Προβλήματα Αρχικών Τιμών

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

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

- 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 a$y(a) = y_0$, 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
$$a = t^0 < t^1 < \cdots < t^N = b$$
μια διάμεριση του $[a, b]$.
- Θεωρούμε τους διακριτούς χρόνους t^n.
- Αναζητούμε προσεγγίσεις του y στους διακριτούς χρόνους t^n:
$$y(t^i), \quad i = 0, \ldots, N.$$
- Συμβολισμός: Θα λέμε

  y^i την προσέγγιση του y η οποία προκύπτει από τον αριθμητικό μας αλγόρ
- Ή
$$y^i \approx y(t^i), \quad i = 0, \ldots, N.$$

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

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

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,

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

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

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

οπότε

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

Αντικαθιστώντας τα $y(t^m)$ 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

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

δηλ.,

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

Τώρα προσεγγίζουμε το ολοκλήρωμα στο δεξιό μέλος:

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

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)

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

- *Έμμεση Euler*, (Έμμεση)

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

- *Μέθοδος του Τραπεζίου* (Έμμεση)

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

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 $0 \le \tau_i \le 1$), $a_{ij} \in \mathbb{R}, i, j = 1, \dots, q$, και $b_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, q$. Γιά $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 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' αυτους 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 $[0, \tau_i]$.

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)

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

με $\mathcal{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{q,q}, b = (b_1, \dots, b_q)^T$ 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

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

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

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

δηλαδή,

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

Runge-Kutta: κατασκευή / βασικές ιδέες II

Τώρα,

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

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

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

όπου

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

Χρειαζόμαστε προσεγγίσεις

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

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

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

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

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

Τώρα

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

άρα

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

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

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

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

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

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

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

Παραάδειγμα Ι

Το RK tableau

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

περιγράφει την άμεση μέθοδο Euler. Πράγματι, έχουμε

$$\begin{aligned} y^{n,1} &= y^n \\ y^{n+1} &= y^n + hf(t^n, y^{n,1}), \end{aligned}$$

συνεπώς

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

Παράδειγμα II

Το RK tableau

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

περιγράφει την Έμμεση μέθοδο Euler. Πράγματι, έχουμε

$$\begin{aligned} y^{n,1} &= y^n + hf(t^{n+1}, y^{n,1}) \\ y^{n+1} &= y^n + hf(t^{n+1}, y^{n,1}). \end{aligned}$$

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

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

Πράγματι, έχουμε

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

- Για κατάλληλα μικρό h, η συνάρτηση $g, g(x) := y^n + \frac{h}{2} f(t^n + \frac{h}{2}, x)$, 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

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

- 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

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

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

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

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) (δυο σταδίων 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

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

έχει πολύ ενδιαφέρουσες ιδιότητες. Η αντίστοιχη μέθοδος RK είναι η μόνη μέθοδος RK δύο σταδίων με τάξη ακρίβειας 4. Ολες 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) ειναι οι κόμβοι και τα βάρη αντιστοιχα 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

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