Κεφάλαιο 6 ΔΙΑΦΟΡΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ

Οι περισσότεροι επιστημονικοί νόμοι σε διάφορες επιστήμες γράφονται με τη μορφή διαφορικών εξισώσεων. Οι κανονικές διαφορικές εξισώσεις αποτελούν σημαντικό κεφάλαιο των μαθηματικών και υπάρχει πλειάδα μεθόδων για την επίλυς;h τους. Εν τούτοις, στην πράξη, ένας μεγάλος αριθμός από χρήσιμες διαφορικές εξισώσεις δεν επιλύονται αναλυτικά και απαιτείται η αριθμητική τους επίλυση. Δυστυχώς μάλιστα, ακόμη και πολύ απλά φυσικά μοντέλα, που χρησιμοποιούνται για την πρόβλεψη της εξέλιξης ενός φαινομένου, δεν επιλύονται αναλυτικά.

Ένα απλό παράδειγμα για τη σχέση διαφορικών εξισώσεων με φυσικά φαινόμενα αποτελεί το μοντέλο «κυνηγού-θηράματος». Έστω ότι $x(t)$είναι ο αριθμός των κυνηγών και $y(t)$ο αριθμός των θηραμάτων σε μια χρονική στιγμή. Τότε, κάτω από κατάλληλες (και απλουστευτικές) συνθήκες, η εξέλιξη των των δύο πληθυσμών θα δίνεται από το σύστημα των διαφορικών εξισώσεων

$$\frac{dx}{dt} = a(y+b)x$$
$$\frac{dy}{dt} = c(x+d)y$$

όπου τα a,b,c,d είναι σταθερές, που δίνονται από το μελετητή του συστήματος. Η επίλυση τέτοιου είδους προβλημάτων θα αποτελέσει το αντικείμενο αυτού του κεφαλαίου.

Στη συνέχεια, θα αναπτύξουμε τις παρακάτω μεθόδους για την αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων και θα αναφέρουμε τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα της κάθε μεθόδου.

- ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΝΟΣ ΒΗΜΑΤΟΣ
  - ΜΕΘΟΔΟΣ ΣΕΙΡΩΝ TAYLOR
  - ΜΕΘΟΔΟΣ EULER
  - ΜΕΘΟΔΟΣ RUNGE-KUTTA
- ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΒΗΜΑΤΩΝ
  - ΜΕΘΟΔΟΣ ADAMS
- ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ – ΔΙΟΡΘΩΣΗΣ
  - ΜΕΘΟΔΟΣ MILNE
  - ΜΕΘΟΔΟΣ HAMMING
  - ΜΕΘΟΔΟΣ ADAMS – MULTON

6.1 ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΝΟΣ ΒΗΜΑΤΟΣ

Οταν για τον υπολογισμό της τιμής μιας συνάρτησης που αποτελεί λύση μιας διαφορικής εξίσωσης στη θέση $x_i + h$ (οπου h είναι ένα μικρό βήμα) χρησιμοποιούμε μόνο την πληροφορία για την τιμή της συνάρτησης στήν προηγούμενη θέση x_i τότε οι τεχνικές για την αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων κατατάσσονται ως **μέθοδοι ενός βήματος**

6.1.1 ΜΕΘΟΔΟΣ ΣΕΙΡΩΝ TAYLOR

Η πλέον προφανής μέθοδος για την επίλυση μιας διαφορικής εξίσωσης πρώτης τάξης είναι το ανάπτυγμα Taylor.

Έστω, λοιπόν, μια διαφορική εξίσωση της μορφής

$$y' = f(x,y) \text{ με } y(x_0) = y_0$$

τότε, για να υπολογίσουμε την τιμή της $y(x)$ σε μια θέση $x = x_0 + h$, θα χρησιμοποιήσουμε το ανάπτυγμα Taylor, δηλαδή:

$$y(x_0+h)=y(x_0)+hy'(x_0)+\frac{h^2}{2}y''(x_0)+\ldots \qquad \textit{Εξ. 6.1}$$

Επειδή όμως γνωρίζουμε την $y'=f(x,y)$, μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τις παραγώγους της $y(x)$οποιασδήποτε τάξης:

$$y''=f'(x,y),\ y'''=f''(x,y),\ \text{κοκ.}$$

άρα ο υπολογισμός της τιμής της $y(x_0+h)$ είναι μια απλή διαδικασία.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 6.1

Έστω λοιπόν η διαφορική εξίσωση

$$y'=x+y$$

με αρχικές τιμές $y(0)=1$. *Να βρεθεί η τιμή της* $y(1)$ *(η ακριβής λύση δίνεται για σύγκριση και είναι* $y=2e^x-x-1$*).*

