

6. Αριθμητική επίλυση συνήθων διαφορικών

Η συμπεριφορά πολλών φυσικών συστημάτων περιγράφεται από συνήθεις διαφορικές εξισώσεις ή από συστήματα συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Παραδείγματα τέτοιων συστημάτων είναι ο αρμονικός ταλαντωτής, η εξίσωση Bessel η οποία προκύπτει σε προβλήματα με κυλινδρική συμμετρία στην μεταφορά θερμότητας και στον ηλεκτρομαγνητισμό, η εξίσωση Blasius η λύση της οποίας δίνει την κατανομή ταχυτήτων για το οριακό στρώμα χωρίς κλίση πίεσης (zero pressure gradient boundary layer flow) σε ασυμπίεστη και συμπιεστή ροή, οι εξισώσεις ευστάθειας στρωτής ροής (Ohr-Summerfield equation) κ.λ.π. Πολλές συνήθεις διαφορικές (ΣΔ) εξισώσεις, κυρίως οι γραμμικές, είναι δυνατόν να λυθούν με αναλυτικές τεχνικές. Υπάρχει όμως μεγάλο πλήθος συνήθων διαφορικών εξισώσεων, ιδιαίτερα μη γραμμικών, των οποίων η αναλυτική λύση είναι ιδιαίτερα δύσκολη και συχνά αδύνατη. Η επίλυση αυτών των διαφορικών εξισώσεων μπορεί να επιτευχθεί με μεγάλη ακρίβεια με αριθμητικές μεθόδους.

Επί πλέον, σχεδόν όλες οι διαφορικές με μερικές παραγώγους (ΔΜΠ) ή συστήματα ΔΜΠ που ταυτόχρονα περιέχουν χρονικές και χωρικές μεταβολές όπως είναι οι εξισώσεις ασταθούς ροής, συμπιεστής ή ασυμπίεστης, οι εξισώσεις Maxwell και οι εξισώσεις ελαστικότητας μπορεί να επιλυθούν (ολοκληρώνονται) αριθμητικά ως προς τον χρόνο με τις ίδιες μεθόδους που χρησιμοποιούνται για την αριθμητική επίλυση των συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Πρέπει να σημειωθεί, ότι η αριθμητική ολοκλήρωση στον χρόνο με ρητά σχήματα (explicit time advancement) αυτών των ΔΜΠ επιτελείται σχεδόν αποκλειστικά με τις ίδιες μεθόδους που θα αναπτύξουμε σ' αυτό το κεφάλαιο για συνήθεις διαφορικές ανεξάρτητα από την μέθοδο που χρησιμοποιείται για την χωρική διακριτοποίηση. Δηλαδή, ανεξάρτητα αν χρησιμοποιούμε πεπερασμένα στοιχεία, πεπερασμένες διαφορές ή πεπερασμένους όγκους για την χωρική διακριτοποίηση η αριθμητική ολοκλήρωση στον χρόνο επιτελείται με μεθόδους που θα αναπτύξουμε για συνήθεις διαφορικές.

Η γενική μορφή μιας n τάξης συνήθους διαφορικής εξίσωσης ως προς την άγνωστη συνάρτηση y και την ανεξάρτητη μεταβλητή x είναι:

$$F(x, y, dy/dx, d^2y/dx^2, \dots, d^n y/dx^n) = 0 \quad (6.1)$$

Η συνάρτηση $y(x)$ που είναι λύση της παραπάνω διαφορικής πρέπει να είναι n - φορές παραγωγίσιμη (να έχει n τον αριθμό καλώς ορισμένες παραγώγους). Επιπροσθέτως, για την εύρεση μιας λύσης που είναι μοναδική απαιτείται να καθορισθούν συνθήκες για τις τιμές της συνάρτησης ή των παραγώγων αυτής στα όρια του διαστήματος. Οι

επιπρόσθετες αυτές συνθήκες ονομάζονται οριακές συνθήκες. Όταν όλες οι οριακές συνθήκες προσδιορίζονται σε ένα σημείο συνήθως στην αρχή του πεδίου ορισμού. x_0 έχουμε ένα πρόβλημα αρχικών τιμών (initial – value problem), ενώ στην περίπτωση που οι οριακές συνθήκες προσδιορίζονται και στα δυο άκρα του πεδίου ορισμού έχουμε ένα πρόβλημα οριακών τιμών (boundary – value problem).

Κάθε συνήθης διαφορική n τάξης μπορεί να γραφεί σαν σύστημα πρώτης τάξης συνήθων διαφορικών όταν ορίσουμε $n-1$ νέες μεταβλητές. Θεωρούμε παραδείγματος χάριν την δεύτερης τάξης διαφορική εξίσωση του αρμονικού ταλαντωτή.

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{dy}{dx} + y = 0$$

ορίζοντας την νέα μεταβλητή $z = dy/dx$ η παραπάνω εξίσωση μετασχηματίζεται στο πρώτης τάξης σύστημα συνήθων διαφορικών

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} - z &= 0 \\ \frac{dz}{dx} + z + y &= 0 \end{aligned}$$

ή

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = 0 \quad \text{ή} \quad \frac{dq}{dx} + [A]q = 0 \quad , \quad q = [y, z]^T$$

παρόμοια η δεύτερης τάξης διαφορική εξίσωση (εξίσωση Bessel)

$$r^2 \frac{d^2 y}{dr^2} + r \frac{dy}{dr} + (r^2 - p^2)y = 0$$

μετασχηματίζεται στο σύστημα

$$\frac{dy}{dr} - z = 0$$

$$r^2 \frac{dz}{dr} + r^2 + (r^2 - p^2)y = 0$$

Προφανώς για την αριθμητική επίλυση συνήθων διαφορικών είναι αρκετό να θεωρήσουμε αριθμητικές μεθόδους για την πρώτης τάξης συνήθη διαφορική

$$f\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right) = 0$$

$$\dot{y} \tag{6.2}$$

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

Η λύση που ικανοποιεί την παραπάνω διαφορική εξίσωση και την οριακή συνθήκη βρίσκεται με αριθμητικές μεθόδους υποδιαιρώντας το πεδίο ορισμού $[a, b]$, στο οποίο αναζητούμε την αριθμητική λύση, σε πεπερασμένο αριθμό υποδιαστημάτων. Η αριθμητική τιμή της λύσης $y(x)$ προσεγγίζεται στους $n+1$ κόμβους $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ που υποδιαιρούν το πεδίο ορισμού $[a, b]$ σε n ισαπέχοντα υπο-διαστήματα μήκους ή μεγέθους βήματος $h = (b - a)/n$. Τελικά, η αριθμητική λύση της διαφορικής προσδιορίζεται από τις διακριτές τιμές y_i μόνο στους κόμβους $x_j = a + jh, j = 0, 1, \dots, n$.

Η αριθμητική επίλυση της διαφορικής πρώτης τάξης (6.2) απαιτεί την προσέγγιση της παραγώγου στους κόμβους x_j . Υποθέτοντας ότι, ακόμα και αν η αριθμητική λύση της διαφορικής εξίσωσης (6.2) μπορεί να υπολογισθεί χωρίς κανένα σφάλμα στρογγυλοποίησης, λόγω της προσέγγισης της παραγώγου θα υπάρχει κάποια διαφορά μεταξύ της υποτιθέμενης αναλυτικής λύσης της διαφορικής εξίσωσης, $y(x_j)$, και της αριθμητικής λύσης, y_j , που προσδιορίσαμε αριθμητικά. Η διαφορά αυτή ονομάζεται σφάλμα διακριτοποίησης ή σφάλμα αποκοπής και συμβολίζεται ως ε_j .

$$\varepsilon_j = y_i - y(x_j)$$

Το σφάλμα αποκοπής εξαρτάται μόνο από την μέθοδο διακριτοποίησης και είναι ανεξάρτητο από την ακρίβεια (απλή ή διπλή) των υπολογισμών, που όπως γνωρίζουμε καθορίζει το σφάλμα στρογγυλοποίησης.

Η αριθμητική επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων γίνεται με την χρήση απ' ευθείας μεθόδων πεπερασμένων διαφορών που βασίζονται σε αναπτύγματα Taylor και με την χρήση αριθμητικής ολοκλήρωσης κλειστού ή ανοικτού τύπου.

