

Αριθμητική Ολοκλήρωση Συνήθων Διαφορικών εξισώσεων Πολυβηματικές Μέθοδοι

Ζ. Καλογηράτου - Θ. Μονοβασίλης

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΔΥΤΙΚΗΣ ΜΑΚΕΔΟΝΙΑΣ
Τμήμα Μαθηματικών

Οι μέθοδοι που παρουσιάστηκαν έως τώρα είχαν τη γενική μορφή:

$$y_{n+1} = y_n + h \Phi(x_n, y_n).$$

Δηλαδή για να βρούμε την προσέγγιση της λύσης y_{n+1} χρειαζόμασταν μόνο την προσέγγιση στο προηγούμενο σημείο y_n . Αυτές οι μέθοδοι λέγονται μέθοδοι ενός βήματος ή απλού βήματος (μονοβηματικές).

Στο κεφάλαιο αυτό θα εξετάσουμε τις πολυβηματικές μεθόδους, οι οποίες προκειμένου να προσεγγίσουν την συνάρτηση σε ένα σημείο χρησιμοποιούν προσεγγίσεις σε δύο ή και περισσότερα προηγούμενα σημεία.

Όπως είδαμε και προηγούμενα η πρώτη αριθμητική μέθοδος οφείλεται στον Euler, στη συνέχεια οι Adams και Bashforth (1883) εισήγαγαν την ιδέα να χρησιμοποιηθούν τιμές της συνάρτησης καθώς και τιμές των παραγώγων της σε προηγούμενα βήματα.

Στη συνέχεια με πολυβηματικές μεθόδους ασχολήθηκαν οι Moulton (1926), Nyström (1925), Milne (1926).

Η σύγχρονη θεωρία των γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων αναπτύχθηκε από τους Dahlquist (1956) και Henrici (1962).

Μια μέθοδος λοιπόν θα λέγεται k βημάτων αν ο υπολογισμός του y_{n+1} απαιτεί τις τιμές στα σημεία: $y_n, y_{n-1}, y_{n-2}, \dots, y_{n-k+1}$.

Για να ξεκινήσει μια τέτοια μέθοδος λοιπόν χρειαζόμαστε τις προσεγγιστικές τιμές στα παραπάνω σημεία, τις οποίες μπορούμε να τις υπολογίσουμε με την βοήθεια μιας μεθόδου ενός βήματος.

Στα προηγούμενα μαθήματα για να λύσουμε το πρόβλημα αρχικών τιμών πρώτης τάξης :

$y'(x) = f(x, y)$ στο διάστημα $[a, b]$ με αρχική συνθήκη $y(a) = y(x_0) = y_0$

εκτιμήσαμε την παράγωγο της $y(x)$ σαν το πηλίκο διαφορών :

$$y'(x_n) \approx \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{x_{n+1} - x_n} = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} = \frac{y_{n+1} - y_n}{h}$$

και βρήκαμε την μέθοδο: $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$ (Euler).

Αν όμως εκτιμούσαμε την παράγωγο της $y(x)$ με το πηλίκο διαφορών :

$$y'(x_n) \approx \frac{y(x_{n+1}) - y(x_{n-1}))}{x_{n+1} - x_{n-1}} = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_{n-1}))}{2h} = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h}$$

θα βρίσκαμε την μέθοδο :

$$y_{n+1} = y_{n-1} + hf(x_n, y_n) \text{ ή } y_{n+2} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}).$$

Για να ξεκινήσουμε χρειαζόμαστε τις εκτιμήσεις στα σημεία x_0 και x_1 για να βρούμε την εκτίμηση της λύσης στο σημείο x_2 .

Παρατηρούμε ότι σε κάθε βήμα για να μπορέσουμε να βρούμε εκτίμηση της λύσης στο σημείο x_{n+2} χρειάζονται οι εκτιμήσεις στα δύο προηγούμενα σημεία x_{n+1} και x_n .

Μια μέθοδος αυτής της μορφής όπως είπαμε λέγεται πολυβηματική μέθοδος (δύο βημάτων).

