (άμεσα) ως προς το y^n , ή διαφορετικά, ο υπολογισμός του y^{n+1} δεν απαιτεί την επίλυση κάποιας εξίσωσης όπως άλλες μέθοδοι που θα δούμε στην συνέχεια.

- ▶ μέθοδος ενός βήματος
- ▶ δεδομένου του y^n η μέθοδος περιγράφει μια διαδικασία για τον υπολογισμό του y^{n+1}
- ▶ διακριτή χρονική εξέλιξη

Η Άμεση μέθοδος του Euler: Κατασκευή χρησιμοποιώντας διακριτές παραγώγους

Θεωρούμε την ΔΕ στο σημείο t^n ,

$$y'(t^n) = f(t^n, y(t^n)),$$

προσεγγίζουμε το $y'(t^n)$ από το πηλίκο διαφορών

$$\frac{1}{h} [y(t^{n+1}) - y(t^n)],$$

οπότε

$$\frac{1}{h} [y(t^{n+1}) - y(t^n)] \approx f(t^n, y(t^n)).$$

Αντικαθιστώντας τα $y(t^n)$ από τα y^m και \approx από $=$, λαμβάνουμε

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{h} = f(t^n, y^n),$$

δηλαδή την σχέση (4).

Η Άμεση μέθοδος του Euler: Κατασκευή χρησιμοποιώντας προσεγγίσεις ολοκληρωμάτων

Ολοκληρώνοντας την ΔΕ από το t^n έως το t^{n+1} , παίρνουμε

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} y'(t) dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(t, y(t)) dt,$$

δηλ.,

$$y(t^{n+1}) - y(t^n) = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(t, y(t)) dt. \quad (3)$$

Τώρα προσεγγίζουμε το ολοκλήρωμα στο δεξιό μέλος:

$$y(t^{n+1}) - y(t^n) \approx hf(t^n, y(t^n)).$$

Όπως πριν, αντικαθιστώντας τα $y(t^m)$ από τα y^m και \approx από $=$, λαμβάνουμε

$$y^{n+1} - y^n = hf(t^n, y^n),$$

δηλαδή την (4).

Τρεις βασικές μέθοδοι

- ▶ Euler (Άμεση Euler)

$$y^{n+1} = y^n + hf(t^n, y^n), \quad n = 0, \dots, N-1, \quad (4)$$

- ▶ Έμμεση Euler, (Έμμεση)

$$y^{n+1} = y^n + hf(t^{n+1}, y^{n+1}), \quad n = 0, \dots, N-1, \quad (5)$$

- ▶ Μέθοδος του Τραπεζίου (Έμμεση)

$$y^{n+1} = y^n + \frac{h}{2} [f(t^n, y^n) + f(t^{n+1}, y^{n+1})], \quad n = 0, \dots, N-1. \quad (6)$$

Υψηλής τάξης μονο-βηματικές μέθοδοι

Οι μέθοδοι Runge–Kutta (RK) είναι *μονο-βηματικές μέθοδοι*, Δηλαδή, μέθοδοι στις οποίες ο υπολογισμός της προσέγγισης y^{n+1} χρησιμοποιεί την προσέγγιση στο προηγούμενο βήμα y^n .

Βασικές αρχές:

- ▶ προσεγγίσεις ενδιάμεσων σημείων του $[t^n, t^{n+1}]$
- ▶ κανόνες ολοκλήρωσης υψηλής τάξης
- ▶ *συνδυασμός ενδιάμεσων προσεγγίσεων με τους κανόνες ολοκλήρωσης υψηλής τάξης για την κατασκευή της προσέγγισης y^{n+1} υψηλής τάξης ακρίβειας.*

Runge-Kutta: κατασκευή / βασικά συστατικά

Έστω $q \in \mathbb{N}$, $\tau_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, q$ (συνήθως $0 \leq \tau_i \leq 1$), $a_{ij} \in \mathbb{R}$, $i, j = 1, \dots, q$, και $b_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, q$. Γιά $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ προσεγγίζουμε τα ολοκληρώματα

$$\int_0^{\tau_i} \psi(s) ds$$

από αθροίσματα (κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης)

$$\sum_{j=1}^q a_{ij} \psi(\tau_j), \quad i = 1, \dots, q,$$

και το ολοκλήρωμα

$$\int_0^1 \psi(s) ds$$

από τον κανόνα

$$\sum_{j=1}^q b_j \psi(\tau_j).$$

Δηλαδή, οι συντελεστές a_{ij} , τ_i , b_i περιγράφουν $q + 1$ κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης. Σ' αυτούς τους κανόνες τα τ_i είναι οι *κόμβοι*, και τα b_i είναι τα *βάρη* του κανόνα ολοκλήρωσης στο $[0, 1]$, και a_{ij} , $j = 1, \dots, q$, είναι τα *βάρη* των κανόνων ολοκλήρωσης στα $[0, \tau_j]$.