6.1 Χρήση αναπτυγμάτων Taylor

Η λύση της ΣΔ της μορφής της Εξ. (6.2) μπορεί να προσεγγισθεί αριθμητικά χρησιμοποιώντας αναπτυγμένα Taylor

$$\begin{aligned}
 y(x_0 + h) &= y(x_0) + h y'(x_0) + \frac{h^2}{2!} y''(x_0) + \dots \\
 &= y(x_0) + h f(x_0, y(x_0)) + \dots
 \end{aligned}
 \tag{6.3}$$

Η τιμή $y(x_0)$ καθορίζεται από την οριακή συνθήκη συνεπώς η συνάρτηση $f(x_0, y(x_0))$ προσδιορίζεται από την Εξ. (6.2). Η άγνωστη συνάρτηση y_j , που είναι ουσιαστικά η αριθμητική λύση της διαφορικής εξίσωσης, υπολογίζεται με προσέγγιση πρώτης τάξης ακρίβεια από την σχέση

$$y_1 = y_0 + h f(x_0, y_0)
 \tag{6.4}$$

$$y_{j+1} = y_j + h f(x_j, y_j) + 0(h^2) = y_j + h f_j + 0(h^2)$$

όπου $0(h^2)$ υποδηλώνει όρους τάξης h^2 ή και μεγαλύτερης που παραλείπονται από το ανάπτυγμα Taylor. Η επαναληπτική διαδικασία υπολογισμού της αριθμητικής λύσης της συνήθους διαφορικής με την μέθοδο της Εξ. (6.4) είναι γνωστή ως το ρητό σχήμα Euler που ουσιαστικά διακρίτοποιεί την παράγωγο dy/dx με πρώτης τάξης ακρίβειας (forward) ανάντη διαφορές $dy/dx = (y_{j+1} - y_j)/h + 0(h^2)$.

Το ανάπτυγμα Taylor της Εξ. (6.3) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να προσδιορίσουμε την λύση μιας συνήθους διαφορικής ημι-αναλυτικά αντί να χρησιμοποιήσουμε την κλασσική μέθοδο παραγόντων ολοκλήρωσης. Για την ημι-αναλυτική επίλυση οι παράγωγοι $f = \frac{df}{dx}$ υπολογίζονται με τον κανόνα αλυσίδας

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} \quad (6.5)$$

Θεωρούμε για παράδειγμα την απλή διαφορική πρώτης τάξης

$$\frac{dy}{dx} = x + y = f(x, y) \quad (6.6)$$

με αρχική συνθήκη $y(x_0) = y_0$. Οι παράγωγοι $d^n f / dx^n$ είναι

$$f'(x, y) = \frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = 1 + 1(x + y) = 1 + x + y$$

$$f''(x, y) = \frac{df'}{dx} = \frac{\partial f'}{\partial x} + \frac{\partial f'}{\partial y} \frac{dy}{dx} = 1 + 1(x + y) = 1 + x + y \quad (6.7)$$

$$f^{(n)}(x, y) = \frac{df^{(n-1)}}{dx} = \frac{\partial f^{(n-1)}}{\partial x} + \frac{\partial f^{(n-1)}}{\partial y} \frac{dy}{dx} = 1 + x + y$$

αντικαθιστώντας τις παραγώγους στο ανάπτυγμα Taylor βρίσκουμε

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + \frac{h}{1}(x_0 + y(x_0)) + \frac{h^2}{2!}(1 + x_0 + y(x_0)) + \frac{h^3}{3!}(1 + x_0 + y(x_0)) +$$

$$= -x_0 - h - 1 + (1 + x_0 + y(x_0)) + h(1 + x_0 + y(x_0)) +$$

$$\frac{h^2}{2}(1 + x_0 + y(x_0)) + \dots$$

$$= -x_0 - h - 1 + (1 + x_0 + y(x_0)) \left[1 + h + \frac{h}{2!} + \frac{h^2}{3!} + \dots \right]$$

$$= -x_0 - h - 1 + (1 + x_0 + y(x_0)) e^h \quad (6.8)$$

Η αναλυτική λύση με την χρήση παράγοντα ολοκλήρωσης e^{-x} είναι

$$y = -(x+1) + c e^x \quad (6.9)$$

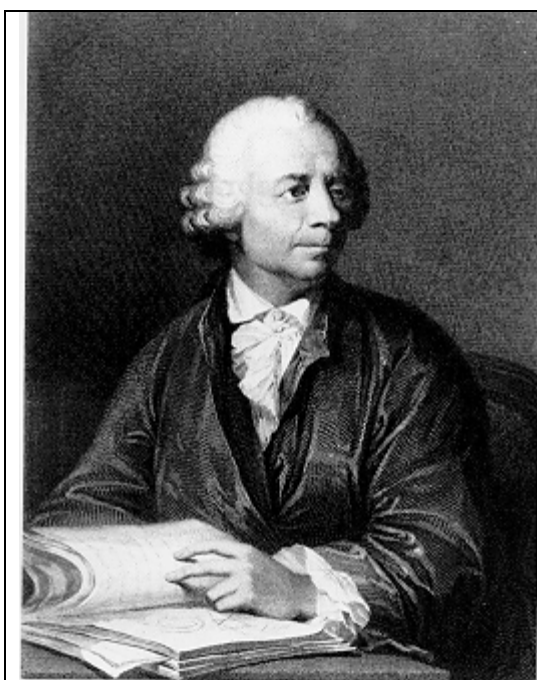
Όπου η σταθερά c υπολογίζεται από την εφαρμογή της αρχικής συνθήκης $y_0 = y(x_0)$ και η λύση του προβλήματος αρχικών τιμών είναι

$$y = -(x+1) + (1 + x_0 + y(x_0))e^{-x_0}e^x \quad (6.10)$$

το σφάλμα της ημι-αναλυτικής λύσης που υπολογίζεται με όρους που περιέχουν την $f^{(n-1)}$ παράγωγος είναι

$$\frac{i+j+y(j)}{(n+1)!} h^{n+1} \quad \xi \in (x_0, x_0 + h) \quad (6.11)$$

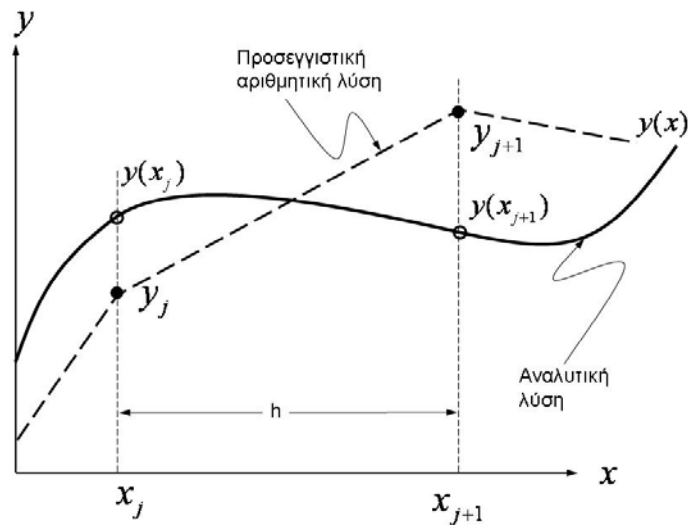
6.2 Η ρητή μέθοδος Euler



Ο Leonhard Euler (1707– 1783) είναι Ελβετός μαθηματικός και φυσικός ο οποίος έκανε σημαντικές συνεισφορές σε περιοχές όπως Calculus και θεωρία γραφημάτων, μαθηματική ανάλυση όπου και εισήγαγε την έννοια της συνάρτησης. Είναι δε γνωστός και για την δουλειά του στην Μηχανική, την Μηχανική Ρευστών, Οπτική, και Αστρονομία. Ο Euler πέρασε το μεγαλύτερο μέρος της ζωής του στη Πετρούπολη της Ρωσίας και στο Βερολίνο. Θεωρείται ένας από τους μεγαλύτερους μαθηματικούς του 18^{ου} αιώνα και όλων των εποχών. Ο μαθηματικός Pierre Laplace για να εκφράσει την συνεισφορά του Euler έγραψε “Read Euler, read Euler, he is our teacher in all things.”

Η αριθμητική λύση μιας διαφορικής εξίσωσης πρώτης τάξης με την ρητή μέθοδο Euler υλοποιείται παραλείποντας όλες τις παραγώγους ανώτερης τάξης $f'(x, y)$, $f''(x, y)$,..... στο ανάπτυγμα Taylor. Τότε η αριθμητική λύση της διαφορικής εξίσωσης είναι $y_{j+1} = y_j + h f(y_j, x_j)$ και ονομάζεται ρητή μέθοδος Euler διότι η αριθμητική λύση y_{j+1} στον

κόμβο $j+1$ υπολογίζεται με την χρήση τιμών y_j που ήδη υπολογίσθηκαν . Η ρητή μέθοδος Euler έχει την απλή γεωμετρική ερμηνεία που απεικονίζεται στο Σχ. 6.1.



Σχήμα 6.1 Γεωμετρική ερμηνεία της ρητής μεθόδου Euler για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων.

Δηλαδή ξεκινώντας από την αρχική συνθήκη η λύση υποτίθεται ότι ακολουθεί την εφαπτομένη, και με την διαδοχική εφαρμογή της μεθόδου Euler η αριθμητική λύση ακολουθεί μια πολυγωνική γραμμή με κλίσεις f_j . Η ρητή μέθοδος Euler είναι πολύ απλή στην εφαρμογή της και βασίζεται στις πρώτης τάξεις κατάντη διαφορές και αμελεί όλες τις παραγώγους στο ανάπτυγμα Taylor έχει μεγάλου μεγέθους σφάλμα αποκοπής και παρέχει αποδεκτή ακρίβεια μόνον όταν το βήμα h είναι πολύ μικρό.

