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

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

- 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
$$y^i \approx y(t^i), \quad i = 0, \ldots, N.$$

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)

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

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

Runge-Kutta: Ορισμός

Συνοψίζοντας:
Η μέθοδος RK η οποία αντιστοιχεί στον πίνακα (tableau) (2) δίδει προσεγγίσεις $y^0, \dots, y^N$, οι οποίες υπολογίζονται διαδοχικά από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} y^0 &:= y_0 \\ \left.\begin{aligned} y^{n,i} &= y^n + h \sum_{j=1}^{q} a_{ij} f(t^{n,j}, y^{n,j}),\ 1 \le i \le q, \\ y^{n+1} &:= y^n + h \sum_{i=1}^{q} b_i f(t^{n,i}, y^{n,i}) \end{aligned}\right. &, \quad n = 0, \dots, N-1. \end{aligned} \tag{3}$$

Παράδειγμα

Η μέθοδος δύο σταδίων

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{4} & \frac{1}{4}-\mu \quad \frac{1}{2}-\mu \\ \frac{1}{4}+\mu & \frac{1}{4} \quad \frac{1}{2}+\mu \\ \hline & \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \end{array}$$

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

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 (4) ειναι οι κόμβοι και τα βάρη αντιστοιχα του κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης του Gauss στο διάστημα $[0, 1]$ με συνάρτηση βάρους $w(x) = 1$.

Παράδειγμα

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

$$
\begin{array}{cccc|c}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\
0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\
0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\
\hline
\frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} &
\end{array}
\tag{5}
$$

Ανάλυση Μεθόδων Runge-Kutta

- Επιλυσιμότητα (οι προσεγγίσεις είναι καλώς ορισμένες)
- Ευστάθεια
- Συνέπεια
- Σύγκλιση

Επιλυσιμότητα και Ευστάθεια Μεθόδων Runge-Kutta

- Υποθέτουμε ότι η f ικανοποιεί την ΟΣ-Lipschitz

$$\big|f(t,y_1)-f(t,y_2)\big| \le L|y_1-y_2|. \tag{6}$$

Πρόταση 1

(Ύπαρξη και μοναδικότητα των προσεγγίσεων .) Υποθέτουμε ότι η (6)ικανοποιείται, και έστω $h < \frac{1}{\gamma}$, όπου

$$\gamma := L \max_{1\le i\le q} \sum_{j=1}^{q} |a_{ij}|.$$

Τότε το σύστημα (3) έχει μοναδική λύση $y^{n,1},\dots,y^{n,q}$.

Απόδειξη.

Θεωρούμε την απεικόνιση $F : \mathbb{R}^q \to \mathbb{R}^q$,

$$F_i(x) := y^n + h\sum_{j=1}^{q} a_{ij} f(t^{n,j}, x_j), \quad 1 \le i \le q,$$

με $x = (x_1, \dots, x_q)^T$ και $F(x) = \big(F_1(x), \dots, F_q(x)\big)^T$.
Προφανώς, κάθε σταθερό σημείο της F είναι λύση του συστήματος (3) και, αντίστροφα, κάθε λύση του συστήματος (3) είναι σταθερό σημείο της F. Συνεπώς, αρκεί να δείξουμε ότι, για $h < \frac{1}{\gamma}$, η F έχει ακριβώς ένα σταθερό σημείο.
Χρησιμοποιώντας την (6) έχουμε, για $x, \tilde{x} \in \mathbb{R}^q$ και $i = 1, \dots, q$,

$$\begin{aligned} \big|F_i(x) - F_i(\tilde{x})\big| &= \Big|h\sum_{j=1}^{q} a_{ij}\big[f(t^{n,j}, x_j) - f(t^{n,j}, \tilde{x}_j)\big]\Big| \\ &\le hL\sum_{j=1}^{q} |a_{ij}||x_j - \tilde{x}_j|, \end{aligned}$$

άρα

$$\big|F_i(x) - F_i(\tilde{x})\big| \le \gamma h \max_j |x_j - \tilde{x}_j|. \tag{7}$$

Απόδειξη (συνέχεια)