Για την επίλυσή της βρίσκω τις παραγώγους έως και 4ης τάξης:

$$y'(x_0)=y'(0)=0+1=1$$

$$y''=1+y'=1+x+y=1+y' \qquad y''(x_0)=1+y'(0)=2$$

$$y'''=1+y' \qquad y'''(x_0)=1+y'(0)=2$$

$$y^{(4)}=1+y' \qquad y^{(4)}(x_0)=1+y'(0)=2$$

Οπότε, χρησιμοποιώντας την εξ. 6.1 βρίσκω:

$$y(0+h)=1+h+h^2+\frac{h^3}{3}+\frac{h^4}{12}+\ldots$$

Το σφάλμα είναι προφανώς αυτό που προβλέπεται από το ανάπτυγμα Taylor, δηλαδή:

$$E=\frac{y^{(5)}(\xi)}{5!}h^5 \qquad \text{για} \qquad 0<\xi<h$$

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στον παρακάτω πίνακα, οι τιμές της δεύτερης στήλης βρίσκονται, αν χρησιμοποιήσουμε βήμα $h=0.1$ *την πρώτη φορά,* $h=0.2$ *τη δεύτερη φορά, κοκ. Παρατηρούμε επομένως ότι το σφάλμα αυξάνεται, καθώς αυξάνεται το* h *(4η στήλη).*

Αντίθετα, αν χρησιμοποιήσουμε σε κάθε βήμα τις τιμές που έχουμε υπολογίσει στο προηγούμενο βήμα, τότε η ακρίβεια παραμένει αρκετά καλή (5η στήλη).

x	***y***	***y (ακριβές)***	***Σφάλμα***	***Σφάλμα****
0	1			
0.1	1.110342	1.110342	1.7E-7	
0.2	1.24280	1.24281	$5.5x10^{-6}$	$3.7x10^{-7}$
0.3	1.39968	1.39972	$4.3x10^{-5}$	$6.2x10^{-7}$
0.4	1.383467	1.383649	$1.8x10^{-4}$	$9.1x10^{-7}$
:				
1.0	3.416667	3.436564	$2x10^{-2}$	$4.2x10^{-6}$

6.1.2 ΜΕΘΟΔΟΙ EULER ΚΑΙ EULER – HEUN

Η **μέθοδος Euler** αποτελεί ουσιαστικά περιορισμένη εφαρμογή της μεθόδου Taylor. Διατηρούμε όρους μόνο μέχρι 1ης τάξης ως προς h . Είναι:

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) \qquad \textit{Εξ. 6.2}$$

με προφανές σφάλμα:

$$E = \frac{y''(\xi)}{2}h^2 \qquad \text{για} \qquad 0 < \xi < h \qquad \textit{Εξ. 6.3}$$

Αν πρόκειται να τη χρησιμοποιήσουμε για λίγα μόνο βήματα, είναι αρκετά καλή και απλή στη χρήση. Για τη διαφορική εξίσωση στο Παράδειγμα 6.1 έχουμε:

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

ή καλύτερα, σε μορφή αναδρομικής σχέσης:

$$y_{n+1} = y_n + h(x_n + y_n)$$

Η **μέθοδος Euler-Heun** αποτελεί μια απλή περίπτωση μεθόδου **πρόβλεψης – διόρθωσης** (κατηγορία μεθόδων που θα μελετήσουμε στη συνέχεια). Ουσιαστικά, χρησιμοποιούμε τη μέθοδο Euler *(εξ. 6.2)*, για να υπολογίσουμε αρχικά την τιμή της $y(x)$στη θέση $y(x_0 + h)$, δηλαδή την τιμή y_1, και, στη συνέχεια, υπολογίζουμε την τιμή της y_1 αντικαθιστώντας την $y'(x_0)$ από το μέσο όρο των τιμών της παραγώγου στα σημεία x_0 και $x_0 + h$. Δηλαδή, χρησιμοποιώ για κάθε βήμα τις δύο σχέσεις:

$$\boxed{\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hy'_n \\ y_{n+1} &= y_n + h\frac{y'_n + y'_{n+1}}{2} \end{aligned}} \qquad \textit{Εξ. 6.4}$$

6.1.3 ΜΕΘΟΔΟΣ RUNGE – KUTTA

Η μέθοδος Runge – Kutta είναι μια κλασική μέθοδος με πολύ καλή ακρίβεια και χρησιμοποιείται ευρύτατα.

Με τη μέθοδο Runge – Kutta προσπαθούμε να αντικαταστήσουμε τις παραγώγους ανώτερης τάξης που εμφανίζονται στη μέθοδο Taylor με κατάλληλους συνδυασμούς των x_i, y_i, y'_i, τα οποία είναι γνωστά. Έτσι, αποφεύγουμε τον υπολογισμό των παραγώγων ανώτερης τάξης. Στη συνέχεια, αποδεικνύουμε τους τύπους για τη μέθοδο Runge – Kutta δεύτερης τάξης.