Στο ίδιο αποτέλεσμα καταλήγουμε αν ολοκληρώσουμε την Δ.Ε. στο διάστημα $[x_n, x_{n+2}]$.

$$\begin{aligned}y'(x) &= f(x, y) \\ \int_{x_n}^{x_{n+2}} y'(x) dx &= \int_{x_n}^{x_{n+2}} f(x, y) dx \\ y(x_{n+2}) - y(x_n) &= \int_{x_n}^{x_{n+2}} f(x, y) dx\end{aligned}$$

Αν προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα του δευτέρου μέλους με τον τύπο του ενδιάμεσου σημείου θα βρούμε:

$$y_{n+2} - y_n = 2hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

ή τελικά

$$y_{n+2} = y_n + 2hf(x_{n+1}, y_{n+1}).$$

Θα εφαρμόσουμε τη μέθοδο στο πρόβλημα αρχικών τιμών

$$y' = xy + 2x, \quad x \in [0, 1], \quad y(0) = 1.$$

Θα εφαρμόσουμε την παραπάνω μέθοδο με $n = 10$ σημεία και βήμα $h = 0.1$.

Επειδή γνωρίζουμε μόνο μια αρχική τιμή την $y_0 = 1$, θα χρησιμοποιήσουμε μια μέθοδο ενός βήματος για να υπολογίσουμε την τιμή της συνάρτησης στο επόμενο βήμα. Εδώ θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο Euler.

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = 1 + 0.1(0.1 \cdot 1 + 2 \cdot 0.1) = 1.03$$

Έχουμε λοιπόν ότι $y_0 = 1$ και $y_1 = 1.03$.

Ξεκινώντας λοιπόν να εφαρμόζουμε την μέθοδο έχουμε:

$$y_2 = y_0 + 2hf(x_1, y_1) = 1 + 0.2(0.1 \cdot 1.03 + 2 \cdot 0.1) = 1.0606$$

$$y_3 = y_1 + 2hf(x_2, y_2) = 1.03 + 0.2(0.2 \cdot 1.0606 + 2 \cdot 0.2) = 1.1524$$

$$y_4 = y_2 + 2hf(x_3, y_3) = 1.0606 + 0.2(0.3 \cdot 1.1524 + 2 \cdot 0.3) = 1.2497$$

Η αναλυτική λύση του προβλήματος είναι: $y(x) = -2 + 3e^{\frac{x^2}{2}}$

και στα αντίστοιχα σημεία οι τιμές της ακριβούς λύσης είναι:

$$y(0.2) = 3e^{\frac{0.2^2}{2}} - 2 = 1.0606$$

$$y(0.3) = 3e^{\frac{0.3^2}{2}} - 2 = 1.1381$$

$$y(0.4) = 3e^{\frac{0.4^2}{2}} - 2 = 1.2499$$

Μπορούμε να προγραμματίσουμε στο MATLAB πρόγραμμα το οποίο υλοποιεί την παραπάνω μέθοδο:

```
function (x,y) = multistep(fun,y0,y1,a,b,N)
h = (b-a)/N ;
x = zeros(N+1,1) ;
y = zeros(N+1,1) ;
x(1) = a ;
x(2) = a + h;
y(1) = y0 ;
y(2) = y1 ;
for n=1:N-1
    x(n+1) = x(n) + h ;
    y(n+2) = y(n) + 2*h*feval(fun,x(n+1),y(n+1)) ;
end
end
```

Στον πίνακα δίνονται οι τιμές του x_i , οι προσεγγιστικές τιμές που βρίσκουμε με την μέθοδο, οι ακριβείς λύσεις καθώς και το απόλυτο σφάλμα.

x_i	y_i	$y(x_i)$	$ y_i - y(x_i) $
0	1.0000	1.0000	0
0.1000	1.0300	1.0150	0.0150
0.2000	1.0606	1.0606	0.0000
0.3000	1.1524	1.1381	0.0143
0.4000	1.2498	1.2499	0.0001
0.5000	1.4124	1.3994	0.0130
0.6000	1.5910	1.5917	0.0007
0.7000	1.8433	1.8329	0.0105
0.8000	2.1291	2.1314	0.0023
0.9000	2.5040	2.4979	0.0061
1.0000	2.9398	2.9462	0.0064

Η γενική μορφή μιας πολυβηματικής μεθόδου (Multistep Method) είναι

$$\sum_{i=0}^{k-1} a_i y_{n+1-i} = h\Phi(x_n, y_{n+1}, y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k+1}, h).$$

μια μέθοδος λέγεται γραμμική πολυβηματική μέθοδος (Linear Multistep Method) αν

$$\Phi(x_n, y_{n+1}, y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k+1}, h) = \sum_{i=0}^k b_i f(x_{n+1-i}, y_{n+1-i})$$

Η γενική μορφή μιας γραμμικής πολυβηματικής μεθόδου είναι

$$y_{n+1} = \sum_{i=1}^k a_i y_{n+1-i} + h \sum_{i=0}^k b_i f(x_{n+1-i}, y_{n+1-i}).$$

Οι παράμετροι a_i, b_i, k επιλέγονται με τέτοιο τρόπο ώστε να ικανοποιούν κατάλληλα κριτήρια που σχετίζονται με την τάξη και/ή την ευστάθεια της μεθόδου, με παρόμοιο τρόπο με αυτόν που επιλέγονται οι παράμετροι στις μεθόδους RK.