Συμβολίζουμε με $\|\cdot\|_\infty$ την νόρμα απείρου του $\mathbb{R}^q$. Η (7) συνεπάγεται

$$\|F(x) - F(\tilde{x})\|_\infty \leq \gamma h \|x - \tilde{x}\|_\infty. \tag{8}$$

Δεδομένου ότι έχουμε υποθέσει ότι $\gamma h < 1$, η απεικόνιση F είναι *συστολή* στο $(\mathbb{R}^q, \|\cdot\|_\infty)$, και έχει συνεπώς ακριβώς ένα σταθερό σημείο, και η απόδειξη είναι πλήρης. □

Ευστάθεια (Βασική Ευστάθεια)

Ορισμός

(Ευστάθεια Μεθόδων Runge-Kutta.) Θα λέμε ότι η μέθοδος Runge–Kutta είναι ευσταθής, αν

- *για κάθε ΠΑΤ στο οποίο η f ικανοποιεί την ΟΣ- Lipschitz*
- *και δυο ακολουθίες προσεγγίσεων $y^0, \ldots, y^N$, $z^0, \ldots, z^N$, οι οποίες παράγονται από την ίδια μέθοδο Runge Kutta αλλά, γενικά, με διαφορετικές αρχικές τιμές y^0 και z^0,*

ισχύει

$$\max_{1 \le n \le N} |y^n - z^n| \le C|y^0 - z^0|. \tag{9}$$

Οι Μέθοδοι Runge-Kutta είναι ευσταθείς

Θα δείζουμε ένα πιο γενικό αποτέλεσμα το οποίο θα χρησιμοποιηθεί και στην απόδειξη σύγκλισης. Υποθέτουμε ότι τα z^n ικανοποιούν τροποποιημένες εξισώσεις της μορφής: Για δεδομένο $z^0 \in \mathbb{R}$, τα z^n ικανοποιούν

$$\begin{aligned} z^{n,i} &= z^n + h\sum_{j=1}^{q} a_{ij} f(t^{n,j}, z^{n,j}), \qquad i = 1, \ldots, q, \\ z^{n+1} &= z^n + h\sum_{i=1}^{q} b_i f(t^{n,i}, z^{n,i}) + \rho^n, \qquad \rho^n \text{ δεδομένοι αριθμοί.} \end{aligned} \tag{10}$$

Πρόταση 2

- Υποθέτουμε ότι η f ικανοποιεί την ΟΣ- Lipschitz.
- Έστω $y^0, \ldots, y^N$, οι προσεγγίσεις που παράγονται από την μέθοδο RK και τα $z^0, \ldots, z^N$, ορίζονται παραπάνω

Τότε, υπάρχουν σταθερές C_1 και C_2, ανεξάρτητες του h, έτσι ώστε

$$\max_{1 \le n \le N} |y^n - z^n| \le C_1 |y^0 - z^0| + \frac{C_2}{h} \max_{0 \le n \le N-1} |\rho^n|. \tag{11}$$

Απόδειξη

Αφαιρώντας κατά μέλη τις σχέσεις που ορίζουν τα $y^{n,i}$ και $z^{n,i}$ και χρησιμοποιώντας την συνθήκη Lipschitz παίρνουμε, για κάθε $i = 1, \ldots, q$,

$$|y^{n,i} - z^{n,i}| \leq |y^n - z^n| + hL \sum_{j=1}^{q} |a_{ij}||y^{n,j} - z^{n,j}|,$$

συνεπώς

$$|y^{n,i} - z^{n,i}| \leq |y^n - z^n| + h\gamma \max_j |y^{n,j} - z^{n,j}|.$$

Άρα,

$$\max_i |y^{n,i} - z^{n,i}| \leq |y^n - z^n| + h\gamma \max_j |y^{n,j} - z^{n,j}|.$$

Δεδομένου ότι έχουμε υποθέσει $\gamma h < 1$, η τελευταία σχέση δίνει

$$|y^{n,i} - z^{n,i}| \leq \frac{1}{1-\gamma h}|y^n - z^n|, \quad i = 1, \ldots, q, \ \ n = 0, \ldots, N-1.$$