Έστω ότι έχουμε μια διαφορική εξίσωση της μορφής:

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

Μια αναδρομική σχέση για τον υπολογισμό του y_n είναι

$$y_{n+1} = y_n + ak_1 + bk_2 \quad \textit{όπου} \quad \begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n) \\ k_2 &= hf(x_n + Ah, y_n + Bk_1) \end{aligned} \qquad \textit{Εξ. 6.5}$$

Ας προσπαθήσουμε να την ταυτοποιήσουμε με μια σειρά Taylor δεύτερης τάξης:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2} f'(x_n, y_n) + \ldots$$

Επειδή όμως

$$\frac{df}{dx}=f_x+f_y\frac{dy}{dx}=f_x+f_y f$$

θα είναι:

$$y_{n+1}=y_n+hf_n+\frac{h^2}{2}\left(f_x+ff_y\right)_{x=x_n}$$

Συγκρίνοντας με την *εξ. 6.5*, που γράφεται:

$$y_{n+1}=y_n+ahf(x_n,y_n)+bhf\left[x_n+Ah,y_n+Bhf(x_n,y_n)\right]$$

που την αναπτύσσω σε σειρά Taylor[1]:

$$y_{n+1}=y_n+h(a+1)f_n+h^2\left(Abf_x+Bbff_y\right)_n$$

καταλήγω στις

$$\left.\begin{aligned} a+b&=1\\ A\cdot b&=\frac{1}{2}\\ B\cdot b&=\frac{1}{2}\end{aligned}\right\}\text{ μπορώ να θέσω αυθαίρετα: π.χ. } a=\frac{2}{3},\frac{1}{2},\frac{5}{4}\ \ldots$$

Εδώ επιλέγω να θέσω $a=\frac{1}{2}\Rightarrow b=\frac{1}{2},A=B=1$, δηλαδή

$$y_{n+1}=y_n+\frac{1}{2}(k_1+k_2)$$

όπου

$$\begin{aligned} k_1&=hf(x_n,y_n)\\ k_2&=hf(x_n+h,y_n+k_1)\end{aligned}$$

(Η σχέση που βρήκαμε είναι ουσιαστικά η μέθοδος Euler-Heun). Αν επαναλάβω την ίδια διαδικασία για ανάπτυγμα Taylor έως και h^4, θα καταλήξω σε ένα σύστημα 11 εξισώσεων με 13 αγνώστους. Με κατάλληλη επιλογή, των δύο από τις άγνωστες ποσότητες, μπορώ να καταλήξω στη μορφή:

$$y_{n+1}=y_n+\frac{1}{6}\left(k_1+2k_2+2k_3+k_4\right) \qquad \textit{Εξ. 6.6}$$

όπου

$$\begin{aligned} k_1&=hf(x_n,y_n)\\ k_2&=hf\left(x_n+\tfrac{1}{2}h,y_n+\tfrac{1}{2}k_1\right)\\ k_3&=hf\left(x_n+\tfrac{1}{2}h,y_n+\tfrac{1}{2}k_2\right)\\ k_4&=hf(x_n+h,y_n+k_3)\end{aligned} \qquad \textit{Εξ. 6.7}$$

Η μέθοδος αυτή είναι γνωστή ως **Runge – Kutta τέταρτης τάξης** με τοπικό σφάλμα: $E\approx 0\left(h^5\right)$ και γενικό σφάλμα μετά από *n* βήματα $E\approx 0\left(h^4\right)$. Η Runge – Kutta τέταρτης τάξης χρησιμοποιείται ευρύτατα αλλά υπάρχουν και ανώτερης τάξης μέθοδοι Runge – Kutta, όπως, για παράδειγμα, η **μέθοδος Runge–Kutta–Fehlberg**, που συνίστανται ανεπιφύλακτα.

Η μέθοδος Runge–Kutta–Fehlberg δίνεται από τις παρακάτω σχέσεις:

---

[1] Εδώ έγινε χρήση της $f\left(x_n+Ah,y_n+Bhf(x_n,y_n)\right)\approx\left(f+f_xAh+f_yBhf\right)_{x=x_n}$

$$k_1 = hf(x_n, y_n) \qquad \text{Εξ. 6.8}$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{4}h, y_n + \tfrac{1}{4}k_1\right) \qquad \text{Εξ. 6.9}$$

$$k_3 = h \cdot f\left(x_n + \tfrac{3}{8}h, y_n + \tfrac{3}{32}k_1 + \tfrac{9}{32}k_2\right) \qquad \text{Εξ. 6.10}$$

$$k_4 = h \cdot f\left(x_n + \tfrac{12}{13}h, y_n + \tfrac{1932}{2197}k_1 - \tfrac{7200}{2197}k_2 + \tfrac{7296}{2197}k_3\right) \qquad \text{Εξ. 6.11}$$

$$k_5 = h \cdot f\left(x_n + h, y_n + \tfrac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \tfrac{3680}{513}k_3 - \tfrac{845}{4104}k_4\right) \qquad \text{Εξ. 6.12}$$

$$k_6 = h \cdot f\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n - \tfrac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \tfrac{3544}{2565}k_3 + \tfrac{1859}{4104}k_4 - \tfrac{11}{40}k_5\right) \qquad \text{Εξ. 6.13}$$

οπότε εύκολα υπολογίζουμε μια πρώτη εκτίμηση για την τιμή της y_{n+1}

$$\overline{y}_{n+1} = y_n + \left(\tfrac{25}{216}k_1 + \tfrac{1408}{2565}k_3 + \tfrac{2197}{4104}k_4 - \tfrac{1}{5}k_5\right) \qquad \text{Εξ. 6.14}$$