Η ρητή μέθοδος Euler μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για την επίλυση ΔΜΠ με χωρικές και χρονικές παραγώγους όπου αρχικά εφαρμόζεται χωρική διακριτοποίηση με οποιαδήποτε μέθοδο (πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων όγκων κ λ π). Μετά την χωρική διακριτοποίηση η Δ Μ Π έχει την μορφή

$$\frac{dq}{dt} = R(q) \quad (6.13)$$

όπου q είναι το διάνυσμα της χωρικά διακριτοποιημένης σε κάθε κόβο ή στοιχείο μεταβλητής (π.χ. θερμοκρασίας) ή ακόμη και μεταβλητών. Η προώθηση της λύσης της ΔΜΠ στον χρόνο μπορεί να γίνει με την μέθοδο Euler. Αναφέρθηκε όμως ότι η ακρίβεια της μεθόδου Euler είναι πρώτης τάξης γι' αυτό το λόγο συνήθως χρησιμοποιούμε τις μεθόδους Runge-Kutta ή άλλες μεθόδους μεγαλύτερης τάξης ακρίβειας που θα αναπτύξουμε σε επόμενα κεφάλαια.

6.2.1 Αριθμητική ευστάθεια της ρητής μεθόδου Euler

Θεωρούμε μια συνήθη διαφορική η οποία έχει αναλυτική λύση η οποία είναι φραγμένη. Η αριθμητική λύση αυτής της διαφορικής όμως δεν αναμένεται να είναι κατά ανάγκη φραγμένη. Η αριθμητική λύση είναι φραγμένη μόνο όταν πληρούνται ορισμένες συνθήκες που εξασφαλίζουν την ευστάθεια του αριθμητικού σχήματος επίλυσης της διαφορικής. Το ρητό αριθμητικό σχήμα Euler για την επίλυση συνήθων διαφορικών πρώτης τάξης (προβλήματα αρχικών τιμών) εξαρτάται από μια μόνο παράμετρο το βήμα διαμερισμού h . Απαιτείται λοιπόν να ερευνήσουμε εάν υπάρχουν τιμές αυτής της παραμέτρου για τις οποίες η αριθμητική λύση παύει να είναι φραγμένη ή το αριθμητικό σχήμα γίνεται ασταθές. Οι αυστηροί ορισμοί ευστάθειας αριθμητικών σχημάτων είναι:

- Ευσταθή αριθμητικά σχήματα
 - Η αριθμητική λύση δεν αυξάνεται διαρκώς για οποιαδήποτε τιμή των παραμέτρων, όπως το βήμα h .
- Ασταθή αριθμητικά σχήματα
 - Η αριθμητική λύση αυξάνεται διαρκώς ανεξάρτητα από οποιαδήποτε εκλογή της τιμής των παραμέτρων του σχήματος.

Προφανώς, τα αριθμητικά σχήματα αυτής της κατηγορίας δεν έχουν πρακτική σημασία ανεξάρτητα από την τάξη ακρίβειας. Αριθμητικά σχήματα που είναι ευσταθή υπό ορισμένες συνθήκες ή υπό συνθήκη ευσταθή σχήματα (conditionally stable numerical schemes) είναι τα αριθμητικά σχήματα που για ορισμένο εύρος τιμών των παραμέτρων τους παραμένουν ευσταθή. Η ευστάθεια αριθμητικών σχημάτων καθορίζεται με την ανάλυση ευστάθειας που θα παρουσιάσουμε για την ρητή μέθοδο Euler.

Η ανάλυση ευστάθειας πραγματοποιείται θεωρώντας την απλή εξίσωση της μορφής

$$y' = f(y, x) \quad (6.14)$$

θεωρούμε το ανάπτυγμα Taylor

$$f(y, x) = f(y_0, x_0) + (x - x_0) \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{y_0, x_0} + (y - y_0) \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{y_0, x_0} + \frac{1}{2!} \left[(x - x_0)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x_0, y_0} + 2(x - x_0)(y - y_0) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \Big|_{x_0, y_0} + (y - y_0)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \Big|_{x_0, y_0} \right] + \dots \quad (6.15)$$

Θεωρούμε μόνο τους γραμμικούς όρους (δηλαδή αμελούμε τετραγωνικούς όρους όπως $(x-x_0)^2, (x-x_0)(y-y_0)$ κ.λ.π) του αναπτύγματος της Εξ. (6.15) και αντικαθιστούμε στην Εξ. (6.14) και βρίσκουμε

$$y' = A_1 + A_2 X + A_3 y + \dots \quad (6.16)$$

Το δεξί μέλος της Εξ. (6.16) είναι ουσιαστικά η γραμμικοποίηση της συνάρτησης $f(x, y)$ στην Εξ. (6.14). Η ανάλυση ευστάθειας για την ακόμη απλούστερη μορφή της Εξ. (6.16)

$$y' = A_3 y = \lambda y \quad (6.17)$$

όπου αμελούμε τους όρους A_1 και $A_2 x$ και λ είναι ένας σταθερός συντελεστής. Η απλή αυτή εξίσωση έχει αναλυτική λύση $y = ce^{\lambda x}$ όπου $\lambda = \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{y_0, x_0}$ μπορεί να είναι γενικά μιγαδικό $\lambda = \lambda_R + i\lambda_I$ και η λύση της είναι φραγμένη όταν $\lambda_R \leq 0$.

Η παραπάνω μέθοδος ανάλυσης επεκτείνεται και για συστήματα διαφορικών όπως π.χ. θεωρώντας την δεύτερης τάξης διαφορική

$$y'' + \omega^2 y = 0 \quad (6.18)$$

με γενική λύση $y = c_1 \cos(\omega x) + c_2 \sin(\omega x)$ που γράφεται ως σύστημα διαφορικών πρώτης τάξης

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \quad (6.19)$$

Οι ιδιοτιμές του μητρώου $[A]$ της εξίσωσης $\vec{q}' = Aq$ (όπου $q = [y_1 \ y_2]^T = [y' \ y]$) είναι $\lambda = \pm i\omega$. Το μητρώο $[A]$ γράφεται στην διαγώνια μορφή.

$$A = S^{-1} \Lambda S \quad (6.20)$$

όπου S είναι το μητρώο ιδιοδιανυσμάτων τότε $\vec{q}' = [S^{-1}\Lambda S] \vec{q}$, δηλαδή $S \vec{q}' = \Lambda S q$ και το σύστημα ανάγεται στις παρακάτω δυο μη συζευγμένες εξισώσεις

$$\vec{z}' = S q' = \Lambda z \quad (6.21)$$

$$z = S q = S \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

Δηλαδή η ανάλυση ευστάθειας των αριθμητικών σχημάτων διαφορικών ανώτερης τάξης ανάγεται στην ανάλυση ευστάθειας διαφορικών πρώτης τάξης διότι οι συνιστώσες της Εξ. (6.21) είναι

$$z'_1 = -i\omega z_1 \quad (6.22)$$

$$z'_2 = -i\omega z_2$$

Η πρώτης τάξης ακρίβειας μέθοδος του Euler είναι

$$y_{i+1} = y_j + h f(y_j, x_j)$$

Η οποία για και για την απλή διαφορική εξίσωση, $y' = \lambda y$, της μορφής της Εξ. (6.17) είναι

$$y_{j+1} = y_j + \lambda h y_j = (1 + \lambda h) y_j \quad (6.23)$$

Με επαναληπτική εφαρμογή της Εξ. (6.23) βρίσκουμε ότι η αριθμητική λύση στο χρονικό βήμα N είναι

$$y_N = (1 + \lambda h)^N y_0 \quad (6.24)$$

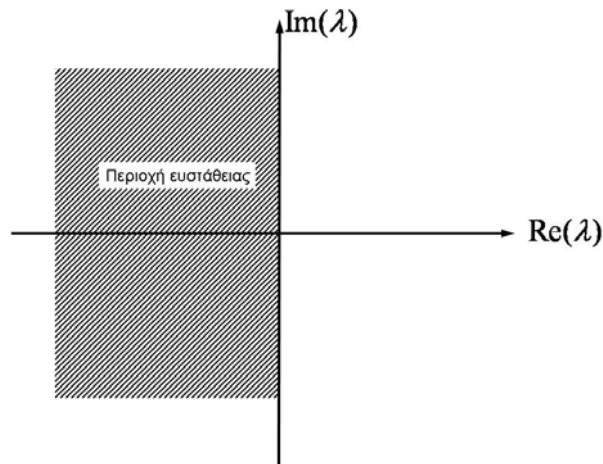
και επειδή υποθέσαμε ότι το λ είναι γενικά μιγαδικός αριθμός έχουμε

$$y_N = (1 + \lambda_r h + i\lambda_i h)^N y_0 = \sigma^N y_0 \quad (6.25)$$

όπου ο παράγοντας $\sigma = (1 + \lambda_r h + i\lambda_i h)$ ονομάζεται παράγοντας ενίσχυσης. Προφανώς η αριθμητική λύση είναι ευσταθής όταν ικανοποιείται η συνθήκη

