

Αριθμητική Ολοκλήρωση Συνήθων Διαφορικών εξισώσεων

Ζ. Καλογηράτου - Θ. Μονοβασίλης

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΔΥΤΙΚΗΣ ΜΑΚΕΔΟΝΙΑΣ
Τμήμα Μαθηματικών

Διαφορικές Εξισώσεις

Μια διαφορική εξίσωση είναι μια σχέση μεταξύ μιας συνάρτησης και των παραγώγων της. Έστω I ένα διάστημα του $\mathbb{R}$ και U υποσύνολο του $\mathbb{R}^{n+1}$, $g : I \times U \rightarrow \mathbb{R}$ μια συνάρτηση $n+2$ μεταβλητών και $y : I \rightarrow \mathbb{R}$ μια άγνωστη συνάρτηση, τότε η εξίσωση

$$g(x, y(x), y'(x), y''(x), \dots, y^{(n-1)}(x), y^{(n)}(x)) = 0$$

ονομάζεται Συνήθης Διαφορική Εξίσωση (ΣΔΕ) ή Διαφορική Εξίσωση (ΔΕ).

Τάξη διαφορικής εξίσωσης είναι η μεγαλύτερη τάξη των παραγώγων που εμπλέκονται στην εξίσωση.

Ένα πρόβλημα αρχικών τιμών (ΠΑΤ) είναι μια ΣΔΕ, $x \in [x_0, b)$ ή $x \in [x_0, b]$ ή $x \in [x_0, +\infty)$ μαζί με τις αρχικές συνθήκες

$$y(x_0) = a_0, \quad y^{(k)}(x_0) = a_k, \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

$a_0, a_1, a_2, \dots, a_{n-1}$ πραγματικοί αριθμοί.

Συνήθης διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης

Η γενική μορφή μιας ΣΔΕ πρώτης τάξης είναι

$$y' = f(x, y)$$

όπου f είναι μια συνάρτηση δύο μεταβλητών.

Το αυτόνομο πρόβλημα θα έχει την μορφή

$$y' = f(y)$$

Ένα σύστημα δύο πρώτης τάξη ΣΔΕ με δύο άγνωστες συναρτήσεις $y_1(x)$ και $y_2(x)$ έχει τη μορφή

$$y_1' = f_1(x, y_1, y_2),$$

$$y_2' = f_2(x, y_1, y_2).$$

Ενώ ένα σύστημα από n πρώτης τάξης ΣΔΕ είναι της μορφής

$$y_1' = f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n),$$

$$y_2' = f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n),$$

$$\vdots$$

$$y_n' = f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n).$$

Συστήματα ΣΔΕ πρώτης τάξης

Με χρήση διανυσμάτων μπορούμε να γράψουμε

$$Y' = F(x, Y)$$

όπου $Y(x)$ και $F(x, Y)$ είναι συναρτήσεις της μορφής

$$Y(x) = \begin{pmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \\ \vdots \\ y_n(x) \end{pmatrix}, \quad F(x, Y) = \begin{pmatrix} f_1(x, Y) \\ f_2(x, Y) \\ \vdots \\ f_n(x, Y) \end{pmatrix}$$

Το αυτόνομο σύστημα είναι

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(y_1, y_2, \dots, y_n), \\ y_2' &= f_2(y_1, y_2, \dots, y_n), \\ &\vdots \\ y_n' &= f_n(y_1, y_2, \dots, y_n). \end{aligned}$$

Συστήματα ΣΔΕ πρώτης τάξης

Μια ΣΔΕ τάξης n : $y^{(n)} = f(x, y(x), y'(x), y''(x), \dots, y^{(n-1)})$
μπορεί να γραφεί σαν ένα σύστημα από n ΣΔΕ πρώτης τάξης. Δηλαδή

$$\begin{array}{ll} y_1(x) = y(x) & \\ y_2(x) = y'(x) & y_1'(x) = y_2(x) \\ y_3(x) = y''(x) & y_2'(x) = y_3(x) \\ \vdots & \vdots \\ y_{n-1}(x) = y^{(n-2)}(x) & y_{n-1}'(x) = y_n(x) \\ y_n(x) = y^{(n-1)}(x) & y_n'(x) = f(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_{n-1}(x)) \end{array}$$

Αυτό είναι ένα σύστημα ΣΔΕ με

$$\begin{array}{ll} f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) & = y_2(x) \\ f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) & = y_3(x) \\ & \vdots \\ f_{n-1}(x, y_1, y_2, \dots, y_n) & = y_n(x) \\ f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n) & = f(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_{n-1}(x)). \end{array}$$

Ιστορική αναδρομή Αριθμητικών Μεθόδων

Ο Νεύτωνας (1642-1727) ήταν ο πρώτος που βρήκε προσεγγιστικές λύσεις διαφορικών εξισώσεων χρησιμοποιώντας αριθμητικές διαδικασίες.

Στο έργο του *Mathematical Principles of Natural Philosophy* έδωσε τα ακόλουθα λήμματα :

Lemma V

To find a curved line of the parabolic kind which shall pass through any given number of points.

Lemma VI

Certain observed places of a comet being given, to find the place of the same at any intermediate given time.

Ο Νεύτωνας αναφέρεται στον κομήτη του Χάλεϋ, έναν κομήτη μικρής περιόδου που είναι ορατός με γυμνό μάτι από τη Γη. Εμφανίζεται κάθε 75-79 χρόνια. Η τροχιά του γύρω από τον Ήλιο είναι εξαιρετικά ελλειπική και έχει τροχιακή εκκεντρότητα 0,967.

Εμφανίστηκε για τελευταία φορά στο εσωτερικό του Ηλιακού μας Συστήματος το 1986 και αναμένεται να εμφανιστεί στα μέσα του 2061.

Η πρώτη καταγραφή του κομήτη του Χάλεϋ είναι το 240 π.Χ. στο κινεζικό χρονικό *Records of the Grand Historian*, το οποίο περιγράφει έναν κομήτη που εμφανίστηκε στα ανατολικά και κινήθηκε βόρεια.

Ιστορική αναδρομή Αριθμητικών Μεθόδων

Ο Έντμοντ Χάλεϋ (1656-1742) ήταν Άγγλος αστρονόμος, μαθηματικός και φυσικός, φίλος του Νεύτωνα και χρησιμοποίησε τον νόμο της παγκόσμιας έλξης του Νεύτωνα για να υπολογίσει την περιодικότητα του κομήτη που πήρε το όνομά του, το 1705 *Σύνοψη της Αστρονομίας των Κομητών*.

Ο Χάλεϋ πέθανε το 1742 πριν προλάβει να παρατηρήσει την προβλεπόμενη επιστροφή του.

Ένας από τους πολύ σημαντικούς υπολογισμούς στην ιστορία της επιστήμης είναι η πρόβλεψη της επιστροφής του κομήτη που έγινε από τους Clairaut, Lalande και Lepaute το 1748.

Προέβλεψαν ότι ο κομήτης θα έφτανε στο περιήλιο στις 13 Απριλίου 1749, το οποίο ήταν λάθος μόνο για 31 ημέρες.

Η επόμενη παρατήρηση είχε προβλεφθεί το 1835 με σφάλμα 5 ημερών.

Η παρατήρηση το 1910 με σφάλμα 2,7 ημερών προβλέφθηκε από τους Βρετανούς αστρονόμους Cowell και Crommelin.