Το *τοπικό σφάλμα* είναι τάξης $\approx h^5$. Παρατηρούμε ότι δεν έχει χρησιμοποιηθεί η τιμή k_6, την οποία όμως θα χρησιμοποιήσουμ στη συνέχεια για τον υπολογισμό ακριβέστερης τιμής με τη σχέση

$$y_{n+1} = y_n + \left(\tfrac{16}{135}k_1 + \tfrac{6656}{12825}k_3 + \tfrac{28561}{56430}k_4 - \tfrac{9}{50}k_5 + \tfrac{2}{55}k_6\right) \qquad \text{Εξ. 6.15}$$

με τοπικό σφάλμα $\approx h^6$ και *γενικό* $\approx h^5$.

Παρόλο που το $\overline{y}_{n+1}$ της σχέσης 6.14 δεν έχει σχέση με το y_{n+1} της σχέσης 6.15, εν τούτοις αποτελεί σημαντικό στοιχείο της μεθόδου. Πιο συγκεκριμένα, είναι σύνηθες στην αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων να επαναλαμβάνουμε την ίδια διαδικασία δυο φορές, μια για βήμα h, και μια για βήμα $h/2$. Αν η μέθοδος έχει σφάλμα $\approx h^n$ την πρώτη φορά, τότε τη δεύτερη φορά το σφάλμα θα είναι $\approx h^n/2^n$. Επομένως, αν το δεύτερο αποτέλεσμα εχει σφάλμα μικρότερο κατά $1/2^n$, τότε έχουμε την πεποίθηση ότι η μέθοδος συγκλίνει, αυτή η διαδικασία όμως είναι πολλές φορές χρονοβόρα.

Στη μέθοδο Runge-Kutta-Fehlberg, δεν επαναλαμβάνουμε την παραπάνω διαδικασία, αντίθετα, συγκρίνουμε τα αποτελέσματα σε κάθε βήμα των σχέσεων 6.14 και 6.15 και, αν η διαφορά τους είναι τάξης $\approx h$, όπως προβλέπει η θεωρία, τότε πιστεύουμε ότι η μέθοδος συγκλίνει. Επίσης είναι εξαιρετικά σημαντικό για την ταχύτητα εκτέλεσης του προγράμματος ότι τα $k_1, k_2, \ldots, k_6$ υπολογίζονται μια μόνο φορά και για τις δυο σχέσεις.

Τέλος, για τη μέθοδο Runge-Kutta-Fehlberg υπάρχει και *προσεγγιστική σχέση για το σφάλμα.* Το σφάλμα δίνεται από τη σχέση

$$E = \tfrac{1}{360}k_1 - \tfrac{128}{4275}k_3 - \tfrac{2197}{7524}k_4 + \tfrac{1}{50}k_5 + \tfrac{2}{55}k_6 \qquad \text{Εξ. 6.16}$$

Επειδή τα $k_1, k_2, \ldots, k_6$ είναι γνωστά σε κάθε βήμα, είναι δυνατό να εκτιμήσουμε άμεσα το σφάλμα και, αν είναι μεγαλύτερο από τη ζητούμενη ακρίβεια, υποδιπλασιάζουμε το h, ωσότου να την πετύχουμε.

Η προαναφερθείσα διαδικασία ουσιαστικά αναδεικνύει τη Runge - Kutta - Fehlberg σε **μέθοδο μεταβλητού βήματος**. Το πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι ότι έχουμε τη δυνατότητα να **αυξάνουμε** ή να **ελαττώνουμε** το βήμα ανάλογα με την συμπεριφορά της αριθμητικής λύσης σε κάθε σημείο, έτσι επιτυγχάνουμε ταχύτητα και, συγχρόνως, εξασφαλίζουμε τη ζητούμενη ακρίβεια.

6.2 ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΒΗΜΑΤΩΝ

Οι μέθοδοι ενός βήματος, που αναλύσαμε λίγο πριν, είναι αρκετά καλές και αξιόπιστες αλλά έχουν ένα βασικό μειονέκτημα: Όταν υπολογίζουμε την τιμή της y_{n+1}, αυτό γίνεται μόνο με χρήση της πληροφορίας που έχουμε στο βήμα n για το σημείο (x_n, y_n). Με αυτό τον τρόπο, χάνεται όλη η γνώση που αποκτήσαμε στα προηγούμενα $n-1$ βήματα για τη συμπεριφορά της συνάρτησης.

Οι **μέθοδοι πολλαπλού βήματος** έχουν το πλεονέκτημα ότι χρησιμοποιούν κατάλληλα την πληροφορία για την $y(x)$ από τα προηγούμενα 3-5 βήματα. Ένα προφανές μειονέκτημα αυτών των μεθόδων είναι η ανάγκη της γνώσης των αρχικών βημάτων, δηλαδή των y_1, y_2, y_3 για τον υπολογισμό του y_4, οπότε είναι αναγκαία η χρήση μιας από τις προηγούμενες μεθόδους ενός βήματος στην αρχή της διαδικασίας.