$$|\sigma| \leq 1 \quad (6.26)$$

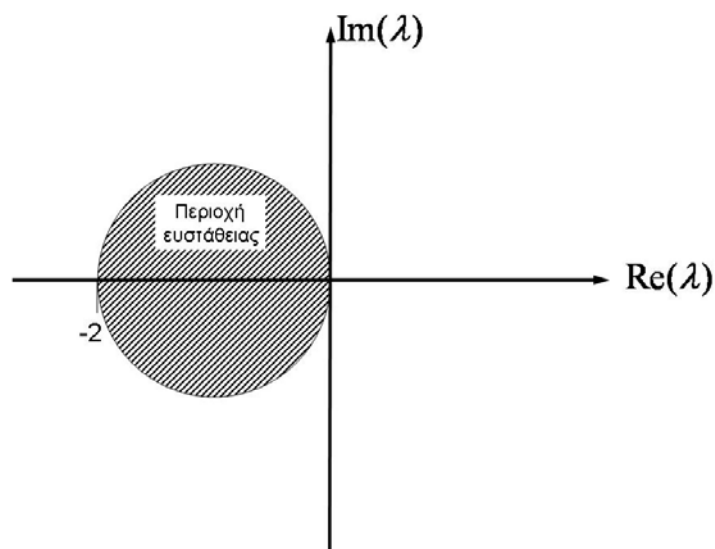
Η ακριβής λύση είναι όμως φραγμένη και φθίνουσα όταν $\lambda_R \leq 0$. Δηλαδή η περιοχή ευστάθειας της ακριβούς λύσης είναι το αριστερό τμήμα του μιγαδικού επιπέδου που αναπαρίσταται γραφικά στο Σχ. 6.2



Σχήμα 6.2 Διάγραμμα ευστάθειας για την ακριβή λύση στο μιγαδικό επίπεδο (λ_R, λ_I).

Αντίθετα η περιοχή ευστάθειας του αριθμητικού σχήματος Euler για την αριθμητική επίλυση (δες Σχ. 6.3) είναι μόνο η περιοχή $|\sigma| \leq 1$ δηλαδή η περιοχή μέσα στον κύκλο

$$|\sigma|^2 = (1 + \lambda_R h)^2 + \lambda_I^2 h^2 = 1 \quad (6.27)$$



Σχήμα 6.3 Διάγραμμα ευστάθειας στο μιγαδικό επίπεδο (λ_R, λ_I) για την αριθμητική λύση με την ρητή μέθοδο Euler.

Δηλαδή η μέθοδος Euler είναι ευσταθής υπό συνθήκη διότι η αριθμητική λύση δεν αυξάνει χωρίς όριο για τιμές λh έξω από το κυκλικό χωρίο που ορίζεται από την Εξ. (6.27) ενώ η αναλυτική λύση φθίνει. Στην απλούστερη περίπτωση που το λ είναι πραγματικό και αρνητικό το μέγιστο βήμα h για το οποίο εξασφαλίζεται ευστάθεια είναι

$$h \leq \frac{2}{|\lambda|} \quad (6.28)$$

Π.χ. ευστάθεια για την αριθμητική λύσης της διαφορικής εξίσωσης $y' + 0.5y = 0$ επιτυγχάνεται μόνον όταν $h \leq 2/0.5 = 4.0$.

Η μέθοδος Euler είναι ασταθής για κάθε βήμα όταν λ είναι φανταστικό $\lambda = i\lambda_r$ διότι ο κύκλος της Εξ. (6.27) εφάπτεται στον φανταστικό άξονα. Η αριθμητική λύση για πραγματικό λ γίνεται ασταθής όταν $|1 + \lambda h| > 1$ οπότε η αριθμητική λύση παρουσιάζει ταλαντώσεις με μεταβολή του πρόσημου σε κάθε χρονικό βήμα.

6.3 Το πεπλεγμένο σχήμα Euler

Το πεπλεγμένο σχήμα Euler είναι επίσης πρώτης τάξης ακρίβειας, προκύπτει από το ανάπτυγμα Taylor και έχει την μορφή

$$y_{j+1} = y_j + h f(y_{j+1}, x_{j+1}) \quad (6.29)$$

Η παραπάνω σχέση δεν επιτρέπει την εύρεση της αριθμητικής λύσης με την απλή επαναληπτική διαδικασία του ρητού σχήματος Euler, αλλά απαιτεί την επίλυση ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων όταν η συνάρτηση f είναι γραμμική. Όταν όμως η συνάρτηση f είναι μη γραμμική η λύση του μη γραμμικού συστήματος απαιτεί την χρήση επαναληπτικών μεθόδων. Η χρήση επαναληπτικών μεθόδων που είναι δαπανηρές αποφεύγεται με γραμμικοποίηση όπως θα δείξουμε παρακάτω.

Προφανώς η αριθμητική επίλυση με το πεπλεγμένο σχήμα Euler απαιτεί μεγαλύτερη υπολογιστική προσπάθεια από ότι το ρητό σχήμα Euler. Το μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος εξισορροπείται διότι το πεπλεγμένο σχήμα Euler έχει πολύ καλύτερη αριθμητική ευστάθεια από ότι το ρητό σχήμα Euler.

Το πεπλεγμένο σχήμα Euler για την Εξ. (6.17) είναι

$$y_{j+1} = y_j + \lambda h y_{j+1}$$

ή

(6.30)

$$y_{j+1} = (1 - \lambda h)^{-1} y_j$$

Η επαναληπτική εφαρμογή του παραπάνω σχήματος δίνει την αριθμητική λύση στο βήμα N ως

$$y_N = \left[\frac{1}{(1 - \lambda h)} \right]^N y_0 = \sigma^N y_0$$
(6.31)

και όταν το λ είναι μιγαδικό ο παράγοντας ενίσχυσης σ είναι

$$\sigma = \frac{1}{(1 - \lambda_R h) - i \lambda_I h} = \frac{1}{A e^{i\theta}}$$
(6.32)

$$A = \sqrt{(1 - \lambda_R h)^2 + \lambda_I^2 h^2} \quad \theta = \tan^{-1} \frac{\lambda_I h}{1 - \lambda_R h}$$

Ευστάθεια επιτυγχάνεται όταν το μέτρο του παράγοντα ενίσχυσης είναι μικρότερο ή ίσο της μονάδας, δηλαδή

$$|\sigma| = \frac{|e^{-i\theta}|}{A} = \frac{1}{A} \leq 1$$
(6.33)

Αλλά η παραπάνω συνθήκη είναι πάντα αληθής διότι υποτίθεται ότι $\lambda_R < 0$ συνεπώς $A > 1$. Δηλαδή, το πεπλεγμένο σχήμα Euler είναι ευσταθές χωρίς καμιά συνθήκη περιορισμού για το βήμα διακριτοποίησης h που θα χρησιμοποιήσουμε για την αριθμητική επίλυση της διαφορικής εξίσωσης.

Πρέπει να σημειωθεί ότι συχνά τα ρητά σχήματα προτιμώνται διότι έχουν μικρό υπολογιστικό κόστος έστω και αν παρουσιάζουν προβλήματα ευστάθειας. Τα πεπλεγμένα σχήματα έχουν σημαντικά υψηλότερο υπολογιστικό κόστος ανά βήμα και προτιμώνται για την αριθμητική λύση διαφορικών με όρους πηγής (stiff source terms). Η χρήση πεπλεγμένων σχημάτων για μη γραμμικής διαφορικές όπου συχνά παρατηρείται μη γραμμική αριθμητική αστάθεια η οποία είναι δύσκολο να προβλεφθεί δεν είναι εύκολη και απαιτεί γραμμικοποίηση ή λύση επαναληπτικών μεθόδων.

6.3 Ρητά μονοβηματικά σχήματα με μεγαλύτερη τάξη ακρίβειας

Το ρητό σχήμα Euler είναι η απλούστερη ρητή μονοβηματική μέθοδος επίλυσης συνήθων διαφορικών. Οι μέθοδοι Runge-Kutta που θα εξετάσουμε παρακάτω είναι επίσης ρητά αλλά πολυβηματικά σχήματα για συνήθεις διαφορικές και έχουν μεγαλύτερη από πρώτη τάξη ακρίβειας ανάλογα του αριθμού των βημάτων. Εκτός από την μέθοδο Euler υπάρχουν όμως και άλλες μονοβηματικές μέθοδοι με ακρίβεια μεγαλύτερη από πρώτης τάξης. Οι μέθοδοι αυτοί όμως εμπλέκουν περισσότερα από δυο σημεία και για τα αρχικά στάδια απαιτούν την χρήση της μεθόδου Euler όπως θα δούμε παρακάτω.