Runge-Kutta: κατασκευή / βασικά συστατικά II

Κάθε τέτοιο σύνολο σταθερών περιγράφει πλήρως μια μέθοδο Runge-Kutta (RK). Γράφουμε τις σταθερές αυτές στην μορφή πίνακα *Runge-Kutta tableau* (Συμβολισμός του J. Butcher)

$$\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1q} & \tau_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2q} & \tau_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{q1} & a_{q2} & \dots & a_{qq} & \tau_q \\ \hline b_1 & b_2 & \dots & b_q & \end{array} = \frac{Q}{b^T} \Big| \tau, \quad (7)$$

με $Q = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{q,q}$, $b = (b_1, \dots, b_q)^T$ και $\tau = (\tau_1, \dots, \tau_q)^T$.

Runge-Kutta: κατασκευή / βασικές ιδέες

Έστω, $N \in \mathbb{N}$, $h := \frac{b-a}{N}$, $t^n := a + nh$, $n = 0, \dots, N$. Συμβολίζουμε με y^n , $n = 0, \dots, N$, την προσέγγιση της ακριβούς λύσης $y(t^n)$ στο t^n . Υποθέτουμε ότι η y^n , μας δίδεται και θέλουμε να κατασκευάσουμε τον αλγόριθμο ο οποίος θα υπολογίζει το y^{n+1} .

Εισάγουμε τα ενδιάμεσα σημεία

$$t^{n,i} := t^n + \tau_i h, \quad i = 1, \dots, q. \quad (8)$$

Τότε **υψηλής τάξης προσέγγιση** του $y(t^{n+1})$ μπορεί να κατασκευαστεί χρησιμοποιώντας κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης υψηλής τάξης. Ολοκληρώνοντας την ΔΕ από το t^n έως το t^{n+1} , παίρνουμε

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} y'(t) dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(t, y(t)) dt,$$

δηλαδή,

$$y(t^{n+1}) - y(t^n) = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(t, y(t)) dt. \quad (9)$$

Runge-Kutta: κατασκευή / βασικές ιδέες II

Τώρα,

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(t, y(t)) dt = h \int_0^1 f(t^n + hs, y(t^n + hs)) ds \quad (10)$$

Προσεγγίζοντας το ολοκλήρωμα στο διάστημα αναφοράς $[0, 1]$ χρησιμοποιώντας τον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης με κόμβους τ_i και βάρη b_i , $i = 1, \dots, q$, λαμβάνουμε

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(t, y(t)) dt = h \int_0^1 f(t^n + hs, y(t^n + hs)) ds \approx h \sum_{i=1}^q b_i f(t^{n,i}, y(t^{n,i}))$$

όπου

$$t^{n,i} := t^n + \tau_i h, \quad i = 1, \dots, q. \quad (11)$$

Χρειαζόμαστε προσεγγίσεις

$$y^{n,i} \approx y(t^n + \tau_i h) = y(t^{n,i}), \quad i = 1, \dots, q. \quad (12)$$

Runge-Kutta: κατασκευή / βασικές ιδέες III

Υποθέτουμε καταρχήν ότι έχουμε στην διάθεση μας προσεγγίσεις $y^{n,i} \approx y(t^n + \tau_i h) = y(t^{n,i})$. Τότε ο ορισμός της μεθόδου θα ήταν

$$y^{n+1} := y^n + h \sum_{i=1}^q b_i f(t^{n,i}, y^{n,i}). \quad (13)$$

Κατασκευή των $y^{n,i}$: Στην συνέχεια...

Runge-Kutta: κατασκευή / βασικές ιδέες IV

Κατασκευή των $y^{n,i}$: Ολοκλήρωση!