Υποθέτουμε επίσης ότι: $|a_0| + |b_0| \neq 0$.

Η γραμμική πολυβηματική μέθοδος θα λέμε ότι είναι αλγεβρικής τάξης p αν ολοκληρώνει ακριβώς κάθε γραμμικό συνδυασμό των γραμμικά ανεξάρτητων συναρτήσεων $1, x, x^2, \dots, x^{p+1}$.

Ορίζουμε τη συνέπεια των πολυβηματικών μεθόδων με τρόπο ανάλογο με αυτό των μεθόδων Runge-Kutta .

Ικανές και αναγκαίες συνθήκες για να είναι η μέθοδος συνεπής (consistent) είναι οι εξής:

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^k a_i &= 1 \\ -\sum_{i=1}^k (i-1)a_i + \sum_{i=0}^k b_i &= 1\end{aligned}$$

Δηλαδή πρέπει η μέθοδος να είναι τουλάχιστον πρώτης τάξης

(ακριβής για $y(x) = 1$ και για $y(x) = x$).

Μια γραμμική μέθοδος k -βημάτων λέγεται μηδενικά ευσταθής (zero stable) αν υπάρχει σταθερά L , έτσι ώστε για δύο οποιεσδήποτε ακολουθίες y_n και z_n προσεγγίσεων, οι οποίες έχουν υπολογιστεί με την ίδια μέθοδο αλλά διαφορετικές αρχικές προσεγγίσεις $y_0, y_1, \dots, y_{k-1}$ και $z_0, z_1, \dots, z_{k-1}$ αντίστοιχα να ισχύει:

$$|y_n - z_n| \leq L \max \{|y_0 - z_0|, |y_1 - z_1|, \dots, |y_{k-1} - z_{k-1}|\}.$$

Επειδή, για να δείξουμε αν η μέθοδος είναι ευσταθής εφαρμόζουμε την μέθοδο στην Δ. Ε. $y' = 0$, ονομάζεται μηδενική ευστάθεια.

Για ευκολία την ευστάθεια της μεθόδου χρησιμοποιούμε την ακόλουθη συνθήκη.
Μια μέθοδος της μορφής θα λέμε ότι πληροί τη συνθήκη ριζών, αν για το χαρακτηριστικό της πολυώνυμο:

$$z^k + a_{k-1}z^{k-1} + a_{k-2}z^{k-2} + \dots + a_0$$

ισχύουν τα εξής:

- όλες οι ρίζες του πολυωνύμου έχουν μέτρο το πολύ 1
- όλες οι ρίζες του πολυωνύμου, που έχουν απόλυτες τιμές ίσες με 1, έχουν πολλαπλότητα 1.

Αποδεικνύεται ότι μια μέθοδος είναι ευσταθής αν ικανοποιείται η συνθήκη των ριζών.

Το ακόλουθο θεώρημα αφείλεται στον Henrici (1962)

Η μέθοδος συγκλίνει αν και μόνο αν είναι συνεπής και μηδενικά ευσταθής.

Στη συνέχεια θα δούμε τρόπους κατασκευής πολυβηματικών μεθόδων.

Μια τεχνική είναι να ζητήσουμε η μέθοδος μας να είναι ακριβής για όσο το δυνατόν μεγαλύτερες δυνάμεις του x .

Στην περίπτωση $k = 1$ η μέθοδος γράφεται

$$y_{n+1} = a_1 y_n + h(b_0 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + b_1 f(x_n, y_n)),$$

παρατηρούμε ότι στο δεξί μέλος εμφανίζεται ο όρος $f(x_{n+1}, y_{n+1})$ ο οποίος εμπλέκει την άγνωστη εκτίμηση y_{n+1} .

Μια τέτοια μέθοδος λέγεται έμμεση.

Ζητώντας η μέθοδος να είναι ακριβής για $y(x) = 1$ δηλαδή $f(x, y(x)) = 0$

θα πρέπει να ισχύει $a_1 = 1$.