Το πιο απλό μονοβηματικό σχήμα για την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης $u' = f(x, y)$ με δεύτερης τάξης ακρίβειας είναι η μέθοδος Adams-Bashforth (AB2)

$$y_{j+1} = y_j + h \left(\frac{3}{2} f(x_j, y_j) - \frac{1}{2} f(x_{j-1}, y_{j-1}) \right) \quad (6.34)$$

Η μέθοδος Adams- Bashforth δεύτερης τάξης ακρίβειας (AB2) απαιτεί έναρξη για το βήμα $j=1$ με την μέθοδο Euler ως εξής

$$y_0 = \text{οριακή συνθήκη}$$

$$j=0 \quad y_1 = y_0 + h f(x_0, y_0)$$

$$j=1 \quad y_2 = y_1 + h \left[\frac{3}{2} f(y_1, x_1) - \frac{1}{2} f(y_0, x_0) \right]$$

Η ευστάθεια του σχήματος AB2 μπορεί να εξετασθεί ουσιαστικά με τον ίδιο τρόπο που εξετάσαμε την ευστάθεια του ρητού σχήματος Euler . Δηλαδή για το πρόβλημα $y' = \lambda y (\lambda \leq 0)$

$$y_{j+1} = y_j + h\lambda \left(\frac{3}{2} y_j - \frac{1}{2} y_{j-1} \right)$$

$$= y_j (1 + \frac{3}{2} h\lambda) - \frac{\lambda h}{2} y_{j-1}$$

ή

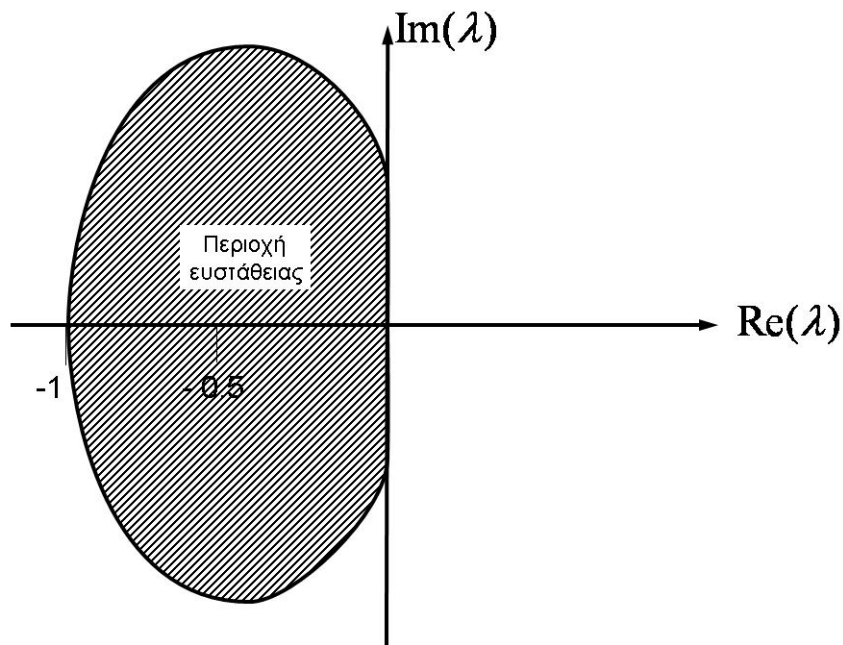
$$y_{j+1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 + 3/2 \lambda h \\ -h\lambda/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{j-1} \\ y_j \end{bmatrix} = S_2 \begin{bmatrix} y_{j-1} \\ y_j \end{bmatrix}$$

και η ευστάθεια καθορίζεται από τις ιδιοτιμές του μητρώου S_2 που προσδιορίζουν την περιοχή ευστάθειας στο διάγραμμα $h \lambda_R, h \lambda_I$. Η μέθοδος Euler για $\lambda = \lambda_R$ βρέθηκε ευσταθής για $h < 2/\lambda$ ενώ η μέθοδος AB2 είναι ευσταθής για $h < 1/\lambda$, δηλαδή είναι ακόμη πιο ασταθής από την μέθοδο Euler.

Η ακρίβεια της μονοβηματικής μεθόδου μπορεί να αυξηθεί σε τρίτη τάξη με την μέθοδο AB3 με περεταίρω μείωση της περιοχής ευστάθειας. Η τρίτης τάξης ακρίβειας Adams- Bashforth μέθοδος είναι

$$y_{j+1} = y_j + h \left[\frac{23}{12} f(x_j, y_j) - \frac{16}{12} f(x_{j-1}, y_{j-1}) + \frac{5}{12} f(x_{j-2}, y_{j-2}) \right] \quad (6.35)$$

Η περιοχή ευστάθειας των μεθόδων AB2 φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 6.3 Διάγραμμα ευστάθειας στο μιγαδικό επίπεδο (λ_R, λ_I) για την αριθμητική λύση με την μέθοδο AB2

Προφανώς η μέθοδος Adams-Bashforth τρίτης τάξης ακρίβειας AB3 της Εξ. (6.35) απαιτεί δυο αρχικά βήματα για $j = 0$ με την μέθοδο Euler και για $j = 1$ με την μέθοδο AB2.

Τα πεπλεγμένα σχήματα της οικογένειας Adams είναι γνωστές και ως μέθοδοι Adams – Moulton και είναι

$$1^{\text{ης}} \text{ τάξης} \quad y_{j+1} = y_j + h f(y_{j+1}) \quad \text{πεπλεγμένο Euler}$$

$$2^{\text{ης}} \text{ τάξης} \quad y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} [f(y_{j+1}) + f(y_j)] \quad \text{Crank - Nickolson}$$

$$3^{\text{ης}} \text{ τάξης} \quad y_{j+1} = y_j + \frac{h}{12} [5f(y_{j+1}) + Bf(y_j) - f(y_{j-1})] \quad \text{Adams - Mauton}$$

(6.36)

Τα πεπλεγμένα σχήματα Euler πρώτης τάξης ακρίβειας το σχήμα Crank-Nickolson δεύτερης τάξης ακρίβειας και η μέθοδος Adams-Moulton (AM3) τρίτης τάξης ακρίβειας απαιτούν την επίλυση γραμμικών συστημάτων όταν η συνάρτηση $f(x, y)$ είναι γραμμική. Επί πλέον, το σχήμα τρίτης τάξης ακρίβειας AM3 απαιτεί αποθήκευση στην μνήμη δυο τιμών της συνάρτησης y_i και y_{j-1} για να υπολογίσουμε τις συναρτήσεις $f(y_j)$ και $f(y_{j-1})$.

Η μέθοδος Crank -Nickolson είναι γνωστή και ως κανόνας τραπεζίου και χρησιμοποιείται συχνά για την αριθμητική επίλυση συστημάτων συνήθως διαφορικών που είναι μη γραμμικά. Στο επόμενο κεφάλαιο εξετάζουμε πιο αναλυτικά την μέθοδο του κανόνα τραπεζίου.

6.4 Κανόνας τραπεζίου

Η λύση της εξίσωσης $y' = f(y, x)$ με αρχική συνθήκη $y(x_0) = y_0$ είναι

$$y(x) = y_0 + \int_{x_1}^x f(y, \xi) d\xi \quad (6.37)$$

Δηλαδή η λύση y_{j+1} είναι

$$y_{j+1} = y_j + \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(y, \xi) d\xi \quad (6.38)$$

προσεγγίζοντας το ολοκλήρωμα με τον κανόνα του τραπεζίου βρίσκουμε

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} [f(y_{j+1}, x_{j+1}) + f(y_j, x_j)] \quad (6.39)$$

Η ευστάθεια της μεθόδου του κανόνα του τραπεζίου εξετάζεται για την εξίσωση $y' = \lambda y$ ($\lambda < 0$), δηλαδή

$$y_{j+1} - y_j = \frac{h}{2} [\lambda y_{j+1} + \lambda y_j] \quad (6.40)$$

$$y_{j+1} = \left(\frac{1 + \lambda h/2}{1 - \lambda h/2} \right) y_j = \sigma y_j$$

Ο παράγοντας ενίσχυσης μπορεί να γραφεί υπό μορφή αναπτύγματος ως εξής

$$\sigma = \frac{1 + \frac{\lambda h}{2}}{1 - \frac{\lambda h}{2}} = 1 + \lambda h + \frac{h^2 \lambda^2}{4} + \dots$$

Δηλαδή η μέθοδος είναι δεύτερης τάξης ακρίβειας όπως αναμένεται επειδή το ολοκλήρωμα υπολογίσθηκε με μια δεύτερης τάξης προσέγγιση. Αντικαθιστώντας $\lambda = \lambda_R + i\lambda_I$ στην Εξ. (6.40) βρίσκουμε

$$\sigma = \frac{1 + \frac{\lambda_R h}{2} + i \frac{\lambda_I h}{2}}{1 - \frac{\lambda_R h}{2} - i \frac{\lambda_I h}{2}} = \frac{A}{B} e^{i(a-\beta)} \quad (6.41)$$

όπου

$$A = \sqrt{\left(1 + \frac{h\lambda_R}{2}\right)^2 + \frac{(h\lambda_I)^2}{4}}, \quad B = \sqrt{\left(1 - \frac{h\lambda_R}{2}\right)^2 + \frac{(h\lambda_I)^2}{4}}$$

Εξετάζουμε όμως μόνο τιμές $\lambda_R < 0$ συνεπώς πάντοτε ισχύει ότι $A < B$ δηλαδή

$$|\sigma| = \frac{A}{B} < 1$$

Η ακρίβεια της μεθόδου του κανόνα τραπεζίου μπορεί να πιστοποιηθεί εξετάζοντας την συμπεριφορά της αριθμητικής λύσης στην οριακή