Ολοκληρώνοντας την ΔΕ $y' = f(t, y)$ από το t^n έως $t^{n,i}$, $i = 1, \dots, q$, ως προς t , έχουμε

$$y(t^{n,i}) - y(t^n) = \int_{t^n}^{t^n + \tau_i h} f(t, y(t)) dt.$$

Τώρα

$$\int_{t^n}^{t^n + \tau_i h} f(t, y(t)) dt = h \int_0^{\tau_i} f(t^n + sh, y(t^n + sh)) ds,$$

άρα

$$y(t^{n,i}) = y(t^n) + h \int_0^{\tau_i} f(t^n + sh, y(t^n + sh)) ds, \quad i = 1, \dots, q.$$

Runge-Kutta: κατασκευή / βασικές ιδέες V

Κατασκευή των $y^{n,i}$: Συνέχεια.

Προσεγγίζοντας το ολοκλήρωμα στο διάστημα αναφοράς $[0, \tau_i]$ χρησιμοποιώντας τους κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης με κόμβους τ_i και βάρη a_{ij} , λαμβάνουμε

$$\int_{t^n}^{t^n + \tau_i h} f(t, y(t)) dt = h \int_0^{\tau_i} f(t^n + sh, y(t^n + sh)) ds \approx h \sum_{j=1}^q a_{ij} f(t^{n,j}, y(t^{n,j})).$$

Τελικά, οδηγούμαστε στις προσεγγίσεις $y^{n,i}$ των τιμών $y(t^{n,i})$ οι οποίες ικανοποιούν

$$y^{n,i} = y^n + h \sum_{j=1}^q a_{ij} f(t^{n,j}, y^{n,j}), \quad i = 1, \dots, q. \quad (14)$$

Runge-Kutta: Ορισμός

Συνοψίζοντας:

Η μέθοδος RK η οποία αντιστοιχεί στον πίνακα (tableau) (7) δίδει προσεγγίσεις y^0, \dots, y^N , οι οποίες υπολογίζονται διαδοχικά από τις σχέσεις

$$\begin{aligned}y^0 &:= y_0 \\ y^{n,i} &= y^n + h \sum_{j=1}^q a_{ij} f(t^{n,j}, y^{n,j}), \quad 1 \leq i \leq q, \\ &, \quad n = 0, \dots, N-1. \\ y^{n+1} &:= y^n + h \sum_{i=1}^q b_i f(t^{n,i}, y^{n,i})\end{aligned} \tag{15}$$

Παράδειγμα I

Το RK tableau

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 1 & \end{array}$$

περιγράφει την άμεση μέθοδο Euler. Πράγματι, έχουμε

$$y^{n,1} = y^n$$

$$y^{n+1} = y^n + hf(t^n, y^{n,1}),$$

συνεπώς

$$y^{n+1} = y^n + hf(t^n, y^n).$$

Παράδειγμα II

To RK tableau

$$\frac{1}{1} \left| \frac{1}{1} \right.$$

περιγράφει την Έμμεση μέθοδο Euler. Πράγματι, έχουμε

$$y^{n,1} = y^n + hf(t^{n+1}, y^{n,1})$$

$$y^{n+1} = y^n + hf(t^{n+1}, y^{n,1}).$$

Για κατάλληλα μικρό h , η συνάρτηση $g, g(x) := y^n + hf(t^{n+1}, x)$, είναι συστολή στο \mathbb{R} και η πρώτη εξίσωση έχει μοναδική λύση $y^{n,1}$. Επειδή τα δεξιά μέλη των παραπάνω εξισώσεων ταυτίζονται, έχουμε $y^{n,1} = y^{n+1}$, συνεπώς, αντικαθιστώντας το $y^{n,1}$ στην δεύτερη σχέση από το y^{n+1} , λαμβάνουμε την Έμμεση μέθοδο Euler στην συνήθη της μορφή

$$y^{n+1} = y^n + hf(t^{n+1}, y^{n+1}).$$

Παράδειγμα III

Το RK tableau

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline 1 & \end{array}$$

περιγράφει την μέθοδο του μέσου

$$y^{n+1} = y^n + hf\left(t^n + \frac{h}{2}, \frac{1}{2}(y^n + y^{n+1})\right), \quad n = 0, \dots, N-1. \quad (16)$$