Για να είναι η μέθοδος ακριβής για $y(x) = x$ δηλαδή $f(x, y) = y'(x) = 1$ προκύπτει:

$$x + h = a_1 x + h(b_0 + b_1)$$

δηλαδή θα πρέπει να ισχύει: $b_0 + b_1 = 1$.

Για άμεση μέθοδο θέτουμε $b_0 = 0$ οπότε $b_1 = 1$.

Συνεπώς για $a_1 = 1$, $b_0 = 0$ και $b_1 = 1$ η μέθοδος που προκύπτει είναι και πάλι η μέθοδος Euler .

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

Γενικά αν $b_0 = 0$ η μέθοδος που προκύπτει λέγεται άμεση (explicit), ενώ αν $b_0 \neq 0$ η μέθοδος που προκύπτει λέγεται έμμεση (implicit).

Για έμμεση μέθεδο ($b_0 \neq 0$) μπορούμε να ζητήσουμε να ολοκληρώνεται ακριβώς και η συνάρτηση $y(x) = x^2$.

Για να είναι η μέθοδος ακριβής για $y(x) = x^2$ δηλαδή $f(x, y) = y'(x) = 2x$ προκύπτει:

$$\begin{aligned}(x+h)^2 &= x^2 + h(b_0 2(x+h) + b_1 2x) \\ x^2 + 2xh + h^2 &= x^2 + 2hxb_0 + 2b_0h^2 + 2hxb_1 \\ 2xh + h^2 &= 2hx(b_0 + b_1) + 2b_0h^2\end{aligned}$$

οπότε θα πρέπει να ικανοποιούνται οι σχέσεις:

$$b_0 + b_1 = 1 \quad \text{και} \quad b_0 = \frac{1}{2}$$

Συνεπώς για $a_1 = 1$, $b_0 = \frac{1}{2}$ και $b_1 = \frac{1}{2}$ η μέθοδος που προκύπτει είναι η:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f(x_{n+1}, y_{n+1}) + f(x_n, y_n)),$$

Η παραπάνω μέθοδος είναι ακριβής για πολυώνυμα δεύτερου βαθμού και είναι ίδια με την implicit Runge Kutta μέθοδο του τραπεζίου.

Στην περίπτωση $k = 2$ η μέθοδος γράφεται

$$y_{n+1} = a_1 y_n + a_2 y_{n-1} + h(b_0 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + b_1 f(x_n, y_n) + b_2 f(x_{n-1}, y_{n-1})),$$

Για να είναι η μέθοδος συνεπής πρέπει

$$a_1 + a_2 = 1 \quad \text{και} \quad -a_2 + b_0 + b_1 + b_2 = 1$$

Για άμεση μέθοδο ($b_0 = 0$) αν θέσουμε $a_1 = 1$ η μέθοδος έχει την μορφή:

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 f(x_n, y_n) + b_2 f(x_{n-1}, y_{n-1})).$$

Μπορούμε να υπολογίσουμε τους συντελεστές b_1 και b_2 ώστε η μέθοδος να είναι ακριβής για πολυώνυμο όσο το δυνατό μεγαλύτερου βαθμού.

Για $y(x) = x^2$

$$(x+h)^2 = x^2 + h(b_1 2x + b_2 2(x-h))$$

$$x^2 + 2xh + h^2 = x^2 + 2h(b_1 + b_2) - 2h^2 b_2$$

παίρνουμε επιπλέον της $b_1 + b_2 = 1$ τη σχέση $2b_2 = -1$ από όπου προκύπτει $b_2 = -1/2$ και $b_1 = 3/2$.

Η μέθοδος γράφεται

$$y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{3}{2}f(x_n, y_n) - \frac{1}{2}f(x_{n-1}, y_{n-1})\right).$$

Η παραπάνω μέθοδος είναι ακριβής για πολυώνυμο δεύτερου βαθμού.