περίπτωση $\lambda_I = i\omega$, $\lambda R = 0$ οπότε $A = B = \sqrt{1 + \frac{h^2 \lambda_I^2}{4}}$ και

$$\sigma = e^{2i\theta}, \quad \theta = \tan^{-1}\left(\frac{\omega h}{2}\right)$$

Το σφάλμα φάσης (phase error) PE, είναι

$$PE_T = \omega h - 2 \tan^{-1} \frac{\omega h}{2} = \omega h - 2 \left[\frac{\omega h}{2} - \frac{(\omega h)^3}{24} \right] = \frac{(\omega h)^3}{24}$$

Το αντίστοιχο σφάλμα φάσης της ρητής μεθόδου Euler που έχει παράγοντα ενίσχυσης

$$\sigma = 1 + i\omega h = |\sigma| = \sqrt{1 + \omega^2 h^2}$$

$$\theta = \tan^{-1} \frac{I_m(\sigma)}{\text{Re}(\sigma)} = \tan^{-1}(\omega h)$$

είναι

$$PE_E = \omega h - \theta = \omega h - \left[\omega h - \frac{(\omega h)^3}{3} + \frac{(\omega h)^5}{5} - \frac{(\omega h)^7}{7} + \frac{(\omega h)^9}{9} - \dots \right]$$

Δηλαδή ο κανόνας τραπεζίου έχει περίπου τέσσερις φορές μικρότερο σφάλμα φάσης από την μέθοδο Euler.

6.5 Γραμμικοποίηση πεπλεγμένων σχημάτων

Τα πεπλεγμένα σχήματα προσφέρουν ορισμένα πλεονεκτήματα έναντι των ρητών σχημάτων. Η κύρια δυσκολία με τα πεπλεγμένα σχήματα για μη γραμμικές διαφορικές, όπου ασφαλώς η χρήση τους είναι πιο επιβεβλημένη λόγω της καλύτερης αριθμητικής ευστάθειας, είναι η ανάγκη επίλυσης ενός μη γραμμικού συστήματος εξισώσεων σε κάθε

χρονικό βήμα. Η λύση αυτού του συστήματος μπορεί να γίνει με την επαναληπτική μέθοδο Newton –Raphson η οποία μπορεί να είναι πολύ δαπανηρή υπολογιστικά ιδιαίτερα για συστήματα εξισώσεων. Το υπολογιστικό κόστος για την αριθμητική επίλυση μη γραμμικών συνήθων διαφορικών μπορεί να μειωθεί σημαντικά με την διαδικασία της γραμμικοποίησης που περιγράφουμε παρακάτω.

Θεωρούμε την μη-γραμμική συνήθη διαφορική εξίσωση

$$y' = f(y, x) \quad (6.42)$$

την οποία έστω ότι επιλύουμε αριθμητικά με το πεπλεγμένο σχήμα του κανόνα τραπεζίου

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} [f(y_{j+1}, x_{j+1}) + f(y_j, x_j)] + O(h^3) \quad (6.43)$$

Επειδή όμως η συνάρτηση $f(x, y)$ είναι μη-γραμμική η λύση μπορεί να γίνει μόνο με επαναληπτικές μεθόδους. Η αριθμητική λύση της διαφορικής με τον κανόνα τραπεζίου είναι όμως δεύτερης τάξης ακρίβειας απαιτείται να βρούμε συνεπώς την λύση του συστήματος μη – γραμμικών εξισώσεων με ακρίβεια δεύτερης τάξης $O(h)^3$ και όχι μεγαλύτερη. Η διαδικασία γραμμικοποίησης που θα παρουσιάσουμε παρακάτω επιτρέπει ουσιαστικά την επίλυση του συστήματος σε τάξη $O(h^3)$ χωρίς την εκτέλεση επαναλήψεων. Η διαδικασία γραμμικοποίησης έχει ως εξής.

Θεωρούμε το ανάπτυγμα Taylor της μη-γραμμικής συνάρτησης $f(y_{j+1}, x_{j+1})$

$$f(y_{j+1}, x_{j+1}) = f(y_j, x_{j+1}) + (y_{j+1} - y_j) \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{y_j, x_{j+1}} + \frac{1}{2} (y_{j+1} - y_j)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \Big|_{y_j, x_{j+1}} + \dots \quad (6.44)$$

Οι πρώτοι δυο όροι του αναπτύγματος της Εξ.(6.44) είναι της ίδιας τάξης ακρίβειας όπως και η μέθοδος τραπεζίου στην Εξ. (6.43) συνεπώς με αντικατάσταση βρίσκουμε

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} \left[f(y_j, x_{j+1}) + (y_{j+1} - y_j) \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{y_j, x_{j+1}} + f(y_j, x_j) \right] + O(h^3) \quad (6.45)$$

Η παραπάνω σχέση μετά από επίλυση ως προς την άγνωστη τιμή γίνεται

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} \frac{f(y_j, x_{j+1}) + f(y_j, t_j)}{1 - \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{y_j, x_{j+1}}} \quad (6.46)$$

Η παραπάνω σχέση είναι ουσιαστικά ένα ρητό σχήμα που έχει όμως δεύτερη τάξη ακρίβειας. Το σχήμα της Εξ. (6.46) είναι ευσταθές χωρίς συνθήκη σύμφωνα με την γραμμική θεωρία ευστάθειας. Επειδή όμως η συνάρτηση $f(x, y)$ είναι μη-γραμμική υπάρχει περιορισμός ευστάθειας στην πρακτική εφαρμογή.

Παράδειγμα

Θεωρούμε την μη- γραμμική συνήθη διαφορική

$$y' - (y - y^2) = 0 \quad \text{ή} \quad y' = y^2 + y$$

$$y(0) = 1$$

με ακριβή λύση $y(x) = \frac{e^x}{2 - e^x}$

η αριθμητική λύση με τον κανόνα τραπεζίου είναι

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} \left[(y_{j+1}^2 + y_{j+1}) + (y_j^2 + y_j) \right]$$

Η επίλυση της παραπάνω εξίσωση είναι απλή και δεν απαιτεί επαναληπτικές μεθόδους διότι η παραπάνω σχέση είναι ένα πολυώνυμο δεύτερου βαθμού ως προς y_{j+1} και έχει λύση

$$y_{j+1} = \frac{(2/h + 1) - \sqrt{\left(\frac{2}{h} + 1\right)^2 - 4\left(\frac{2}{h}y_j + y_j(y_j + 1)\right)}}{2}$$

Η επίλυση μετά τη γραμμικοποίηση της συνάρτησης $f(y) = y^2 + y$ είναι

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h y_j (y_j + 1)}{1 - h(y_j - 1/2)}$$

Το σφάλμα της γραμμικοποιημένης μεθόδου είναι λίγο μεγαλύτερο αλλά και οι δυο λύσεις έχουν δεύτερης τάξης ακρίβειας.

6.6 Οι μέθοδοι Runge – Kutta

Τα ρητά σχήματα AB2 και AB3 του κεφαλαίου 6.3 μεγαλύτερη τάξη ακρίβειας από το ρητό σχήμα Euler που ουσιαστικά δεν χρησιμοποιείται στις πρακτικές εφαρμογές λόγω της μικρής ακρίβειας και του μεγάλου σφάλματος φάσης. Η τάξη ακρίβειας των σχημάτων AB2 (Εξ. 6.34) και AB3 (Εξ. 6.35) αυξάνεται λαμβάνοντας υπ' όψη περισσότερους όρους στο ανάπτυγμα Taylor οι οποίοι εμπλέκουν στην τελική έκφραση μερικές παραγώγους της συνάρτησης $f(x,y)$ δηλαδή παρέχουν επιπλέον πληροφορία για την διακριτή μορφή της συνάρτησης του δεξιού μέλους. Τα σχήματα ανώτερης τάξης που δημιουργούνται με αυτή την διαδικασία δεν παρέχουν πλήρη πληροφορία για την αναλυτική μορφή της συνάρτησης $f(x,y)$ παρά μόνο αριθμητικά δεδομένα για ένα ή περισσότερα βήματα. Οι μέθοδοι Runge - Kutta που παρουσιάζουμε σ' αυτό το κεφάλαιο θα δούμε ότι παρέχουν επί πλέον πληροφορία για την συνάρτηση f επειδή ουσιαστικά εισάγουν επιπρόσθετα υπολογιστικά σημεία μεταξύ του σημείου x_j και x_{j+1} όπου και υπολογίζουν την αναλυτική μορφή της συνάρτησης $f(x,y)$. Οι επιπλέον υπολογισμοί της συνάρτησης $f(y,x)$ απαιτούν, όπως αναμένεται μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος ανά βήμα, αλλά έχουν σαν αποτέλεσμα την αύξηση της τάξης ακρίβειας και όπως θα δείξουμε παρακάτω σε αντίθεση με τα σχήματα AB2 και AB3, παρέχουν μεγαλύτερο όρο ευστάθειας από το ρητό σχήμα Euler.