Πράγματι, έχουμε

$$y^{n,1} = y^n + \frac{h}{2} f\left(t^n + \frac{h}{2}, y^{n,1}\right)$$

$$y^{n+1} = y^n + hf\left(t^n + \frac{h}{2}, y^{n,1}\right).$$

- ▶ Για κατάλληλα μικρό h , η συνάρτηση $g, g(x) := y^n + \frac{h}{2}f\left(t^n + \frac{h}{2}, x\right)$, είναι συστολή στο \mathbb{R} και η πρώτη εξίσωση έχει μοναδική λύση και συνεπώς $y^{n,1} = \frac{1}{2}(y^n + y^{n+1})$. Αντικαθιστώντας το $y^{n,1}$ στην δεύτερη σχέση από $\frac{1}{2}(y^n + y^{n+1})$, οδηγούμαστε στην μέθοδο του μέσου (16).

Παράδειγμα IV

Το RK tableau

$$\begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \end{array}$$

περιγράφει την μέθοδο του τραπεζίου. Πράγματι, έχουμε

$$y^{n,1} = y^n$$

$$y^{n,2} = y^n + \frac{h}{2} [f(t^n, y^{n,1}) + f(t^{n+1}, y^{n,2})]$$

$$y^{n+1} = y^n + \frac{h}{2} [f(t^n, y^{n,1}) + f(t^{n+1}, y^{n,2})].$$

- ▶ Επιχειρηματολογώντας όπως πριν έχουμε $y^{n,1} = y^n$, και κατάλληλα μικρό h , $y^{n,2} = y^{n+1}$. Αντικαθιστώντας τα $y^{n,1}, y^{n,2}$ από y^n, y^{n+1} , αντίστοιχα, στην τρίτη σχέση, λαμβάνουμε την (6).

Παράδειγμα V

μπορεί να δει κανείς εύκολα ότι το RK tableau

$$\begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \hline 0 & 1 & \end{array}$$

περιγράφει την μέθοδο

$$\begin{aligned} y^{n,2} &:= y^n + \frac{h}{2} f(t^n, y^n) \\ y^{n+1} &:= y^n + hf(t^n + \frac{h}{2}, y^{n,2}), \end{aligned} \tag{17}$$

η οποία λέγεται *βελτιωμένη μέθοδος Euler* ή *άμεση μέθοδος του μέσου*.

Παράδειγμα VI

Η παρακάτω μέθοδος ανήκει στην κατηγορία των **ημι-πεπλεγμένων**, μεθόδων RK. Θεωρούμε το το RK tableau

$$\begin{array}{cc|c} \mu & 0 & \mu \\ 1 - 2\mu & \mu & 1 - \mu \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \end{array} \quad (18)$$

με $\mu \in \mathbb{R}$.

- ▶ Στην γενική περίπτωση, η τάξη της μεθόδου αυτής είναι $p = 2$. Για $\mu = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{6}$ προκύπτει η πολύ ενδιαφέρουσα μέθοδος RK (2,3) (δυσταδίων με τάξη $p = 3$) (*diagonally implicit RK method* (2,3) DIRK). Αυτή η μέθοδος είναι ημι-πεπλεγμένη με ίσα διαγώνια στοιχεία.

Παράδειγμα VII

Η μέθοδος δύο σταδίων

$$\begin{array}{cc|c} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \mu & \frac{1}{2} - \mu \\ \frac{1}{4} + \mu & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} + \mu \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}, \quad \mu = \frac{\sqrt{3}}{6}, \quad (19)$$

έχει πολύ ενδιαφέρουσες ιδιότητες. Η αντίστοιχη μέθοδος RK είναι η μόνη μέθοδος RK δύο σταδίων με τάξη ακρίβειας 4. Όλες οι άλλες μέθοδοι RK δύο σταδίων έχουν τάξη ακρίβειας το πολύ τρία. Η μέθοδος αυτή λέγεται *RK μέθοδος Gauss–Legendre δύο σταδίων*.

- ▶ Τα $\tau_i = \frac{1}{2} \pm \mu$ και $b_i = 1/2$ της (19) είναι οι κόμβοι και τα βάρη αντιστοίχα του κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss στο διάστημα $[0, 1]$ με συνάρτηση βάρους $w(x) = 1$.

Παράδειγμα VIII

Η κλασική μέθοδος *Runge–Kutta* είναι άμεση, έχει 4 στάδια και τάξη ακρίβειας 4. Περιγράφεται από το RK tableau

$$\begin{array}{cccc|c} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ \hline \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \end{array} \quad (20)$$