Investigation of the Motion of Halley's Comet from 1759-1910, Greenwich Observations 1909.

Η αριθμητική μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε είναι η πολύ γνωστή μέθοδος Numeron οποία αναφέρεται επίσης και ως μέθοδος Cowell.

Ο Numeron (1891-1941) ήταν Ρώσος αστρονόμος από την Αγία Πετρούπολη.

Ιστορική αναδρομή Αριθμητικών Μεθόδων

- Ο Leonard Euler το 1768 ήταν ο πρώτος που κατασκεύασε μια αριθμητική μέθοδο.
- Οι μέθοδοι Adams-Bashforth και Adams-Moulton προέκυψαν από τον J. C. Adams το 1883 για να βοηθήσουν στη διερεύνηση της τριχοειδούς δράσης του Bashforth.
Ο Adams συμμετείχε στην ανακάλυψη του Ποσειδώνα υπολογίζοντας τη θέση του με βάση την κίνηση του Ουρανού.
- Ο Forest Ray Moulton (1872-1952) *New Methods in Exterior Ballistics* το 1926 περιγράφει μεθόδους για τον υπολογισμό των βαλλιστικών πινάκων, λύνοντας ένα μη γραμμικό σύστημα ΣΔΕ δεύτερης τάξης χρησιμοποιώντας μεθόδους τύπου Adams.
- Ο Carl Runge, το 1895, κατασκεύασε δύο μεθόδους δεύτερης τάξης χρησιμοποιώντας 2 στάδια (χρησιμοποιώντας τους κανόνες ενδιάμεσου σημείου και του τραπεζίου) γενικεύοντας τη μέθοδο του Euler . Κατασκεύασε επίσης μια μέθοδο 3ης τάξης με 4 στάδια.
- Ο Karl Heun, το 1900, κατασκεύασε διάφορες μεθόδους έως και 4ης τάξης.
- Ο Wilhelm Kutta, το 1901, εισήγαγε τη γενική τάξη των άμεσων Runge-Kutta μεθόδων όπως τη γνωρίζουμε σήμερα. Για πρώτη φορά έδωσε τις συνθήκες τάξης. Παρουσίασε μεθόδους 4ης τάξης με 4 στάδια και μεθόδους 5ης τάξης με 6 στάδια.
- Ο E. J. Nystrom το 1925 ολοκλήρωσε την ανάλυση των μεθόδων 5ης τάξης και ανέπτυξε ειδικές μεθόδους για ΣΔΕ δεύτερης τάξης στις οποίες απουσιάζει η πρώτη παράγωγος.

Σύμφωνα με τον Butcher έχουμε την ακόλουθη εξέλιξη των μεθόδων Runge - Kutta

Τάξη	Στάδια	Συγγραφέας	Έτος
2	2	Runge	1895
3	3	Heun	1900
4	4	Kutta	1901
5	6	Kutta	1901
5	6	Nyström	1925
6	8	Huta	1956
6	7	Butcher	1964
7	9	Butcher	1968
8	11	Curtis	1970
8	11	Cooper - Verner	1972
10	18	Curtis	1975
10	17	Hairer	1978

Αριθμητικές Μέθοδοι

Μια αριθμητική μέθοδος υπολογίζει τις εκτιμήσεις της λύσης σε έναν πεπερασμένο αριθμό σημείων στο διάστημα ολοκλήρωσης $[a, b]$.

Έστω $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = b$.

μια διαμέριση του διαστήματος $[a, b]$.

Η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών σημείων ονομάζεται βήμα της μεθόδου και συμβολίζεται με $h_n = x_{n+1} - x_n$.

Αν θεωρήσουμε υποδιαστήματα ίδιου μήκους τότε το βήμα είναι σταθερό $h = (b - a)/N$.

Έστω η πρώτη τάξης ΣΔΕ

$$y'(x) = f(x, y)$$

με διάστημα ολοκλήρωσης $[a, b]$ και αρχική συνθήκη $y(a) = y(x_0) = y_0$.

Γνωρίζουμε την τιμή της άγνωστης συνάρτησης στο x_0 ,

θα υπολογίσουμε την προσέγγιση της αναλυτικής λύσης $y(x_1)$ στο σημείο x_1 την οποία συμβολίζουμε με y_1 .

Στη συνέχεια υπολογίζουμε την προσέγγιση y_2 του $y(x_2)$, χρησιμοποιώντας την τιμή y_1 , κ.ο.κ.

Γενικά υπολογίζουμε την προσέγγιση y_{n+1} του $y(x_{n+1})$, χρησιμοποιώντας την τιμή y_n .

Τότε λέμε ότι έχουμε μια μέθοδο απλού βήματος

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

Αριθμητικές Μέθοδοι

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις τιμές των y_0 και y_1 για να εκτιμήσουμε την τιμή της αναλυτικής λύσης $y(x_2)$,

αυτή είναι μια μέθοδος δύο βημάτων.

Μια μέθοδος οποία χρησιμοποιεί μόνο το y_n για να βρει το y_{n+1} ονομάζεται μέθοδος ενός βήματος.

Μια πολυβηματική μέθοδος χρησιμοποιεί περισσότερες από μια προηγούμενες εκτιμήσεις για να βρει την τιμή του y_{n+1} .

Μια k βημάτων μέθοδος χρησιμοποιεί k εκτιμήσεις $y_{n-k+1}, \dots, y_{n-2}, y_{n-1}, y_n$ για να βρει το y_{n+1} .

Η γενική μορφή μια μεθόδου ενός βήματος είναι:

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

Η γενική μορφή μια μεθόδου k βημάτων είναι:

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

Η μέθοδος του Euler

Η μέθοδος Euler περιγράφηκε από τον Η μέθοδος του Euler (1768) στην εργασία του Η μέθοδος του Euler του *Institutiones Calculi Integralis*.

Μπορούμε να γράψουμε την παράγωγο της $y(x)$ ως εξής

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

Αντικαθιστούμε την $y' = f(x, y)$

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} \approx f(x_n, y_n)$$

τότε

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

Η μέθοδος του Euler

Θα μπορούσαμε επίσης να πάρουμε την μέθοδο με την βοήθεια του αναπτύγματος Taylor γύρω από το x_n

$$y(x) = y(x_n) + (x - x_n) y'(x_n) + \frac{(x - x_n)^2}{2!} y''(x_n) + \dots$$

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + (x_{n+1} - x_n) y'(x_n) + \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{2!} y''(x_n) + \dots$$

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h y'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \dots$$

αν αποκόψουμε από τον όρο του h^2

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + h y'(x_n)$$

αντικαθιστώντας το $y'(x_n)$ με $f(x_n, y(x_n))$

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + h f(x_n, y(x_n))$$

παίρνουμε την μέθοδο

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

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών (ΠΑΤ)

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

Εφαρμόζουμε την μέθοδο Euler με $n = 10$ σημεία, τότε το μέγεθος του βήματος είναι $h = 0.1$. Γνωρίζουμε ότι $y_0 = 1$,

$$y_1 = y_0 + h f(x_0, y_0) = 1 + 0.1(0 \cdot 1 + 2 \cdot 0) = 1$$

$$y_2 = y_1 + h f(x_1, y_1) = 1 + 0.1(0.1 \cdot 1 + 2 \cdot 0.1) = 1.03$$

$$y_3 = y_2 + h f(x_2, y_2) = 1.03 + 0.1(0.2 \cdot 1.03 + 2 \cdot 0.2) = 1.0906$$