Η πλέον αξιόλογη και ευρύτατα χρησιμοποιούμενη μέθοδος πολλαπλών βημάτων είναι η **μέθοδος του Adams** που παρουσιάζεται στη συνέχεια.

6.2.1 ΜΕΘΟΔΟΣ ADAMS

Είναι από τις πλέον σημαντικές σύγχρονες μεθόδους, γι' αυτό θα δείξουμε τον τρόπο εύρεσης της αναδρομικής σχέσης της.

Αν δοθεί η διαφορική εξίσωση:

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

ολοκληρώνοντας και τα δυο μέρη της παραπάνω ισότητας παίρνω:

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} dy = y_{n+1} - y_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)dx \qquad \textit{Εξ. 6.17}$$

Στη συνέχεια, υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα προσεγγίζοντας την $f(x,y)$ με κατάλληλης τάξης συμπτωτικό πολυώνυμο χρησιμοποιώντας τα 3, 4, 5,... σημεία. Εδώ, θα χρησιμοποιήσουμε ένα πολυώνυμο δευτέρου βαθμού, που το υπολογίσαμε από τα τρία προηγούμενα σημεία. Οπότε χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του Newton προς τα πίσω,

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} dy = y_{n+1} - y_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \left(f_n + s\Delta f_{n-1} + \frac{(s+1)s}{2} \Delta^2 f_{n-2} + σφάλμα \right) dx$$

$$= h\int_{s=0}^{s=1} \left(f_n + s\Delta f_{n-1} + \frac{(s+1)s}{2} \Delta^2 f_{n-2} \right) ds + h\int_{s=0}^{s=1} \underbrace{\frac{s(s+1)(s+2)}{6}}_{\text{σφάλμα}} h^3 f'''(\xi) ds$$

οπότε

$$y_{n+1} - y_n = h\left(f_n + \frac{1}{2}\Delta f_{n-1} + \frac{5}{12}\Delta^2 f_{n-2} \right) + O(h^4)$$

$$= h\left(f_n + \frac{1}{2}(f_n - f_{n-1}) + \frac{5(f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2})}{12} \right) + O(h^4)$$

και τελικά

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}] + O(h^4) \qquad \textit{Εξ. 6.18}$$

Αν χρησιμοποιούσαμε συμπτωτικό πολυώνυμο τρίτου βαθμού, θα οδηγούμαστε στη σχέση:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] + O(h^5) \qquad \textit{Εξ. 6.19}$$

Παρατηρούμε ότι έχουμε δημιουργήσει πολύ απλά μεθόδους υψηλής ακρίβειας, που προγραμματίζονται εξαιρετικά εύκολα (συγκρίνετε με τις σχέσεις 6.13 και 6.15). Εν τούτοις, επαναλαμβάνουμε ότι, απαιτείται η χρήση της μεθόδου Runge-Kutta-Fehlberg για τον υπολογισμό των τιμών της $y(x)$ στις θέσεις $n-3$, $n-2$, $n-1$ και n, αν χρησιμοποιήσουμε την *εξ. 6.19.* Αν δεν είναι εύκολο να προγραμματίσουμε τη μέθοδο Runge-Kutta-Fehlberg, τότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την απλοϊκή μέθοδο Euler, όμως με σφάλμα $\approx h^2$ σε κάθε βήμα. Αυτό όμως θα έχει ως αποτέλεσμα την ελάττωση της ακρίβειας για τον υπολογισμό της $y(x)$ στα τέσσερα πρώτα βήματα. Θα μπορούσαμε να διορθώσουμε αυτό το αδύνατο σημείο της Euler ελαττώνοντας σημαντικά το βήμα, οπότε το συνολικό σφάλμα μετά από μεγαλύτερο προφανώς αριθμό βημάτων να είναι της τάξης $\approx h^5$.

6.2.2 ΜΕΘΟΔΟΣ MILNE

Η μέθοδος του Milne χρησιμοποιείται ευρύτατα, αποτελεί αξιόλογη μέθοδο και είναι απλή στο προγραμματισμό της. Επίσης, όπως θα φανεί, είναι εξαιρετικά ακριβής.

Για την εύρεση της αναδρομικής σχέσης ακολουθούμε παρόμοια διαδικασία με αυτή της μεθόδου Adams. Αν υποθέσουμε ότι η λύση είναι γνωστή στα σημεία x_n, x_{n-1}, x_{n-2} και x_{n-3}, τότε η διαφορική εξίσωση

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

μπορεί να γραφεί κατά τα προηγούμενα ως

$$\int_{x_{n-3}}^{x_{n+1}} dy = y_{n+1} - y_{n-3} = \int_{x_{n-3}}^{x_{n+1}} f(x,y)dx$$

Αν τώρα αντικαταστήσουμε την $f(x,y)$ με ένα δευτεροβάθμιο συμπτωτικό πολυώνυμο και ολοκληρώσουμε, καταλήγουμε στη σχέση

$$y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4h}{3}\left(2f_n - f_{n-1} + 2f_{n-2}\right) \qquad \textit{Εξ. 6.20}$$

με σφάλμα $$E \approx \frac{28}{90} h^5 y^{(5)}(\xi), \qquad x_{n-3} \le \xi \le x_{n+1} \qquad \textit{Εξ. 6.21}$$

6.3 ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ – ΔΙΟΡΘΩΣΗΣ

Σ' αυτές τις μεθόδους, ο υπολογισμός της τιμής της y_{n+1} στο σημείο x_{n+1} γίνεται σε δυο βήματα, δηλαδή υπάρχουν δυο σχέσεις για τον υπολογισμό των y_{n+1}.