Αν τώρα θέλουμε να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους a_1, a_2, b_0, b_1, b_2 ώστε να πάρουμε τη μέγιστη δυνατή τάξη

$$y_{n+1} = a_1 y_n + a_2 y_{n-1} + h(b_0 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + b_1 f(x_n, y_n) + b_2 f(x_{n-1}, y_{n-1})),$$

Για $y(x) = x^2$ έχουμε

$$\begin{aligned}(x+h)^2 &= a_1 x^2 + a_2 (x-h)^2 + h(b_0 2(x+h) + b_1 2x + b_2 2(x-h)) \\ x^2 + 2xh + h^2 &= a_1 x^2 + a_2 x^2 - 2a_2 xh + a_2 h^2 \\ &\quad + h(2b_0 x + 2hb_0 + 2b_1 x + 2b_2 x - 2b_2 h) \\ x^2 + 2xh + h^2 &= (a_1 + a_2)x^2 + (b_0 + b_1 + b_2 - a_2)2xh \\ &\quad + (a_2 + 2b_0 - 2b_2)h^2\end{aligned}$$

συνεπώς θα πρέπει να ισχύει επιπλέον $a_2 + 2b_0 - 2b_2 = 1$.

Για $y(x) = x^3$ έχουμε

$$\begin{aligned}(x+h)^3 &= a_1 x^3 + a_2 (x-h)^3 + h(b_0 3(x+h)^2 + b_1 3x^2 + b_2 3(x-h)^2) \\ x^3 + 3x^2h + 3xh^2 + h^3 &= a_1 x^3 + a_2 x^3 - 3a_2 x^2h + 3a_2 xh^2 - a_2 h^3 \\ &\quad + h(3b_0 x^2 + 6b_0 xh + 3b_0 h^2 + 3b_1 x^2 + 3b_2 x^2 - 6b_2 xh + 3b_2 h^2) \\ x^3 + 3x^2h + 3xh^2 + h^3 &= (a_1 + a_2)x^3 + (-3a_2 + 3b_0 + 3b_1 + 3b_2)x^2h \\ &\quad + (3a_2 + 6b_0 - 6b_2)xh^2 + (-a_2 + 3b_0 + 3b_2)h^3\end{aligned}$$

συνεπώς θα πρέπει επιπλέον να ισχύει $-a_2 + 3b_0 + 3b_2 = 1$.

Συνοψίζοντας τα παραπάνω έχουμε το ακόλουθο σύστημα εξισώσεων

$$\begin{aligned}a_1 + a_2 &= 1 \\b_0 + b_1 + b_2 - a_2 &= 1 \\a_2 + 2b_0 - 2b_2 &= 1 \\3b_0 + 3b_2 - a_2 &= 1\end{aligned}$$

Για άμεση μέθοδο ($b_0 = 0$) το σύστημα έχει μοναδική λύση την

$$a_1 = -4, \quad a_2 = 5, \quad b_1 = 4, \quad b_2 = 2$$

και η παραγόμενη μέθοδος είναι η

$$y_{n+1} = -4y_n + 5y_{n-1} + h(4f(x_n, y_n) + 2f(x_{n-1}, y_{n-1}))$$

Η μέθοδος είναι ακριβής για πολυώνυμα τρίτου βαθμού.

Για έμεση μέθοδο ($b_0 \neq 0$) μπορούμε να απαιτήσουμε να είναι ακριβής και για πολυώνυμα τετάρτου βαθμού $y(x) = x^4$ έχουμε την επιπλέον εξίσωση $a_2 + 4b_0 - 4b_2 = 1$. Το σύστημα έχει μοναδική λύση την

$$a_1 = 0, \quad a_2 = 1, \quad b_0 = \frac{1}{3}, \quad b_1 = \frac{4}{3}, \quad b_2 = \frac{1}{3}$$

και η παραγόμενη μέθοδος είναι η

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(f(x_{n+1}, y_{n+1}) + 4f(x_n, y_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})),$$

η οποία είναι ακριβής για πολυώνυμα τετάρτου βαθμού.

Κατασκευή μεθόδων με χρήση του αναπτύγματος Taylor

Ένας διαφορετικός τρόπος εύρεσης των παραμέτρων a_i και b_i είναι να αναπτύξουμε κατά Taylor το τοπικό σφάλμα αποκοπής

$$t_{n+1} = -y(x_{n+1}) + \sum_{i=1}^k a_i y(x_{n+1-i}) + h \sum_{i=0}^k b_i f(x_{n+1-i}, y(x_{n+1-i})),$$