Συνεπώς, αν $h \leq h_0 < 1/\gamma$, υπάρχει σταθερά C, ανεξάρτητη του h, τέτοια ώστε

$$|y^{n,i} - z^{n,i}| \leq C|y^n - z^n|, \quad i = 1, \ldots, q, \ \ n = 0, \ldots, N-1. \tag{12}$$

Απόδειξη (συνέχεια)

Αφαιρώντας τις τελευταίες σχέσεις των (3) και (10), και χρησιμοποιώντας πάλι την συνθήκη Lipschitz, παίρνουμε

$$|y^{n+1} - z^{n+1}| \leq |y^n - z^n| + hL\sum_{i=1}^{q} |b_i||y^{n,i} - z^{n,i}| + |\rho^n|,$$

η οποία μαζί με την (12) δίνει, για $n = 0, \ldots, N-1$,

$$|y^{n+1} - z^{n+1}| \leq \Big(1 + hLC\sum_{i=1}^{q} |b_i|\Big)|y^n - z^n| + |\rho^n|. \tag{13}$$

Χρησιμοποιώντας το Βασικό Λήμμα Ευστάθειας (βλ slides: Stability Euler) και θέτοντας $C' := LC\sum_{i=1}^{q} |b_i|$ λαμβάνουμε

$$\max_{1\leq n\leq N} |y^n - z^n| \leq \mathrm{e}^{C'(b-a)}|y^0 - z^0| + \frac{\mathrm{e}^{C'(b-a)} - 1}{C'h} \max_{0\leq n\leq N-1} |\rho^n|, \tag{14}$$

η οποία είναι η (11). □

Βασική Ευστάθεια Μεθόδων RK

- Αν θέσουμε $\rho^n = 0$ το παραπάνω αποτέλεσμα δίδει
$$\max_{1 \le n \le N} |y^n - z^n| \le C_1 |y^0 - z^0|, \tag{15}$$
δηλαδή, υπό τις προϋποθέσεις της Πρότασης η Μέθοδος Runge-Kutta είναι ευσταθής.
- Εντελώς αντίστοιχα αποτελέσματα ισχύουν και για *συστήματα* ΣΔΕ.

Τάξη ακρίβειας μεθόδων RK

- Σφάλμα συνέπειας
- Σύγκλιση

Σφάλμα συνέπειας

Υποθέτουμε ότι η λύση της ΣΔΕ y, $y' = f(t, y)$, είναι ομαλή συνάρτηση. Ορίζουμε, για $n = 0, \dots, N-1$, το *Σφάλμα Συνέπειας* $E^n \in \mathbb{R}$ ως εξής:

$$\begin{aligned} \zeta^{n,i} &= y(t^n) + h \sum_{j=1}^{q} a_{ij} f(t^{n,j}, \zeta^{n,j}), \qquad 1 \le i \le q, \\ E^n &:= \left[y(t^n) + h \sum_{i=1}^{q} b_i f(t^{n,i}, \zeta^{n,i}) \right] - y(t^{n+1}) \end{aligned} \tag{16}$$

- Η ποσότητα E^n λέγεται *σφάλμα συνέπειας*.
- Ερμηνεία του ορισμού: Ξεκινώντας από την τιμή της ακριβούς λύσης $y(t^n)$, αντί για την προσέγγιση y^n, και εκτελώντας ένα βήμα της μεθόδου παίρνουμε στο t^{n+1} $\left[y(t^n) + h \sum_{i=1}^{q} b_i f(t^{n,i}, \zeta^{n,i}) \right]$ (βλ. (17))
- E^n είναι η διαφορά ανάμεσα σ' αυτήν την τιμή και την την τιμή της ακριβούς λύσης $y(t^{n+1})$ στο t^{n+1}.
- Οι ποσότητες $\zeta^{n,i}$, $i = 1, \dots, q$, άρα και το E^n είναι καλώς ορισμένες με βάση την Πρόταση 1.