Τα ρητά σχήματα Runge –Kutta (R K) απαιτούν p στάδια για την μετάβαση από το σημείο επίλυσης x_j στο σημείο επίλυσης x_{j+1} και έχουν ακρίβεια τάξης $n \leq p$ όπως θα δούμε παρακάτω. Η γενική μορφή των μεθόδων R K με p στάδια ή RK– p μεθόδων είναι

$$y_{j+1} = y_j + \sum_{i=1}^p w_i k_i \quad (6.47)$$

όπου k οι όροι K_i υπολογίζονται σε p στάδια ως

$$K_i = h f \left(y_j + \sum_{m=1}^{i-1} \beta_{im} K_m \right) \quad i = 1, \dots, p \quad (6.48)$$

και w_i, B_{im} είναι σταθεροί συντελεστές που αντιστοιχούν στο κάθε σχήμα $RK - p$ και καθορίζουν όπως θα δούμε παρακάτω όχι μόνο την τάξη ακρίβειας του σχήματος αλλά και άλλες από τις ιδιότητες αυτού.

Η μέθοδος ανάπτυξης των ρητών σχημάτων $RK - p$ παρουσιάζεται θεωρώντας το σχήμα δυο σταδίων $RK - 2$ που έχει την μορφή

$$y_{j+1} = y_j + (w_1 K_1 + w_2 K_2) \quad (6.49)$$

όπου

$$K_1 = h f(y_j, x_j) \quad (6.50)$$

$$K_2 = h f(y_j + qK_1, x_j + rh)$$

όπου w_1, w_2, p και q είναι σταθερές που θα προσδιορίσουμε έτσι ώστε να επιτυγχάνεται μέγιστη τάξη ακρίβειας, σύμφωνα με το ανάπτυγμα Taylor.

$$y_{j+1} = y_j + hy'_j + \frac{h^2}{2!} y''_j + \frac{h^3}{3!} y'''_j + \dots \quad (6.51)$$

Στο παρακάτω ανάπτυγμα

$$y'_j = f(y_j, x_j) \quad (6.52)$$

και με τον κανόνα διαδοχικής παραγωγίσης βρίσκουμε ότι

$$y'' = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{f \partial f}{\partial y} = f_x + ff_y \quad (6.53)$$

δηλαδή

$$y_{j+1} = y_j + h f(y_j, x_j) + \frac{h^2}{2!} (f_x + f f_y)_{\substack{x=x_j \\ y=y_j}} + \dots \quad (6.54)$$

Το δεύτερης τάξης ακρίβειας ανάπτυγμα Taylor του όρου K_2 είναι

$$K_2 = h \left[f(y_j, x_j) + pK_1 \frac{\partial \rho}{\partial y} \Big|_{y=y_j} + r h \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=x_j} + O(h^2) \right] \quad (6.55)$$

Με αντικατάσταση των Εξ. (6.50), (6.53) και (6.55) στην Εξ. (6.49) βρίσκουμε

$$y_{j+1} = y_j + (w_1 + w_2)h f_j + w_2 r h^2 f_j f_y \Big|_{y=y_j} + w_2 q h^2 f_x \Big|_{x=x_j} \quad (6.56)$$

Συγκρίνοντας την παραπάνω σχέση με το ανάπτυγμα Taylor της Εξ. (6.51) και εξισώνοντας τους συντελεστές των όμοιων όρων έχουμε

$$w_1 + w_2 = 1$$

$$w_2 q = 1/2 \quad (6.57)$$

$$w_2 r = 1/2$$

Το παραπάνω σύστημα τριών εξισώσεων με τέσσερις αγνώστους μπορεί να λυθεί όταν χρησιμοποιήσουμε έναν άγνωστο σαν ελεύθερη παράμετρο. Έστω ότι $q = r$ τότε

$$w_1 = 1 - \frac{1}{29} \quad , \quad w_2 = \frac{1}{29}$$

$$\eta \quad (6.58)$$

$$w_1 = 1 - w_2 \quad , \quad q = r = 1/2 w_2$$

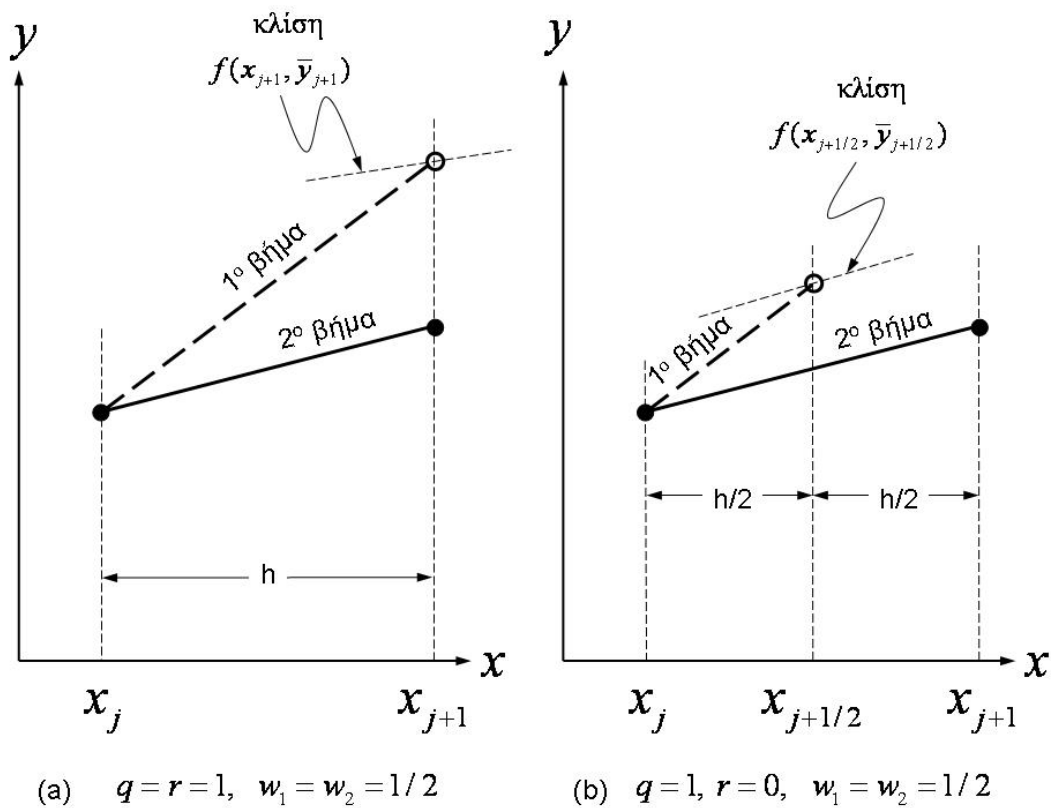
Η τιμή της ελεύθερης παραμέτρου q ή r παραμένει απροσδιόριστη και πρέπει να εκλεγεί. Η συνήθης εκλογές τιμών είναι $w_2' = 1/2$ ή $w_2'' = 1$ και όπως θα δούμε καθορίζει κάποιες από τις ιδιότητες του σχήματος $RK - 2$.

Η εκλογή της τιμής $w_1' = 1$ συνεπάγεται ίσα βάρη $w_1 = w_2 = 1/2$, $q = r = 1$ και καταλήγει στο ακόλουθο δεύτερης τάξης σχήμα Runge – Kutta

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} [f(y_j, x_j) + f(\bar{y}_{j+1}, x_{j+1})] \quad (6.59)$$

$$\bar{y}_{j+1} = y_j + h f(y_j, x_j)$$

Ο αλγόριθμος *RK* δυο βημάτων της Εξ. (6.59) είναι δεύτερης τάξης ακρίβειας, είναι γνωστός και ως βελτιωμένη ρητή μέθοδος Euler και έχει την γεωμετρική ερμηνεία που απεικονίζεται στο Σχ. 6.5 .



Σχήμα 6.5 Γεωμετρική ερμηνεία της μεθόδου Runge-Kutta.

Η μέθοδος *RK* - 2 της Εξ. (6.59) αποτελεί ουσιαστικά εφαρμογή του ρητού σχήματος Euler δυο φορές. Πρώτα υπολογίζεται μια προκαταρκτική εκτίμηση $\bar{y}_{j+1} = y_j + hf(y_j, x_j)$ της λύσης στο σημείο $j+1$. Όπου \bar{y}_{j+1} ορίζεται ως τομή της γραμμής συντεταγμένων στο σημείο $x_j + 1$ και της ευθείας γραμμής που άγεται από το σημείο (x_j, y_j) και έχει κλίση $K_1 = f(y_j, x_j)$. Η τελική λύση y_{j+1} είναι η τομή της γραμμής συντεταγμένων και της ευθείας που έχει κλίση το μέσο όρο της κλίσης στο σημείο j και την εκτίμηση της κλίσης στο σημείο $j + 1$. Δηλαδή το πρώτο βήμα μπορεί να θεωρηθεί ως βήμα πρόβλεψης ενώ το

δεύτερο βήμα είναι η διόρθωση αυτής της πρόβλεψης. Η παραπάνω ερμηνεία αποτελεί την βάση των αλγόριθμων επίλυσης συνήθων διαφορικών τύπου πρόβλεψης – διόρθωσης που θα διαπραγματευτούμε σε επόμενο κεφάλαιο.