Για να κατασκευάσουμε μέθοδο τέταρτης τάξης παίρνουμε το ανάπτυγμα

$$\begin{aligned} t_{n+1} &= -y(x_n) - y'(x_n)h - \frac{1}{2}y''(x_n)h^2 - \frac{1}{6}y^{(3)}(x_n)h^3 - \frac{1}{24}y^{(4)}(x_n)h^4 + O(h^5) \\ &+ \sum_{i=1}^k \left(a_i y(x_n) - (i-1)a_i y'(x_n)h + \frac{1}{2}(i-1)^2 a_i y''(x_n)h^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{6}(i-1)^3 a_i y^{(3)}(x_n)h^3 + \frac{1}{24}(i-1)^4 a_i y^{(4)}(x_n)h^4 + O(h^5) \right) \\ &+ h \sum_{i=0}^k \left(b_i y'(x_n) - (i-1)b_i y''(x_n)h + \frac{1}{2}(i-1)^2 b_i y^{(3)}(x_n)h^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{6}(i-1)^3 b_i y^{(4)}(x_n)h^3 + \frac{1}{24}(i-1)^4 b_i y^{(5)}(x_n)h^4 + O(h^5) \right) \end{aligned}$$

Κατασκευή μεθόδων με χρήση του αναπτύγματος Taylor

ομαδοποιώντας τους όρους των δυνάμεων του h το τοπικό σφάλμα αποκοπής γράφεται:

$$\begin{aligned}t_{n+1} &= \left(\sum_{i=1}^k a_i - 1 \right) y(x_n) \\&+ h \left(- \sum_{i=1}^k (i-1) a_i + \sum_{i=0}^k b_i - 1 \right) y'(x_n) \\&+ h^2 \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k (i-1)^2 a_i - \sum_{i=0}^k b_i (i-1) - \frac{1}{2} \right) y''(x_n) \\&+ h^3 \left(-\frac{1}{6} \sum_{i=1}^k (i-1)^3 a_i + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^k b_i (i-1)^2 - \frac{1}{6} \right) y^{(3)}(x_n) \\&+ h^4 \left(\frac{1}{24} \sum_{i=1}^k (i-1)^4 a_i - \frac{1}{6} \sum_{i=0}^k b_i (i-1)^3 - \frac{1}{24} \right) y^{(4)}(x_n) + O(h^5)\end{aligned}$$

Κατασκευή μεθόδων με χρήση του αναπτύγματος Taylor

$$t_{n+1} = C_0 y(x_n) + C_1 h y'(x_n) + C_2 h^2 y''(x_n) + C_3 h^3 y^{(3)}(x_n) + C_4 h^4 y^{(4)}(x_n) + O(h^5)$$

όπου

$$C_0 = \sum_{i=1}^k a_i - 1$$

$$C_1 = -\sum_{i=1}^k (i-1)a_i + \sum_{i=0}^k b_i - 1$$

$$C_2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k (i-1)^2 a_i - \sum_{i=0}^k b_i (i-1) - \frac{1}{2}$$

$$C_3 = -\frac{1}{6} \sum_{i=1}^k (i-1)^3 a_i + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^k b_i (i-1)^2 - \frac{1}{6}$$

$$C_4 = \frac{1}{24} \sum_{i=1}^k (i-1)^4 a_i - \frac{1}{6} \sum_{i=0}^k b_i (i-1)^3 - \frac{1}{24}$$

Κατασκευή μεθόδων με χρήση του αναπτύγματος Taylor

Μια γραμμική πολυβηματική μέθοδος είναι τάξης p αν ισχύει $C_0 = C_1 = C_2 = \dots = C_p = 0$ και ο συντελεστής C_{p+1} είναι η σταθερά σφάλματος (error constant).

Οι συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούν οι συντελεστές a_i και b_i είναι

$$\sum_{i=1}^k a_i = 1$$

$$-\sum_{i=1}^k (i-1)a_i + \sum_{i=0}^k b_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^k (i-1)^2 a_i - 2 \sum_{i=0}^k b_i (i-1) = 1$$

$$-\sum_{i=1}^k (i-1)^3 a_i + 3 \sum_{i=0}^k b_i (i-1)^2 = 1$$

$$\sum_{i=1}^k (i-1)^4 a_i - 4 \sum_{i=0}^k b_i (i-1)^3 = 1$$

Κατασκευή μεθόδων με χρήση του αναπτύγματος Taylor

Έτσι για παράδειγμα αν θεωρήσουμε την περίπτωση για $k = 2$ οι συνθήκες γίνονται

$$\begin{aligned}a_1 + a_2 &= 1 \\ -a_2 + b_0 + b_1 + b_2 &= 1 \\ a_2 + 2b_0 - 2b_2 &= 1 \\ -a_2 + 3b_0 + 3b_2 &= 1 \\ a_2 + 4b_0 - 4b_2 &= 1.\end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι είναι το σύστημα εξισώσεων που βρήκαμε στην προηγούμενη παράγραφο.