Η αναλυτική λύση είναι:

$$y(x) = -2 + 3e^{\frac{x^2}{2}}.$$

$$y(x_1) = y(0.1) = 1.0150$$

$$y(x_2) = y(0.2) = 1.0606$$

$$y(x_3) = y(0.3) = 1.1381$$

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

Η ακόλουθη συνάρτηση του MATLAB υλοποιεί την μέθοδο του Euler:

```
function (x,y) = myEuler(fun,y0,a,b,N)
```

```
h = (b-a)/N ;
```

```
x = zeros(N+1,1) ;
```

```
y = zeros(N+1,1) ;
```

```
x(1) = a ;
```

```
y(1) = y0 ;
```

```
for n=1:N
```

```
    x(n+1) = x(n) + h ;
```

```
    y(n+1) = y(n) + h*feval(fun,x(n),y(n)) ;
```

```
end
```

```
end
```

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

Τα ορίσματα εισόδου είναι:

- fun η συνάρτηση $f(x, y)$,
- y0 η αρχική συνθήκη,
- a, b το διάστημα ολοκλήρωσης $[a, b]$,
- N ο αριθμός των διαμερίσεων.

Τα ορίσματα εξόδου είναι:

- το x ένα $(N + 1) \times 1$ διάνυσμα
- το y ένα $(N + 1) \times 1$ διάνυσμα με την αριθμητική λύση σε κάθε σημείο του x.

Έχουμε γράψει μια συνάρτηση για το δεξί μέλος της εξίσωσης $f(x, y) = xy + 2x$

```
function f = ode1(x,y)
```

```
f = x*y+2*x ;
```

```
end
```

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

Λύνουμε το πρόβλημα στο διάστημα $[0, 1]$ με 11 σημεία διαμέρισης ($N = 10$ υποδιαστήματα)

x_i	y_i
0	1.0000
0.1000	1.0000
0.2000	1.0300
0.3000	1.0906
0.4000	1.1833
0.5000	1.3107
0.6000	1.4762
0.7000	1.6848
0.8000	1.9427
0.9000	2.2581
1.0000	2.6413

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

Δημιουργούμε το διάνυσμα y με τις τιμές της λύσης στα σημεία του x

$$y_i = 3 * \exp(x_i^2/2) - 2$$

Στον επόμενο πίνακα δίνεται η αριθμητική και η ακριβής λύση στα σημεία του x

x_i	y_i	$y(x_i)$
0	1.0000	1.0000
0.1000	1.0000	1.0150
0.2000	1.0300	1.0606
0.3000	1.0906	1.1381
0.4000	1.1833	1.2499
0.5000	1.3107	1.3994
0.6000	1.4762	1.5917
0.7000	1.6848	1.8329
0.8000	1.9427	2.1314
0.9000	2.2581	2.4979
1.0000	2.6413	2.9462

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

προσθέτουμε μια έξτρα στήλη για την τιμή του απόλυτου σφάλματος $abs(y - yf)$

x_i	y_i	$y(x_i)$	$ y_i - y(x_i) $
0	1.0000	1.0000	0
0.1000	1.0000	1.0150	0.0150
0.2000	1.0300	1.0606	0.0306
0.3000	1.0906	1.1381	0.0475
0.4000	1.1833	1.2499	0.0665
0.5000	1.3107	1.3994	0.0888
0.6000	1.4762	1.5917	0.1155
0.7000	1.6848	1.8329	0.1481
0.8000	1.9427	2.1314	0.1887
0.9000	2.2581	2.4979	0.2398
1.0000	2.6413	2.9462	0.3048

Το μέγιστο απόλυτο σφάλμα είναι 0.3048.

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

Στην επόμενη εικόνα δίνεται η αριθμητική και η ακριβής λύση του προβλήματος $\text{plot}(x,y,x,yt)$

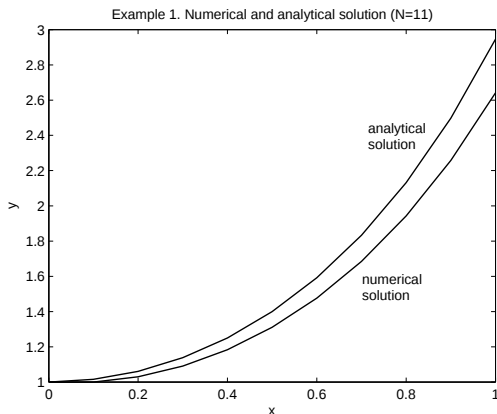
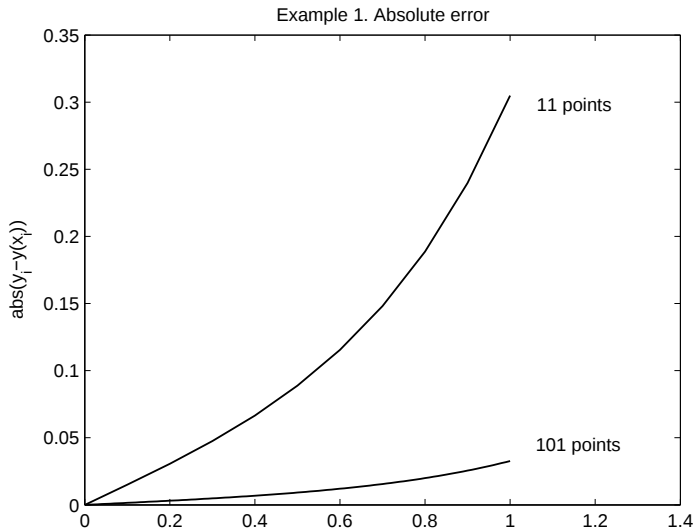


Figure: Problem 1. Numerical and analytical solution.

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

Σχεδίαση του απόλυτου σφάλματος $|y_i - y(x_i)|$ `plot(x,abs(y-yt))`



Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

Παρατηρούμε ότι

- για $N = 100$ το μέγιστο απόλυτο σφάλμα είναι 0.0327
- για $N = 1000$ το μέγιστο απόλυτο σφάλμα είναι 0.0033

x_i	$y_i(N = 10)$	$y_i(N = 100)$	$y_i(N = 1000)$	$y(x_i)$
0	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
0.1000	1.0000	1.0135	1.0149	1.0150
0.2000	1.0300	1.0575	1.0603	1.0606
0.3000	1.0906	1.1332	1.1376	1.1381
0.4000	1.1833	1.2430	1.2492	1.2499
0.5000	1.3107	1.3903	1.3985	1.3994
0.6000	1.4762	1.5796	1.5904	1.5917
0.7000	1.6848	1.8173	1.8313	1.8329
0.8000	1.9427	2.1115	2.1294	2.1314
0.9000	2.2581	2.4724	2.4953	2.4979
1.0000	2.6413	2.9135	2.9429	2.9462

Προβλήματα δοκιμής - Πρόβλημα 1

το απόλυτο σφάλμα

x_i	error ($N = 10$)	error ($N = 100$)
0	0	0
0.1000	0.0150	0.0015
0.2000	0.0306	0.0031
0.3000	0.0475	0.0048
0.4000	0.0665	0.0068
0.5000	0.0888	0.0092
0.6000	0.1155	0.0120
0.7000	0.1481	0.0155
0.8000	0.1887	0.0199
0.9000	0.2398	0.0255
1.0000	0.3048	0.0327