Η εκλογή $w_2 = 1$ συνεπάγεται $w_1 = 0$ και $q = r = 1/2$ και καταλήγει στο ακόλουθο σχήμα RK-2

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + h f(\bar{y}_{j+1/2}, x_j + 1/2) \\ \bar{y}_{j+1/2} &= y_j + \frac{h}{2} f(y_j, x_j) \end{aligned} \quad (6.60)$$

που είναι γνωστό και ως τροποποιημένο ρητό σχήμα Euler. Η μέθοδος RK-2 της Εξ. (6.60) συνίσταται από διαδοχική εφαρμογή της μεθόδου Euler δυο φορές. Πρώτα υπολογίζεται μια προσέγγιση $\bar{y}_{j+1/2}$ στο ενδιάμεσο σημείο του διαστήματος $x_{j+1/2}$ και κατόπιν υπολογίζεται η συνάρτηση $f(y, x)$ στο σημείο $x_{j+1/2}$. Η τιμή της συνάρτησης $f(x_{j+1/2}, \bar{y}_{j+1/2})$ θεωρείται σαν μέση τιμή της κλίσης για τον υπολογισμό την προσεγγιστικής λύσης y_{j+1} στο σημείο x_{j+1} .

Η ανάλυση ευστάθειας της μεθόδου RK-2 της μορφής της Εξ. (6.60) που γράφεται στην γενική μορφή ως

$$\begin{aligned} K_1 &= hf(y_j, x_j) \\ K_2 &= hf(y_j + qK_1, x_j + r h) \\ y_{j+1} &= y_j + \left(1 - \frac{1}{29}\right)K_1 + \frac{1}{29}K_2 \end{aligned} \quad (6.61)$$

Πραγματοποιείται και πάλι για την απλή εξίσωση $y' = \lambda y$ οπότε έχουμε

$$\begin{aligned} K_1 &= \lambda h y_j \\ K_2 &= h(\lambda y_j + q \lambda^1 h y_j) = \lambda h(1 + q \lambda h) y_j \\ y_{j+1} &= y_j + \left(1 - \frac{1}{29}\right) \lambda h y_j + \frac{1}{29} \lambda h(1 + q \lambda h) y_j \\ &= \left(1 + \lambda h + \frac{h^2 \lambda^2}{2}\right) y_j = \sigma y_j \end{aligned}$$

Ευστάθεια επιτυγχάνεται μέσα στην περιοχή $|\sigma| \leq 1$ και το όριο ευστάθειας είναι $|\sigma|=1$. Δηλαδή οι μιγαδικές ρίζες, λh , του πολυωνύμου

$$\sigma = \left(1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2} \right) = e^{i\Theta}$$

για διάφορες τιμές του Θ . Η περιοχή ευστάθειας της μεθόδου $RK - 2$ μπορεί να απεικονισθεί στο μιγαδικό επίπεδο όπως και για τα άλλα ρητά σχήματα.

Το όριο ευστάθειας της μεθόδου $RK - 2$ στον πραγματικό άξονα είναι το ίδιο με το όριο ευστάθειας του ρητού σχήματος Euler δηλαδή $\lambda_R h \leq 2$. Η μέθοδος $RK - 2$ παρουσιάζει βελτιωμένη ευστάθεια για μιγαδικό λ , είναι όμως ασταθής για φανταστικό $\lambda = i\omega$.

Στην περίπτωση που η παράμετρος που η παράμετρος λ είναι φανταστική $\lambda = i\omega$ ο παράγοντας ενίσχυσης είναι

$$|\sigma| = \sqrt{1 + \frac{\omega^4 \lambda^4}{4}} > 1$$

και η μέθοδος είναι ασταθής (unconditionally unstable).

Το σφάλμα φάσης της μεθόδου $RK - 2$ υπολογίζεται για $\lambda = i\omega$ (έστω και εάν η μέθοδος είναι ασταθής) ως εξής

$$PE = \omega h - \tan^{-1} \left(\frac{\omega h}{1 - \frac{\omega^2 h^2}{2}} \right)$$

αλλά

$$\tan^{-1} \left(\frac{\alpha}{1 - \frac{\alpha^2}{2}} \right) = \alpha \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^4}{4} + \frac{\alpha^6}{6} + \dots \right)$$

$$- \frac{\alpha^3}{3} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^4}{4} + \dots \right)^3 + \dots$$

ή

$$\tan^{-1}\left(\frac{\omega h}{1 - \frac{\omega^2 h^2}{2}}\right) = \omega h \left(1 + \frac{\omega^2 h^2}{2} + \frac{\omega^4 h^4}{4} + \dots\right) - \frac{\omega^2 h^3}{3} \left(1 + \frac{\omega^2 h^2}{2} + \frac{\omega^4 h^4}{4}\right)^3 + \dots - \omega h + \frac{\omega^3 h^3}{6} + \dots$$

οπότε

$$PE = -\frac{\omega^3 h^3}{6} + \dots$$

Το σφάλμα φάση είναι δηλαδή σφάλμα προπορείας και μισό κατά απόλυτο τιμή από το σφάλμα φάσης της μεθόδου Euler.

Μέθοδοι Runge – Kutta ανώτερης τάξης αναπτύσσονται με την ίδια ακριβώς διαδικασία παραδείγματος χάριν η γενική μορφή της μεθόδου τριών βημάτων τρίτης τάξης ακρίβειας $RK - 3$ είναι

$$y_{j+1} = y_j + w_1 K_1 + w_2 K_2 + w_3 K_3 \quad (6.62)$$

όπου K_1 , K_2 , και K_3 είναι προσεγγίσεις της παραγώγου σε διάφορα σημεία στο διάστημα $[x_j, x_{j+1}]$ και ορίζονται σύμφωνα με την Εξ. (6.48)

ως

$$K_1 = h f(y_j, x_j)$$

$$K_2 = h f(y_j + p h K_1, x_j + p h) \quad (6.63)$$

$$K_3 = h f(y_j + s h K_2 + (r - s)h K_1, x_j + r h)$$

Οι σταθερές w_1 , w_2 , w_3 και p , r , s στις Εξ. (6.62) (6.63) προσδιορίζονται με τον ίδιο τρόπο όπως στην $RK - 2$ μέθοδο. Δηλαδή πρώτα βρίσκουμε τα αναπτύγματα Taylor των συναρτήσεων K_2 και K_3 γύρω από το σημείο x_j, y_j και κατόπιν εξισώνουμε τους συντελεστές h , h^2 και h^3 με τους συντελεστές του αναπτύγματος της Εξ. (6.51) έτσι ώστε να επιτύχουμε

τοπικό σφάλμα αποκοπής τάξης h^4 . Καταλήγουμε και πάλι σε ένα σύστημα με λιγότερες εξισώσεις από αγνώστους

$$w_1 + w_2 + w_3 = 1$$

$$w_2 p + w_3 r = 1/2$$

$$w_2 p^2 + w_3 r^2 = 1/2$$

$$w_3 p s = 1/6$$

(6.64)

Το σύστημα αυτό λύνεται καθορίζοντας αυθαίρετες τιμές για δυο από τις 6 σταθερές. Η κλασική μορφή της RK-3 μεθόδου είναι

$$y_{j+1} = y_j + \frac{1}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3)$$

$$K_1 = h f(y_j, x_j)$$

$$K_2 = h f\left(x_j + \frac{h}{2}K_1, x_j + 1/2\right)$$

$$K_3 = h f(y_j + 2hK_2 - hK_1, x_{j+1})$$

Η μέθοδος αυτή είναι ουσιαστικά ο κανόνας Simpson όταν η συνάρτηση $f(y, x) \equiv f(x)$.

Είναι προφανές από την μέθοδο ανάπτυξης των μεθόδων RK ότι η εκλογή των παραμέτρων έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία μεθόδων RK-p με διαφορετικές ιδιότητες. Η πλέον διαδεδομένη μορφή της μεθόδου RK-3 είναι η ακόλουθη ($w_1 = w_2 = 1/4$, $w_3 = 4/6$)
 $p=1$, $r=1/2$, $s=1/4$

$$y^{(1)} = y_j + h f(y_j, x_j)$$

$$y^{(2)} = \frac{3}{4} y_j + \frac{1}{4} y^{(1)} + \frac{h}{h} f(y^{(1)}, x_{j+1/2})$$

$$y^{(3)} = \frac{1}{3} y_j + \frac{2}{3} y^{(2)} + \frac{2h}{h} f(y^{(2)}, x_{j+1/2})$$

ή στην πιο συμβατική μορφή

$$y_{j+1} = y_j + \frac{1}{6}[K_1 + K_2 + 4K_3]$$

$$K_1 = h f(y_j, x_j)$$

$$K_2 = h f(y_j + hK_1, x_{j+1/2})$$

$$K_3 = h f\left(y_j + \frac{h}{4}K_2 + \frac{h}{4}K_1, x_{j+1/2}\right)$$

Αυτή η μέθοδος $RK-3$ έχει το πλεονέκτημα ότι διατηρεί την ιδιότητα μείωσης της ολικής διακύμανσης (total variation diminishing TVD) και αναφέρεται ως $RK-3 TVD$ μέθοδος.