Κατασκευή μεθόδων με χρήση του αναπτύγματος Taylor

Έστω ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε την ακριβέστερη μέθοδο τριών βημάτων.

Η μέθοδος θα είναι της μορφής:

$$y_{n+1} = a_1 y_n + a_2 y_{n-1} + a_3 y_{n-2} + h(b_0 f_{n+1} + b_1 f_n + b_2 f_{n-1} + b_3 f_{n-2})$$

Παρατηρούμε ότι η μέθοδος μας έχει 7 παραμέτρους τους $a_1, a_2, a_3, b_0, b_1, b_2, b_3$.

Αναπτύσσουμε σε σειρά Ταψλορ με όρους έως και h^6 και παίρνουμε το ακόλουθο σύστημα:

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 + a_3 &= 1 \\ -a_2 - 2a_3 + b_0 + b_1 + b_2 + b_3 &= 1 \\ a_2 + 2a_3 + b_0 - b_2 - 2b_3 &= 1 \\ -a_2 - 8a_3 + 3(b_0 + b_2 + 4b_3) &= 1 \\ a_2 + 16a_3 + 4(b_0 - b_2 - 8b_3) &= 1 \\ -a_2 - 32a_3 + 5(b_0 + b_2 + 16b_3) &= 1 \\ a_2 + 64a_3 + 6(b_0 - 6b_2 - 32b_3) &= 1 \end{aligned}$$

λύση

$$\begin{aligned} a_1 &= -\frac{27}{11}, & a_2 &= \frac{27}{11}, & a_3 &= 1, \\ b_0 &= \frac{3}{11}, & b_1 &= \frac{27}{11}, & b_2 &= \frac{27}{11}, & b_3 &= \frac{3}{11}. \end{aligned}$$

Κατασκευή μεθόδων με χρήση του αναπτύγματος Taylor

Οπότε η ακριβέστερη μέθοδος τριών βημάτων αυτής της μορφής είναι η:

$$y_{n+1} = \frac{27}{11}(-y_n + y_{n-1}) + y_{n-2} + \frac{3h}{11}(f_{n+1} + 9f_n + 9f_{n-1} + f_{n-2})$$

Ενώ αν θέλαμε να κατασκευάσουμε την ακριβέστερη άμεση μέθοδο τριών βημάτων θα απαιτούσαμε $b_0 = 0$ οπότε θα είχαμε 6 παραμέτρους οπότε θα αναπτύσσαμε κατά Ταψλορ μέχρι τους όρους του h^5 και λύνοντας το αντίστοιχο σύστημα των εξισώσεων θα βρίσκαμε :

$$\begin{aligned} a_1 &= -18, & a_2 &= 9, & a_3 &= 10, \\ b_1 &= 9, & b_2 &= 18, & b_3 &= 3. \end{aligned}$$

Οπότε η ακριβέστερη άμεση μέθοδος τριών βημάτων είναι η:

$$y_{n+1} = -18 y_n + 9 y_{n-1} + 10 y_{n-2} + h(9 f_n + 18 f_{n-1} + 3 f_{n-2})$$

Κατασκευή μεθόδων τύπου Adams

Όπως είδαμε παραπάνω, για να λύσουμε την εξίσωση $y'(x) = f(x, y)$ μπορούμε να ολοκληρώσουμε την Δ.Ε. στο διάστημα $[x_n, x_{n+1}]$ και να πάρουμε:

$$\begin{aligned}y'(x) &= f(x, y) \\ \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x) dx &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx \\ y(x_{n+1}) &= y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx\end{aligned}$$

Αν αντικαταστήσουμε την συνάρτηση $f(x, y)$ με κάποιο πολυώνυμο παρεμβολής $P_r(x)$, βαθμού το πολύ r , θα πάρουμε:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_r(x) dx$$

Οι Adams και Bashforth σε άρθρο τους το 1883 εισήγαναν πολυβηματικές μεθόδους χρησιμοποιώντας το πολυώνυμο παρεμβολής Newton στα σημεία $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-k+1}$.