1. ΤΥΠΟΣ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ

$$y_{k+1} = \Pi\left(y_{k-\rho}, y_{k-\rho+1}, \ldots, y_k\right) \qquad \textit{Εξ. 6.22}$$

δηλ. στην πρώτη προσπάθεια χρησιμοποιούμε τα ρ προηγούμενα σημεία

2. **ΤΥΠΟΣ ΔΙΟΡΘΩΣΗΣ**

στη συνέχεια χρησιμοποιείται η πρόβλεψη y_{k+1} σε ένα τύπο που συνδυάζει τις τιμές της συνάρτησης στα ρ προηγούμενα σημεία (αυτό δεν είναι πάντα υποχρεωτικό)

$$y_{k+1} = \Delta\left(y_{k-\rho}, y_{k-\rho+1}, \ldots, y_k, y_{k+1}\right) \qquad \textit{Εξ. 6.23}$$

Αυτή η διαδικασία γίνεται επαναληπτικά, ωσότου οι δυο διαδοχικές τιμές της y_{k+1} να είναι αρκετά κοντά. $\left|y_{k+1}^{(\lambda)} - y_{k+1}^{(\lambda+1)}\right| < E$, όπου λ είναι ο αριθμός επαναλήψεων της διαδικασίας και E η ζητούμενη ακρίβεια.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 6.2

Αποδείξτε ως άσκηση την πρόβλεψη με τον τύπο του Nystrom

$$y_{k+1} = y_{k-1} + 2hy'_k \qquad \text{Εξ. 6.24}$$

και στη συνέχεια χρησιμοποιήστε τη διόρθωση Euler – Heun

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\left(y'_k + y'_{k+1}\right) \qquad \text{Εξ. 6.25}$$

για τη λύση της διαφορικής εξίσωσης του παραδείγματος 6.1.

Στη συνέχεια, θα δείξουμε ένα τύπο διόρθωσης για τη μέθοδο Milne.
Για τη διαφορική εξίσωση

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

μπορούμε, κατά τα γνωστά, να γράψουμε:

$$\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} dy = y_{n+1} - y_{n-1} = \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} f(x,y)dx \qquad \text{Εξ. 6.26}$$

οπότε αντικαθιστώντας το ολοκλήρωμα του δεύτερου μέρους με τον κανόνα του Simpson δημιουργούμε τη σχέση

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}\left(f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1}\right) \qquad \text{Εξ. 6.27}$$

με σφάλμα $E \approx \frac{h^5}{90} y^{(5)}(\xi)$ όπου $x_{n-1} \langle \xi \langle x_{n+1}$ Εξ. 6.28

Παρατηρούμε ότι το σφάλμα είναι μεν $\approx h^5$, όπως και στη Milne, αλλά κατά 28 φορές μικρότερο, που δείχνει την αποτελεσματικότητα της *διορθωτικής διαδικασίας*. Ανάλογα αποδεικνύεται και ο τύπος διόρθωσης για τη μέθοδο Adams.

Συνοπτικά έχουμε τους παρακάτω συνδυασμούς τύπων πρόβλεψης διόρθωσης:

ΜΕΘΟΔΟΣ ADAMS – MULTON

ΤΥΠΟΣ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}\left(55y'_n - 59y'_{n-1} + 37y'_{n-2} - 9y'_{n-3}\right) \qquad \text{Εξ. 6.29}$$

ΤΥΠΟΣ ΔΙΟΡΘΩΣΗΣ

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}\left(9y'_{n+1} + 19y'_n - 5y'_{n-1} + y'_{n-2}\right) \qquad \text{Εξ. 6.30}$$

ΜΕΘΟΔΟΣ HAMMING

Μια επίσης συχνά χρησιμοποιούμενη μέθοδος πρόβλεψης - διόρθωσης είναι η μέθοδος Hamming. Η απόδειξη των σχέσεων επαφίεται στον αναγνώστη.