Πρώιμες μέθοδοι - Μέθοδος Euler

Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών

$$y' = f(x, y(x)), \quad y(x_0) = y_0.$$

Όπως είδαμε και παραπάνω μπορούμε να βρούμε μια αριθμητική μέθοδο από την προσέγγιση του ολοκληρώματος

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

από τον κανόνα του ορθογωνίου

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \approx h f(x_n, y(x_n)).$$

Για την διαφορική εξίσωση έχουμε $y'(x) = f(x, y(x))$ έτσι μπορούμε να γράψουμε

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

τότε

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) \approx h f(x_n, y(x_n)).$$

έτσι βρίσκουμε ξανά την μέθοδο του Euler

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

Πρώιμες μέθοδοι - Έμμεση μέθοδος του Euler

Εναλλακτικά μπορούμε να πάρουμε τον κανόνα του ορθογωνίου στο σημείο $f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \approx h f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$$

η μέθοδος που προκύπτει είναι η

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

Παρατηρούμε ότι το y_{n+1} εμφανίζεται επίσης στο δεξί μέλος, αυτή είναι μια έμμεση μέθοδος. Αυτή είναι η έμμεση μέθοδος του Euler.

Πρώιμες μέθοδοι - Μέθοδος του Heun

Αν προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα με την μέθοδο του τραπεζίου έχουμε

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \approx \frac{1}{2} h (f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))).$$

τότε

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) \approx \frac{1}{2} h (f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))).$$

χρησιμοποιώντας για $y(x_{n+1})$ και $y(x_n)$ τις εκτιμήσεις y_{n+1} και y_n αντίστοιχα παίρνουμε την ακόλουθη μέθοδο

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

οποία επίσης είναι μια έμμεση μέθοδος.

Προκειμένου να μετατρέψουμε την μέθοδο σε άμεση αντικαθιστούμε το y_{n+1} με ένα βήμα Euler.

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

Οι τελευταίες δύο μέθοδοι παρουσιάστηκαν από τον Heun το 1900.

Πρώιμες μέθοδοι - Μέθοδος του Heun

Παρατηρούμε ότι για την μέθοδο του Heun

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

χρειάζεται να υπολογίσουμε το $f(x, y)$ σε δύο σημεία (x_n, y_n) και $(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n))$. Μπορούμε να γράψουμε την μέθοδο ως εξής

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n) \\ k_2 &= f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n)) = f(x_n + h, y_n + h k_1) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2} (k_1 + k_2). \end{aligned}$$

Η μέθοδος του Euler χρειάζεται έναν υπολογισμό για την $f(x, y)$ και μπορεί να γραφεί

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n) \\ y_{n+1} &= y_n + h k_1 \end{aligned}$$

Οι ποσότητες k_1 και k_2 καλούνται στάδια της μεθόδου.

Πρώιμες μέθοδοι - Μέθοδος του Runge

Για την μέθοδο του Euler χρησιμοποιούμε την προσέγγιση

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \approx hf(x_n, y(x_n)).$$

Θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \approx f\left(x_n + \frac{h}{2}, y\left(x_n + \frac{h}{2}\right)\right).$$

αν προσεγγίσουμε το $y\left(x_n + \frac{h}{2}\right)$

$$y\left(x_n + \frac{h}{2}\right) \approx y(x_n) + \frac{h}{2} y'(x_n) = y(x_n) + \frac{h}{2} f(x_n, y_n)$$

βρίσκουμε την ακόλουθη μέθοδο

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

Αυτή η μέθοδος έχει παραχθεί από τον Runge το 1895 και είναι δεύτερης τάξης.

Πρώιμες μέθοδοι - Μέθοδοι Heun, Runge

Μπορούμε να γράψουμε τη μέθοδο του Runge ως

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_n, y_n) \\k_2 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} k_1\right) \\y_{n+1} &= y_n + h k_2\end{aligned}$$

Η μέθοδος του Heun και του Runge έχουν τη γενική μορφή

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_n, y_n) \\k_2 &= f(x_n + ch, y_n + ha k_1) \\y_{n+1} &= y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2)\end{aligned}$$

ενώ οι συντελεστές είναι: για τη μέθοδο του Heun : $c = 1, \quad a = 1, \quad b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$

για τη μέθοδο του Runge : $c = \frac{1}{2}, \quad a = \frac{1}{2}, \quad b_1 = 0, \quad b_2 = 1.$

Η διατύπωση του Kutta - 1901

Ο Kutta το 1901 διατύπωσε την γενική μορφή των μεθόδων που σήμερα ονομάζονται Runge-Kutta μέθοδοι.

Ορισμός

Έστω s ο αριθμός των σταδίων και c_i, a_{ij}, b_i πραγματικοί συντελεστές. Τότε η μέθοδος

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1)$$

$$k_3 = f(x_n + c_3 h, y_n + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2))$$

$$\vdots$$

$$k_s = f(x_n + c_s h, y_n + h(a_{s1} k_1 + a_{s2} k_2 + \cdots + a_{s,s-1} k_{s-1}))$$

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + \cdots + b_s k_s)$$

ονομάζεται μια s -σταδίων άμεση μέθοδος Runge-Kutta .

Ο Κυπα επίσης έκανε και την υπόθεση

$$\begin{aligned}c_2 &= a_{21} \\c_3 &= a_{31} + a_{32} \\&\vdots \\c_s &= a_{s1} + a_{s2} + \cdots + a_{s,s-1}\end{aligned}$$

η οποία είναι γνωστή ως συνθήκη γραμμής.

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$$

δηλαδή όλα τα σημεία όπου η f υπολογίζεται είναι προσεγγίσεις πρώτης τάξης στη λύση.

Πίνακας Butcher

Ο John Butcher έδωσε την θεωρητική διατύπωση των μεθόδων Runge-Kutta (RK) σε μια σειρά άρθρων του από το 1963.

Παρουσίασε τον πίνακα για την αναπαράσταση των μεθόδων Runge-Kutta (Butcher array ή Butcher tableau). Για την άμεση μέθοδο Kutta ο πίνακας Butcher είναι

0					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$		
c_s	a_{s1}	a_{s2}	$\cdots$	$a_{s,s-1}$	
	b_1	b_2	$\cdots$	b_{s-1}	b_s

Για τις μεθόδους που παρουσιάστηκαν παραπάνω (Euler, Heun, Runge) οι πίνακες Butcher είναι

0	0
	1

0	1
	1/2 1/2

0	1/2
	0 1

Τάξη μεθόδων RK

Ορισμός

Μια μέθοδος Runge-Kutta έχει τάξη p αν για επαρκώς ομαλά προβλήματα ισχύει:

$$\|y(x_n + h) - y_{n+1}\| \leq Kh^{p+1}$$

δηλαδή το ανάπτυγμα Taylor για την ακριβή λύση $y(x_n + h)$ και για την αριθμητική λύση y_{n+1} συμπίπτουν μέχρι (συμπεριλαμβανομένου) τον όρο h^p .

Η παραπάνω απαίτηση μας δίνει σχέσεις μεταξύ των συντελεστών της μεθόδου (a_{ij} , c_i , b_i) οι οποίες ονομάζονται συνθήκες αλγεβρικής τάξης.