Κατασκευή μεθόδων τύπου Adams

Το πολυώνυμο αυτό γράφεται με την βοήθεια των προς τα πίσω διαφορών ως εξής :

$$\begin{aligned}P_k(x) &= P_k(x_n + sh) = \sum_{i=0}^k \binom{s+i-1}{i} \nabla^i f_n \\&= f_n + \binom{s}{1} \nabla f_n + \binom{s+1}{2} \nabla^2 f_n + \dots + \binom{s+k-1}{k} \nabla^k f_n.\end{aligned}$$

όπου

$$\nabla^0 f_n = f_n, \quad \nabla^{j+1} = \nabla^j f_n - \nabla^j f_{n-1}$$

έτσι κάνοντας αντικατάσταση έχουμε :

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_i \nabla^i f_n$$

όπου οι σταθερές γ_i είναι ίσες με :

$$\gamma_i = \int_0^1 \binom{s+i-1}{i} ds$$

Κατασκευή μεθόδων τύπου Adams

$$\gamma_i = \int_0^1 \binom{s+i-1}{i} ds$$

Οι πέντε πρώτοι συντελεστές γ_i βρίσκονται ως εξής

$$\gamma_0 = \int_0^1 \binom{s-1}{0} ds = \int_0^1 1 ds = 1$$

$$\gamma_1 = \int_0^1 \binom{s}{1} ds = \int_0^1 s ds = \frac{1}{2}$$

$$\gamma_2 = \int_0^1 \binom{s+1}{2} ds = \frac{1}{2} \int_0^1 (s^2 + s) ds = \frac{5}{12}$$

$$\gamma_3 = \int_0^1 \binom{s+2}{3} ds = \frac{1}{6} \int_0^1 (s^3 + 3s^2 + 2s) ds = \frac{3}{8}$$

$$\begin{aligned} \gamma_4 &= \int_0^1 \binom{s+3}{4} ds = \frac{1}{24} \int_0^1 s(s+1)(s+2)(s+3) ds \\ &= \frac{1}{24} \int_0^1 (s^4 + 6s^3 + 11s^2 + 6s) ds = \frac{251}{720} \end{aligned}$$

Κατασκευή μεθόδων τύπου Adams

Στον επόμενο πίνακα δίνονται οι πρώτες εννέα τιμές των y_i για $i = 0, \dots, 8$.

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{251}{720}$	$\frac{95}{288}$	$\frac{19087}{60480}$	$\frac{5257}{17280}$	$\frac{1070017}{3628800}$

Για τις τιμές των y_i που βρήκαμε προκύπτουν αντίστοιχα οι μέθοδοι:

Για $k = 1$ έχουμε:

$$y_{n+1} = y_n + h y_0 \nabla^0 f_n \quad y_{n+1} = y_n + h f_n$$

Για $k = 2$ έχουμε:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(y_0 \nabla^0 f_n + y_1 \nabla^1 f_n \right)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \left(f_n + \frac{1}{2} \left(\nabla^0 f_n - \nabla^0 f_{n-1} \right) \right)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \left(f_n + \frac{1}{2} f_n - \frac{1}{2} f_{n-1} \right)$$

Κατασκευή μεθόδων τύπου Adams

Για $k = 3$ έχουμε:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\gamma_0 \nabla^0 f_n + \gamma_1 \nabla^1 f_n + \gamma_2 \nabla^2 f_n \right)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \left(f_n + \frac{1}{2} \left(\nabla^0 f_n - \nabla^0 f_{n-1} \right) + \frac{5}{12} \left(\nabla^1 f_n - \nabla^1 f_{n-1} \right) \right)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \left(f_n + \frac{1}{2} f_n - \frac{1}{2} f_{n-1} + \frac{5}{12} \left(\nabla^0 f_n - \nabla^0 f_{n-1} - \nabla^0 f_{n-1} + \nabla^0 f_{n-2} \right) \right)$$

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

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} (23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2})$$

Κατασκευή μεθόδων τύπου Adams

Οι επόμενες τρεις μέθοδοι για $k = 4, 5, 6$ είναι

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720} (1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} - 1274f_{n-3} + 251f_{n-4})$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{1440} (4277f_n - 7923f_{n-1} + 9982f_{n-2} - 7298f_{n-3} + 2877f_{n-4} - 475f_{n-5})$$

Οι παραπάνω μέθοδοι καλούνται Adams - Bashforth , είναι άμεσες μέθοδοι, αφού $b_0 = 0$ και είναι της μορφής για τις οποίες ισχύει $a_1 = 1$ και $a_i = 0$ για $i = 2, \dots, k$. Δηλαδή έχουν τη γενική μορφή:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^k b_i f(x_{n+1-i}, y_{n+1-i}),$$

ή

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 f(x_n, y_n) + b_2 f(x_{n-1}, y_{n-1}) + \dots + b_k f(x_{n-k}, y_{n-k})).$$