ΤΥΠΟΣ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ

$$\mathrm{y}_{\mathrm{k+1}} = y_{k-3} + \frac{4h}{3}\left(2y'_{k-2} - y'_{k-1} + 2y'_k\right) \qquad \text{Εξ. 6.31}$$

ΤΥΠΟΣ ΔΙΟΡΘΩΣΗΣ

$$y_{k+1} = \frac{1}{8}\left(9y_k - y_{k-2}\right) + \frac{3h}{8}\left(-y'_{k-1} + 2y'_k + y'_{k+1}\right) \qquad \text{Εξ. 6.32}$$

ΜΕΘΟΔΟΣ MILNE

ΤΥΠΟΣ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ

$$\mathrm{y}_{\mathrm{k+1}} = y_{k-3} + \frac{4h}{3}\left(2y'_{k-2} - y'_{k-1} + 2y'_k\right)$$

ΤΥΠΟΣ ΔΙΟΡΘΩΣΗΣ

$$y_{k+1} = y_{k-1} + \frac{h}{3}\left(y'_{k-1} + 4y'_k + y'_{k+1}\right)$$

Για τον υπολογισμό των αρχικών σημείων χρησιμοποιείται συνήθως Runge–Kutta τέταρτης τάξης ή καλύτερα Runge-Kutta-Fehlberg.

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ: *Οι μέθοδοι ενός βήματος και πολλών βημάτων μπορούν κατ'αρχάς να μας οδηγήσουν στη λύση με την επιθυμητή ακρίβεια, εν τούτοις οι μέθοδοι πολλών βημάτων είναι ταχύτερες στην εκτέλεση διότι ο αριθμός των πράξεων που απαιτούνται σε κάθε βήμα είναι σημαντικά μικρότερος. Συγκρίνετε για παράδειγμα των αριθμό πράξεων που απαιτούνται σε κάθε βήμα για τη μέθοδο Runge-Kutta-Fehlberg και για τη μέθοδο Adams.*

6.4 ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ

Οι περισσότερες από τις χρησιμοποιούμενες διαφορικές εξισώσεις δεν είναι πρώτης τάξης, ωστόσο η μεθοδολογία που αναπτύχθηκε στα προηγούμενα κεφάλαια εφαρμόζεται εύκολα.

Ευρύτατα συναντώνται οι διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης, δηλαδή

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f\left(x, y, y'\right) \qquad \text{Εξ. 6.33}$$

οπότε απαιτείται η γνώση αρχικών συνθηκών, όχι μόνο για την $y(x)$ αλλά και για την παράγωγό της στην αρχική θέση x_0. Το σύνηθες είναι να ορίζουμε μια νέα συνάρτηση $z(x)$ τέτοια, ώστε $z(x) = y'$. Οπότε η δεύτερης τάξης διαφορική εξίσωση ανάγεται σε δυο πρωτοβάθμιες με τις ανάλογες αρχικές συνθήκες. Δηλαδή

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= z & \qquad y(x_0) &= y_0 \\ \frac{dz}{dx} &= f(x, y, z) & \qquad z(x_0) &= y'_0 \end{aligned} \qquad \text{Εξ. 6.34}$$

Το σύστημα διαφορικών εξισώσεων *6.37* είναι ισοδύναμο με την διαφορική εξίσωση *6.36*. Η διαδικασία αυτή μπορεί να ακολουθηθεί για κάθε βαθμού διαφορική εξίσωση. Με όσα προαναφέρθηκαν είναι προφανής και ο τρόπος με τον οποίο μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι μέθοδοι Adams, Milne κλπ. για συστήματα διαφορικών εξισώσεων.

Έστω λοιπόν ότι έχουμε το παρακάτω σύστημα

$$\frac{dy}{dx} = zy + x \qquad y(0) = 1 \qquad \textit{Εξ. 6.35}$$

$$\frac{dz}{dx} = xz + y \qquad z(0) = 1 \qquad \textit{Εξ. 6.36}$$

Αν χρησιμοποιήσουμε τη **μέθοδο Euler**, το σύστημα θα δίνεται από αναδρομικές σχέσεις της μορφής

$$y'_{n+1} = y_n + hy'_n = y_n + h(z_n y_n + x_n)$$

$$\textit{Εξ. 6.37}$$

$$z'_{n+1} = z_n + hz'_n = z_n + h(x_n z_n + y_n)$$

Είναι προφανής λοιπόν η αναλογία της μεθόδου με όσα αναφέραμε στην αρχή του κεφαλαίου για τις μεθόδους Euler και κατ' επέκταση Taylor. Αντίστοιχα, αν χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο Runge - Kutta, θα πρέπει να υπολογίσουμε πέραν των $k_1, k_2, \ldots k_6$ και τα $l_1, l_2, \ldots, l_6$. Εδώ, αναφέρουμε τη **μέθοδο Runge - Kutta τέταρτης τάξης**, οπότε και η επέκτασή της γίνεται αναλόγως.

Θα είναι λοιπόν για ένα σύστημα $y' = f(x, y, z)$ και $z' = g(x, y, z)$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)$$

όπου

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n, z_n) \\ k_2 &= hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1, z_n + \tfrac{1}{2}l_1\right) \\ k_3 &= hf\left(x_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{1}{2}k_2, z_n + \tfrac{1}{2}l_2\right) \\ k_4 &= hf(x_n + h, y_n + k_3, z_n + l_3) \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} l_1 &= hg(x_n, y_n, z_n) \\ l_2 &= hg\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1, z_n + \tfrac{1}{2}l_1\right) \\ l_3 &= hg\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_2, z_n + \tfrac{1}{2}l_2\right) \\ l_4 &= hg(x_n + h, y_n + k_3, z_n + l_3) \end{aligned}$$

3.6 ΣΦΑΛΜΑΤΑ

Υπάρχει μια πληθώρα σφαλμάτων που υπεισέρχονται στη διαδικασία αριθμητικής επίλυσης μιας διαφορικής εξίσωσης. Ενδεικτικά, θα αναφέρουμε μερικά.