Ανάπτυγμα Taylor για την ακριβή λύση

Το ανάπτυγμα Taylor για την ακριβή λύση είναι:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x_n) + \dots$$

Από την σχέση $y'(x) = f(x, y(x))$, για την δεύτερη παράγωγο έχουμε

$$y''(x) = \frac{d}{dx}f(x, y(x)) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = f_x + f_y f$$

Έχουμε χρησιμοποιήσει τον συμβολισμό

$$f_x = \frac{\partial f}{\partial x}, \quad f_y = \frac{\partial f}{\partial y}.$$

Ανάπτυγμα Taylor για την ακριβή λύση

Για την τρίτη παράγωγο

$$\begin{aligned}y^{(3)}(x) &= \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f \right) = \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y} f \right) = \\&= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} f + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} f^2 + f_y (f_x + f_y f) \\y^{(3)}(x) &= f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_y f_x + f_y^2 f\end{aligned}$$

όπου

$$f_{xx} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \quad f_{yy} = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}, \quad f_{xy} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$$

Αντικαθιστούμε στο ανάπτυγμα Taylor για την ακριβή λύση

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2} (f_x + f_y f) + \frac{h^3}{6} (f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_y f_x + f_y^2 f) + O(h^4)$$

Ανάπτυγμα Taylor για την ακριβή λύση

Θεωρούμε την μέθοδο Runge-Kutta με 2 στάδια:

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_n, y_n) & k_2 &= f(x_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1) \\ y_{n+1} &= y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2)\end{aligned}$$

Η σειρά Taylor για το k_2 είναι

$$\begin{aligned}k_2 &= f(x_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1) = \\ &= f(x_n, y_n) + (h c_2 f_x + h a_{21} k_1 f_y) + \left(\frac{1}{2} (c_2 h)^2 f_{xx} + (c_2 h)(h a_{21} k_1) f_{xy} + \frac{1}{2} (h a_{21} k_1)^2 f_{yy} \right) + O(h^3) \\ &= f(x_n, y_n) + h(c_2 f_x + a_{21} k_1 f_y) + h^2 \left(\frac{c_2^2}{2} f_{xx} + c_2 a_{21} f_{xy} f + \frac{a_{21}^2}{2} f_{yy} f^2 \right) + O(h^3)\end{aligned}$$

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 + b_2)f + h^2 b_2 (c_2 f_x + a_{21} f_y f) + \frac{1}{2} h^3 b_2 (c_2^2 f_{xx} + 2c_2 a_{21} f f_{xy} + a_{21}^2 f^2 f_{yy}) + O(h^4)$$

Συγκρίνουμε με την σειρά Taylor για την ακριβή λύση

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2} (f_x + f_y f) + \frac{h^3}{6} (f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_x f_y + f_y^2 f) + O(h^4)$$

$$b_1 + b_2 = 1 \quad b_2 c_2 = \frac{1}{2} \quad b_2 a_{21} = \frac{1}{2}$$

Συνθήκες για την δεύτερη τάξη

Οι συνθήκες για την δεύτερη τάξη είναι

$$b_1 + b_2 = 1 \quad b_2 c_2 = \frac{1}{2} \quad c_2 = a_{21}$$

Παρατηρούμε ότι οι μέθοδοι Heun και Runge είναι δεύτερης τάξης μέθοδοι.
Έχουμε 3 συνθήκες και 4 συντελεστές

$$b_1 = 1 - \frac{1}{2c_2}$$

$$b_2 = \frac{1}{2c_2}$$

$$a_{21} = c_2$$

Ο πίνακας Butcher είναι:

0		
c_2	c_2	
	$1 - \frac{1}{2c_2}$	$\frac{1}{2c_2}$

Για $c_2 = 1$ έχουμε τη μέθοδο του Heun (κανόνας τραπεζίου),
για $c = 1/2$ ο κανόνας του ενδιάμεσου σημείου
για $c_2 = 2/3$ (RK2c).

PK μέθοδοι με 3 στάδια

Δεν μπορούμε να βρούμε μέθοδο τρίτης τάξης με 2 στάδια γιατί στην αριθμητική λύση y_{n+1} έχουμε τους όρους f_{xx} , $f_{xy}f$, $f_{yy}f^2$ ενώ για την ακριβή λύση $y(x_n + h)$ βρίσκουμε τους όρους f_{xx} , $f_{xy}f$, $f_{yy}f^2$, $f_x f_y$, $f_y^2 f$.

Θεωρούμε μια μέθοδο Runge-Kutta με 3 στάδια:

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1)$$

$$k_3 = f(x_n + c_3 h, y_n + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2))$$

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + b_3 k_3)$$

ο πίνακας Butcher είναι

0		
c_2	a_{21}	
c_3	a_{31}	a_{32}
	b_1	$b_2 \quad b_3$

RK μέθοδοι με 3 στάδια

Παραπάνω βρήκαμε το ανάπτυγμα Taylor για k_2 , τώρα βρίσκουμε το k_3

$$\begin{aligned}k_3 &= f(x_n + c_3 h, y_n + h(a_{31}k_1 + a_{32}k_2)) \\&= f + h(c_3 f_x + (a_{31}k_1 + a_{32}k_2)f_y) + \\&\quad + \frac{h^2}{2}(c_3^2 f_{xx} + 2c_3(a_{31}k_1 + a_{32}k_2)f_{xy} + (a_{31}k_1 + a_{32}k_2)^2 f_{yy}) + O(h^3)\end{aligned}$$

Στα k_2, k_3 θέλουμε τους όρους των h και h^2 . Υπενθυμίζετε ότι για το k_2 :

$$k_2 = f + h(c_2 f_x + a_{21} f_y f) + \frac{h^2}{2}(c_2^2 f_{xx} + 2c_2 a_{21} f_{xy} f + a_{21}^2 f_{yy} f^2) + O(h^3)$$

Στο k_3 όπου το k_2 πολλαπλασιάζεται με h χρησιμοποιούμε $k_2 = f + h(c_2 f_x + a_{21} k_1 f_y) + O(h^2)$
όπου το k_2 πολλαπλασιάζεται με h^2 χρησιμοποιούμε $k_2 = f + O(h)$.

RK μέθοδοι με 3 στάδια

Για τον όρο

$$(a_{31}k_1 + a_{32}k_2)^2 = a_{31}^2 f^2 + 2a_{31}a_{32}fk_2 + a_{32}^2 k_2^2$$

που πολλαπλασιάζεται με h^2 γράφουμε

$$\begin{aligned}(a_{31}k_1 + a_{32}k_2)^2 &= a_{31}^2 f^2 + 2a_{31}a_{32}f(f + O(h)) + a_{32}^2 (f + O(h))^2 \\ &= (a_{31} + a_{32})^2 f^2 + O(h)\end{aligned}$$

Τότε

$$\begin{aligned}k_3 &= f + h(c_3 f_x + (a_{31}f + a_{32}(f + h(c_2 f_x + a_{21}f_y f) + O(h^2))))f_y + \\ &\quad + \frac{h^2}{2}(c_3^2 f_{xx} + 2c_3 a_{31} f_{xy} f + 2c_3 a_{32}(f + O(h))f_{xy} + (a_{31} + a_{32})^2 f_{yy} f^2) + O(h^3)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}k_3 &= f + h(c_3 f_x + (a_{31} + a_{32})f_y f) + \\ &\quad h^2\left(c_2 a_{32} f_x f_y + c_2 a_{21} f_y^2 f + \frac{c_3^2}{2} f_{xx} + c_3(a_{31} + a_{32})f_{xy} f + \frac{1}{2}(a_{31} + a_{32})^2 f_{yy} f^2\right) + O(h^3)\end{aligned}$$