Σφάλμα συνέπειας II

Ισοδύναμος τρόπος να γραφεί το Σφάλμα Συνέπειας

$$
\begin{aligned}
\zeta^{n,i} &= y(t^n) + h \sum_{j=1}^{q} a_{ij} f(t^{n,j}, \zeta^{n,j}), \qquad 1 \leq i \leq q, \\
\zeta^{n+1} &= y(t^n) + h \sum_{i=1}^{q} b_i f(t^{n,i}, \zeta^{n,i}) \\
E^n &= \zeta^{n+1} - y(t^{n+1})
\end{aligned} \tag{17}
$$

- Ξεκινώντας από την τιμή της ακριβούς λύσης $y(t^n)$, αντί για την προσέγγιση y^n, και εκτελώντας ένα βήμα της μεθόδου παίρνουμε στο χρονικό βήμα t^{n+1}, το ζ^{n+1}. Αυτή η ποσότητα είναι το αποτέλεσμα της εφαρμογής του αλγορίθμου (output) της μεθόδου RK με είσοδο (input) $y(t^n)$.
- το E^n μετρά την "απόσταση" αυτού του αποτελέσματος (output: ζ^{n+1}) από την ακριβή τιμή $y(t^{n+1})$
- το E^n ικανοποιεί

$$
y(t^{n+1}) = y(t^n) + h \sum_{i=1}^{q} b_i f(t^{n,i}, \zeta^{n,i}) - E^n
$$

Τάξη ακρίβειας μεθόδων Runge–Kutta

Λέμε ότι η *τάξη ακρίβειας* της μεθόδου Runge–Kutta είναι p, αν p είναι ο μεγαλύτερος ακέραιος για τον οποίο υπάρχει σταθερά $\widetilde{C}$, ανεξάρτητη του h και του N, (η οποία εξαρτάται όμως από τα δεδομένα του προβλήματος και τις παραμέτρους της μεθόδου RK) έτσι ώστε

$$\max_{0 \leq n \leq N-1} |E^n| \leq \widetilde{C} h^{p+1}. \tag{18}$$

- Σημειώστε ότι απαιτείται να ισχύει η (18) για *κάθε* ΠΑΤ με αρκετά ομαλές συναρτήσεις f και y.

Σύγκλιση

Θεώρημα

Υποθέτουμε ότι η ΟΣ-Lipschitz ικανοποιείται και το ΠΑΤ έχει μια αρκετά ομαλή λύση. Θέτουμε $\gamma := L \max_{1\leq i\leq q} \sum_{j=1}^{q} |a_{ij}|$, *και έστω ότι το* $h_0 > 0$ *ικανοποιεί*

$$\gamma h_0 < 1, \qquad 0 < h \leq h_0.$$

Αν η μέθοδος RK ικανοποιεί την εκτίμηση συνέπειας (18)*, τότε έχουμε*

$$\max_{0\leq n\leq N} \left| y(t^n) - y^n \right| \leq \frac{\widetilde{C}}{C'} \left[\mathrm{e}^{C'(b-a)} - 1 \right] h^p, \tag{19}$$

όπου οι σταθερές $\widetilde{C}$ *και* C, C', *είναι ανεξάρτητες του* h *(οι* C', $\widetilde{C}$ *έχουν οριστεί παραπάνω.)*

Σύγκλιση II

Απόδειξη. Από τον ορισμό του σφάλματος συνέπειας,

$$\zeta^{n,i} = y(t^n) + h\sum_{j=1}^{q} a_{ij} f(t^{n,j}, \zeta^{n,j}), \qquad\qquad 1 \leq i \leq q,$$

$$y(t^{n+1}) = \left[y(t^n) + h\sum_{i=1}^{q} b_i f(t^{n,i}, \zeta^{n,i}) \right] - E^n.$$

Σύμφωνα με το αποτέλεσμα ευστάθειας (Πρόταση 2), χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι $y^0 = y_0 = y(t^0)$,, προκύπτει ότι,

$$\max_{0\leq n\leq N} |y(t^n) - y^n| \leq C_2 h^{-1} \max_{0\leq n\leq N-1} |E^n|,$$

Εφαρμόζοντας την (18) προκύπτει το επιθυμητό αποτέλεσμα.