1. **Αρχικά σφάλματα δεδομένων:** Εάν οι αρχικές τιμές δεν είναι ακριβώς γνωστές, π.χ. τις γνωρίζουμε με συγκεκριμένη ακρίβεια, τότε το αρχικό σφαλμα διαδίδεται σε όλα τα βήματα της ολοκλήρωσης. Έτσι, για παράδειγμα, είναι δυνατό να παρατηρήσουμε το χάος σε διάφορα δυναμικά συστήματα.

2. **Σφάλματα Στρογγυλοποίησης**
   α. Από τη συγκράτηση μόνο συγκεκριμένου αριθμού δεκαδικών ψηφίων
   β. Βεβαιώνεται με την αύξηση των δεκαδικών
   γ. Είναι εξαιρετικά σημαντικό, όταν αφαιρούνται δυο λύσεις της ίδιας περίπου τάξης

3. **Σφάλμα αποκοπής**
   α. Από τη χρήση σειρών συγκεκριμένης τάξης
   β. Διορθώνεται μικραίνοντας το h.

4. **Διάδοση Σφαλμάτων**
   Τα παραπάνω σφάλματα διαδίδονται από βήμα σε βήμα.
   Εστω για παράδειγμα μια τιμή y_n που είναι η αληθής και Y_n αυτή που υπολογίζουμε με κάποια από τις μεθόδους μας. Δηλαδή, το σφάλμα είναι:
   $$e_n = y_n - Y_n$$
   οπότε, για παράδειγμα, ας εξετάσουμε τη διάδοση του σφάλματος στη μέθοδο Euler. Θα είναι:
   $$\begin{aligned} e_{n+1} &= y_{n+1} - Y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) - Y_n - hf(x_n, Y_n) \\ &= e_n + h\frac{\left(f(x_n, y_n) - f(x_n, Y_n)\right)}{y_n - Y_n} e_n = e_n\left(1 + hf_y(x_n, y_n)\right) \\ &= (1 + hk)e_n \end{aligned}$$
   δηλαδή *η διάδοση του σφάλματος είναι γραμμική.*

<u>ΑΣΚΗΣΕΙΣ</u>

1. Χρησιμοποιείστε Euler, Euler-Heun, Taylor τρίτης τάξης και Runge – Kutta τέταρτης τάξης για την αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων:

α. $y' = xy^{1/3}$, $y(1) = 1$ (ακριβής $y = \left(\frac{x^2+2}{3}\right)^{3/2}$)

Υπόδειξη: ολοκληρώστε από $x = 1$ *ως* $x = 2$

β. $y' = -xy^2$, $y(0) = 2$ (ακριβής $y = \frac{2}{x^2}$)

Υπόδειξη: ολοκληρώστε από $x = 0$ *ως* $x = 1$

γ. $y' = -2xy$, $y(0) = 1$ (ακριβής $y = e^{-x^2}$)

Υπόδειξη: ολοκληρώστε από $x = 0$ *ως* $x = 1$

δ. $y' = \frac{y(1 - x^2y^4)}{x(1 + x^2y^4)}$, $y(1) = 1$

Υπόδειξη: ολοκληρώστε από $x = 1$ *ως* $x = 2$

ε. $y' = \frac{x - e^x}{y + e^y}$, $y(0) = 0$ Βρείτε το $y(1)$.

2. Χρησιμοποιείστε Milne, Hamming και Adams-Multon για την προηγούμενη άσκηση.

3. Να λυθεί αριθμητικά η διαφορική εξίσωση (σύστημα)

$$x' = 1195x - 1995y \qquad x(0) = 2$$
$$y' = 1197x - 1997y \qquad y(0) = -2$$

Να βρεθούν:

- οι τιμές $y(1), x(1)$
- οι τιμές $y(-1), x(-1)$

Τι παρατηρείτε, αν η ακριβής λύση είναι

$$x(t) = 10e^{-2t} - 8e^{-800t}, \quad y(t) = 6e^{-2t} - 8e^{-800t}$$

4. Να λυθούν τα συστήματα

α. $\begin{aligned} y' &= yz + x \\ z' &= y - x \end{aligned} \qquad \begin{aligned} y(0) &= 0 \\ z(0) &= 0 \end{aligned}$

β. $\begin{aligned} y' &= z \\ z' &= -y \end{aligned} \qquad \begin{aligned} y(0) &= 0 \\ z(0) &= 1 \end{aligned}$

5. Αποδείξτε τον τύπο Adams – Bashforth δεύτερης τάξης

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[3f_n - f_{n-1}]$$