Σύγκριση ακριβούς και αριθμητικής λύσης

Τέλος αντικαθιστούμε στην αριθμητική λύση και παίρνουμε

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2) + hb_3 k_3 \\&= y_n + h(b_1 + b_2)f + h^2 b_2 (c_2 f_x + a_{21} f f_y) + \frac{h^3}{2} b_2 (c_2^2 f_{xx} + 2c_2 a_{21} f f_{xy} + a_{21}^2 f^2 f_{yy}) + \\&\quad hb_3 f + h^2 b_3 (c_3 f_x + (a_{31} + a_{32}) f_y f) + \\&\quad h^3 b_3 \left(c_2 a_{32} f_x f_y + c_2 a_{21} f_y^2 f + \frac{c_3^2}{2} f_{xx} + c_3 (a_{31} + a_{32}) f_{xy} f + \frac{1}{2} (a_{31} + a_{32})^2 f_{yy} f^2 \right) + O(h^4)\end{aligned}$$

ή

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + h(b_1 + b_2 + b_3)f + h^2 ((b_2 c_2 + b_3 c_3) f_x + (b_2 a_{21} + b_3 (a_{31} + a_{32})) f_y f) + \\&+ \frac{h^3}{2} (b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2) f_{xx} + \frac{h^3}{2} (b_2 a_{21}^2 + b_3 (a_{31} + a_{32})^2) f_{yy} f^2 \\&+ h^3 (b_2 c_2 a_{21} + b_3 c_3 (a_{31} + a_{32})) f_{xy} f + h^3 b_3 a_{32} c_2 f_x f_y + h^3 b_3 a_{32} a_{21} f_y^2 f + O(h^4)\end{aligned}$$

Σύγκριση ακριβούς και αριθμητικής λύσης

$$\begin{aligned}
 y(x_n + h) &= y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2} (f_x + f_y f) + \frac{h^3}{6} (f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f_y^2 f) + O(h^4) \\
 y_{n+1} &= y_n + h(b_1 + b_2 + b_3)f + h^2 ((b_2 c_2 + b_3 c_3)f_x + (b_2 a_{21} + b_3(a_{31} + a_{32}))f_y f) + \\
 &+ \frac{h^3}{2} (b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2)f_{xx} + \frac{h^3}{2} (b_2 a_{21}^2 + b_3(a_{31} + a_{32})^2)f_{yy}f^2 \\
 &+ h^3 (b_2 c_2 a_{21} + b_3 c_3(a_{31} + a_{32}))f_{xy}f + h^3 b_3 a_{32} c_2 f_x f_y + h^3 b_3 a_{32} a_{21} f_y^2 f + O(h^4)
 \end{aligned}$$

$$h \quad (f) \quad b_1 + b_2 + b_3 = 1$$

$$h^2 \quad (f_x) \quad b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{1}{2} \quad (ff_y) \quad a_{21} b_2 + (a_{31} + a_{32}) b_3 = \frac{1}{2}$$

$$h^3 \quad (f_{xx}) \quad \frac{1}{2} (b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2) = \frac{1}{6} \quad (f_{yy}f^2) \quad \frac{1}{2} (a_{21}^2 b_2 + (a_{31} + a_{32})^2 b_3) = \frac{1}{6}$$

$$(f_{xy}f) \quad a_{21} b_2 c_2 + (a_{31} + a_{32}) b_3 c_3 = \frac{2}{6} \quad (f_y^2) \quad a_{21} a_{32} b_3 = \frac{1}{6} \quad (f_x f_y f) \quad a_{32} b_3 c_2 = \frac{1}{6}$$

Χρησιμοποιώντας $c_2 = a_{21}$ και $c_3 = a_{31} + a_{32}$ έχουμε τις ακόλουθες συνθήκες αλγεβρικής τάξης

$$\begin{aligned}
 b_1 + b_2 + b_3 &= 1 & b_2 c_2 + b_3 c_3 &= \frac{1}{2} \\
 b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 &= \frac{1}{3} & b_3 a_{32} c_2 &= \frac{1}{6}
 \end{aligned}$$

Παραδείγματα μεθόδων τρίτης τάξης

Παραδείγματα μεθόδων τρίτης τάξης

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ 2 & 2 & & \\ \hline 3 & 3 & & \\ & & & \\ 2 & 1 & 1 & \\ \hline 3 & 3 & 3 & \\ & & & \\ \hline & 1 & 0 & 3 \\ & 4 & & 4 \end{array}$$

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ 1 & 1 & & \\ \hline 2 & 2 & & \\ & & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ & & & \\ \hline & 1 & 2 & 1 \\ & 6 & 3 & 6 \end{array}$$

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ 1 & 1 & & \\ \hline 3 & 3 & & \\ & & & \\ 2 & 0 & 2 & \\ \hline 3 & & & \\ & & & \\ \hline & 1 & 0 & 3 \\ & 4 & & 4 \end{array}$$

Μέθοδοι RK με 4 στάδια

Μια μέθοδος RK με 4 στάδια έχει τη μορφή

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_n, y_n) \\k_2 &= f(x_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1) \\k_3 &= f(x_n + c_3 h, y_n + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)) \\k_4 &= f(x_n + c_4 h, y_n + h(a_{41} k_1 + a_{42} k_2 + a_{43} k_3)) \\y_{n+1} &= y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + b_3 k_3 + b_4 k_4)\end{aligned}$$

οι συνθήκες έως και τρίτης τάξης είναι:

$$\begin{aligned}b_1 + b_2 + b_3 + b_4 &= 1 & b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_4 c_4 &= \frac{1}{2} \\b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 + b_4 c_4^2 &= \frac{1}{3} & b_3 a_{32} c_2 + b_4(a_{42} c_2 + a_{43} c_3) &= \frac{1}{6}\end{aligned}$$

και για την τέταρτη τάξη

$$\begin{aligned}b_2 c_2^3 + b_3 c_3^3 + b_4 c_4^3 &= \frac{1}{4} & b_3 c_3 a_{32} c_2 + b_4 c_4(a_{42} c_2 + a_{43} c_3) &= \frac{1}{8} \\b_3 a_{32} c_2^2 + b_4(a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) &= \frac{1}{12} & b_4 a_{43} a_{32} c_2 &= \frac{1}{24}\end{aligned}$$

Μέθοδοι RK με 4 στάδια

0				
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	1	-2	2	
	$\frac{1}{6}$	0	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

0				
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$			
$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	1		
1	1	-1	1	
	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{1}{6}$

Η δεύτερη και η τρίτη μέθοδος παρουσιάστηκαν από τον Kutta το 1901.

Η δεύτερη μέθοδος είναι ο κανόνας των 3/8

και η τρίτη μέθοδος είναι κλασσική Kutta μέθοδος τέταρτης τάξης η οποία παραμένει πολύ δημοφιλής.

Δέντρα με ρίζες

Είδαμε ότι καθώς η τάξη μιας μεθόδου Runge-Kutta αυξάνεται, ο αριθμός των συνθηκών αλγεβρικής τάξης αυξάνεται γρηγορότερα και οι συνθήκες γίνονται όλο και πιο περίπλοκες.

Επίσης έχουμε δει ότι οι Kutta και Nystrom κατασκεύασαν μεθόδους 5ης τάξης με 6 στάδια.

Τα ακόλουθα ερωτήματα προκύπτουν φυσικά:

Πόσες συνθήκες τάξης χρειάζονται για μια μέθοδο για να πετύχει μια συγκεκριμένη τάξη;

Πόσα στάδια χρειάζονται για να είναι μια μέθοδος συγκεκριμένης τάξης;

Αυτές οι ερωτήσεις έχουν απαντηθεί από τον John Butcher, ο οποίος έδωσε επίσης έναν κομψό τρόπο για την εξαγωγή των συνθηκών τάξης χρησιμοποιώντας ειδικά γραφήματα τα δέντρα με ρίζες.

Δέντρα με ρίζες

Τα δέντρα με ρίζες είναι απλά συνδυαστικά γραφήματα, τα οποία είναι συνδεδεμένα, δεν έχουν κύκλους και μια συγκεκριμένη κορυφή ορίζεται ως ρίζα. Η τάξη ενός δέντρου είναι ο αριθμός των κορυφών σε αυτό το δέντρο.

Ένα δέντρο με ρίζες είναι ένα ζεύγος (V, E) , όπου το V είναι ένα πεπερασμένο σύνολο κορυφών και το E ένα σύνολο κόμβων. Το E αποτελείται από διατεταγμένα ζεύγη μελών του V

- κάθε μέλος του V , εκτός από ένα στοιχείο που είναι γνωστό ως ρίζα, εμφανίζεται ακριβώς μία φορά μεταξύ του δεύτερου αριθμού σε κάθε ζεύγος E ,
- η κορυφή ρίζας δεν εμφανίζεται ως δεύτερο μέλος οποιουδήποτε ζεύγους,
- το γράφημα είναι συνδεδεμένο

Για μια δεδομένη κορυφή το $[x, y]$ το x ονομάζεται γονέας του y και το y ονομάζεται το παιδί του x .

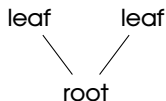
Μια κορυφή μπορεί να έχει ένα ή περισσότερα παιδιά.

Μια κορυφή που δεν έχει παιδί λέγεται φύλλο.

Κάθε κορυφή εκτός από τη ρίζα έχει γονέα, η ρίζα δεν έχει γονέα.

Δέντρα με ρίζες

Παραδείγματα δέντρων



Συμβολίζουμε το απλό δέντρο με μία μόνο κορυφή ως τ .

Συμβολίζουμε το δέντρο t ως $[t_1, t_2, \dots, t_m]$ όπου $t_1, t_2, \dots, t_m$ είναι τα ασύνδετα δέντρα που προκύπτουν αν απομακρύνουμε τη ρίζα από το t όπου m είναι ο αριθμός των παιδιών της ρίζας.

Αν κάποια από τα υποδέντρα αυτά είναι ίδια χρησιμοποιούμε το συμβολισμό της δύναμης $[t_1^{n_1}, t_2^{n_2}, \dots, t_m^{n_m}]$ που δηλώνει ότι το υποδέντρο t_i εμφανίζεται n_i φορές

Υπάρχει μόνο ένα δέντρο με δύο κορυφές $[\tau]$.



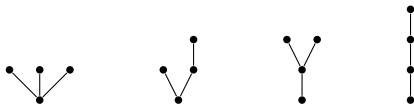
Δέντρα τρίτης και τέταρτης τάξης

Υπάρχουν 2 δέντρα τρίτης τάξης $[\tau^2]$ και $[[\tau]]$



και 4 δέντρα τέταρτης τάξης

$[\tau^3]$ $[\tau, [\tau]]$ $[[\tau^2]]$ $[[[\tau]]]$



Δέντρα με ρίζες

Τάξη

Για κάθε δέντρο $t = [t_1^{n_1}, t_2^{n_2}, \dots, t_m^{n_m}]$ ορίζουμε την **τάξη** $r(t)$ ίση με τον αριθμό των κορυφών

$$r(\tau) = 1$$

$$r(t) = 1 + n_1 r(t_1) + n_2 r(t_2) + \dots + n_m r(t_m)$$

ή

$$r(t) = 1 + \sum_{i=1}^m n_i r(t_i)$$

Συμμετρία και πυκνότητα

Συμμετρία

Για κάθε δέντρο $t = [t_1^{n_1}, t_2^{n_2}, \dots, t_m^{n_m}]$ ορίζουμε την **συμμετρία** $\sigma(t)$

$$\begin{aligned}\sigma(\tau) &= 1 \\ \sigma(t) &= n_1! n_2! \cdots n_m! \sigma(t_1)^{n_1} \sigma(t_2)^{n_2} \cdots \sigma(t_m)^{n_m} \\ \text{ορ } \sigma(t) &= \prod_{i=1}^m n_i! \sigma(t_i)^{n_i}\end{aligned}$$

Πυκνότητα

Για κάθε δέντρο $t = [t_1^{n_1}, t_2^{n_2}, \dots, t_m^{n_m}]$ ορίζουμε την **πυκνότητα** $\gamma(t)$ το γινόμενο των τάξεων όλων των δέντρων που ξεκινούν από κάθε κορυφή.

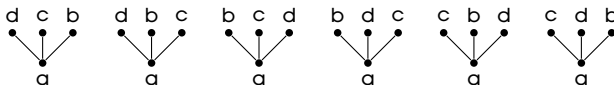
$$\begin{aligned}\gamma(\tau) &= 1 \\ \gamma(t) &= r(t) \gamma(t_1)^{n_1} \gamma(t_2)^{n_2} \cdots \gamma(t_m)^{n_m} \\ \text{ορ } \gamma(t) &= r(t) \prod_{i=1}^m \gamma(t_i)^{n_i}\end{aligned}$$

Παραδείγματα συμμετρίας

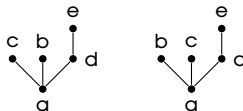
Συμμετρία είναι ο πλήθος των τρόπων με τους οποίους μπορούμε να ονομάσουμε τις κορυφές των συμμετρικών υποδέντρων ενός δέντρου. Για παράδειγμα για το δέντρο $[t^2]$ μπορούμε να ονομάσουμε με δύο τρόπους τις συμμετρικές κορυφές $\sigma([t^2]) = 2$.



Για το δέντρο $[t^3]$ έχουμε $\sigma([t^3]) = 3! = 6$.

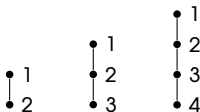


Επίσης $\sigma([t^2[t]]) = 2$ αφού



Παραδείγματα για την πυκνότητα

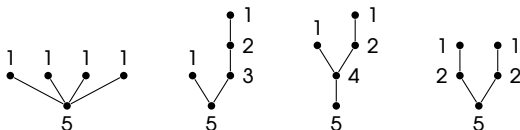
Θεωρούμε τα δέντρα $[\tau]$, $[[\tau]]$, $[[[\tau]]]$ σε κάθε κορυφή αντιστοιχούμε την τάξη του υποδέντρου που ξεκινά από αυτή



οι πυκνότητες είναι

$$\gamma([\tau]) = 2! \quad \gamma[[\tau]] = 3! \quad \gamma[[[\tau]]] = 4!$$

Ας θεωρήσουμε τα δέντρα πέμπτης τάξης



οι πυκνότητες είναι 5, 30, 40 και 20 αντίστοιχα.

Δέντρα με ρίζες

Έχει αποδειχθεί από τον Butcher ότι ο αριθμός των διαφορετικών τρόπων $a(t)$ αρίθμησης ενός δέντρου t είναι

$$a(t) = \frac{r(t)!}{\sigma(t) \gamma(t)}$$

Εδώ έρχετε το ερώτημα σχετικά με τον αριθμό των δέντρων με ρίζες για μια συγκεκριμένη τάξη. Το ακόλουθο θεώρημα έχει αποδειχθεί από τον Butcher.

Θεώρημα

Έστω ∂_k για $k = 1, 2, \dots$ συμβολίζει τον αριθμό των δέντρων με ρίζες με ακριβώς k κορυφές. Τότε,

$$\partial_1 + \partial_2 x + \partial_3 x^2 + \dots = (1 - x)^{-\partial_1} (1 - x^2)^{-\partial_2} (1 - x^3)^{-\partial_3} \dots$$

Τάξη	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Αριθμός	1	1	2	4	9	20	48	115	286	719

Δέντρα με ρίζες

$r(t)$		t		$\sigma(t)$	$\gamma(t)$
1	t_1	•	τ	1	1
2	t_2	• •	$[\tau]$	1	2
3	t_{31}	• • •	$[\tau^2]$	2	3
3	t_{32}	• • •	$[[\tau]]$	1	6

Δέντρα με ρίζες

$r(t)$		t		$\sigma(t)$	$\gamma(t)$
4	t_{41}		$[\tau^3]$	6	4
4	t_{42}		$[\tau[\tau]]$	1	8
4	t_{43}		$[[\tau^2]]$	2	12
4	t_{44}		$[[[\tau]]]$	1	24

Δέντρα με ρίζες

	t	$\sigma(t)$	$\gamma(t)$
t_{51}	 $[\tau^4]$	24	5
t_{52}	 $[\tau^2[\tau]]$	2	10
t_{53}	 $[\tau[\tau^2]]$	2	15
t_{54}	 $[\tau[[\tau]]]$	1	30
t_{55}	 $[[\tau]^2]$	2	20

Δέντρα με ρίζες

	t	$\sigma(t)$	$\gamma(t)$		t	$\sigma(t)$	$\gamma(t)$
t_{56}	 $[[\tau^3]]$	6	20	t_{58}	 $[[[\tau^2]]]$	2	60
t_{57}	 $[[\tau[\tau]]]$	1	40	t_{59}	 $[[[[\tau]]]]$	1	120

Δέντρα και στοιχειώδη διαφορικά

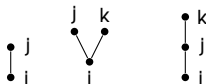
Στην σειρά Taylor της ακριβούς λύσης εμφανίζονται τα στοιχειώδη διαφορικά

$$F_1^{(1)}, \quad F_1^{(2)}, \quad F_1^{(3)}, \quad F_2^{(3)}$$

Ο Butcher έδειξε ότι μπορούμε να αντιστοιχίσουμε κάθε στοιχειώδες διαφορικό σε ένα δέντρο. Μπορούμε να βρούμε ένα τρόπο αντιστοίχισης των στοιχειωδών διαφορικών έως και τρίτης τάξης με δέντρα. Έτσι έχουμε:

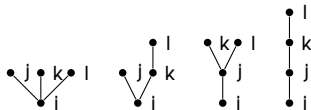
- Το στοιχειώδες διαφορικό πρώτης τάξης f^i αντιστοιχεί στο τετριμμένο δέντρο τ .
- Το στοιχειώδες διαφορικό δεύτερης τάξης f_j^i αντιστοιχεί στο δέντρο $[\tau]$.
- Τα στοιχειώδη διαφορικά τρίτης τάξης $f_{jk}^i f^j f^k$ και $f_j^i f_k^j f^k$ αντιστοιχούν στα δέντρα $[\tau^2]$ και $[[\tau]]$.

Σε κάθε κορυφή δίνουμε έναν δείκτη



Δέντρα και στοιχειώδη διαφορικά

Τα δέντρα τέταρτης τάξης



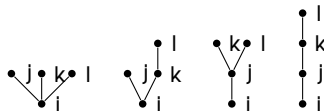
αντιστοιχούν στα στοιχειώδη διαφορικά

$$F_1^{(4)} = f_{jkl}^i f^j f^k f^l, \quad F_2^{(4)} = f_{jk}^i f_l^j f_k^l f^i, \quad F_3^{(4)} = f_j^i f_{kl}^j f^k f^l, \quad F_4^{(4)} = f_j^i f_k^j f_l^k f^i$$

Γενικά

- f^i, f^j, f^k αντιστοιχούν στα φύλλα,
- αν από μία κορυφή i ξεκινά ένα κλαδί που καταλήγει στην κορυφή j τότε στην κορυφή i αντιστοιχεί το f_j^i
- αν από μία κορυφή i ξεκινούν δύο κλαδιά που καταλήγουν στις κορυφές j και k τότε στην κορυφή i αντιστοιχεί το f_{jk}^i
- αν από μία κορυφή i ξεκινούν τρία κλαδιά που καταλήγουν στις κορυφές j, k και l τότε στην κορυφή i αντιστοιχεί το f_{jkl}^i

Δέντρα με ρίζες και στοιχειώδη διαφορικά



προκύπτουν τα αντίστοιχα στοιχειώδη διαφορικά τέταρτης τάξης,

$$F_1^{(4)} = f_{jkl}^j f^j f^k f^l, \quad F_2^{(4)} = f_{jk}^j f^j f_l^k f^l, \quad F_3^{(4)} = f_j^j f_{kl}^j f^k f^l, \quad F_4^{(4)} = f_j^j f_k^j f_l^k f^l$$

Δέντρα με ρίζες και στοιχειώδη διαφορικά

Μπορούμε να το επαληθεύσουμε παραγωγίζοντας τα διαφορικά τρίτης τάξης $F_1^{(3)}$ και $F_2^{(3)}$ βλέπουμε ότι το $F_2^{(4)}$ εμφανίζεται 3 φορές. Για τους συντελεστές έχουμε

$$a_1^{(4)} = 1 \quad a_2^{(4)} = 3 \quad a_3^{(4)} = 1 \quad a_4^{(4)} = 1$$

Ορισμός

Για ένα δέντρο $t = [t_1, t_2, \dots, t_m]$ και μια συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ αναλυτική σε μια περιοχή του y ορίζουμε το στοιχειώδες διαφορικό

$$F^i(\tau)(y) = f^i$$
$$F^i([t_1, t_2, \dots, t_m]) = f_{j_1, j_2, \dots, j_m}^i F^{(j_1)}(t_1) F^{(j_2)}(t_2) \cdots F^{(j_m)}(t_m)$$

Ο αριθμός των στοιχειωδών διαφορικών τάξης p συμβολίζεται με η_p και ισούται με τον αριθμό των δέντρων τάξης p .

Δέντρα με ρίζες και στοιχειώδη διαφορικά

Επίσης ο Butcher αντιστοίχησε σε κάθε δέντρο t ένα πολυώνυμο που περιλαμβάνει τους συντελεστές b_i , a_{ij} και c_i της αριθμητικής μεθόδου

$$\Phi(t) = \sum_i b_i \Phi_i(t),$$

όπου

$$\Phi_i(t) = \sum_{j,k,l,\dots} a_{ij} a_{jk} a_{kl} \cdots .$$

Τα $\Phi_i(t)$ ονομάζονται στοιχειώδη βάρη.

- η ρίζα αντιστοιχεί στο διάνυσμα b ,
- τα φύλλα στο διάνυσμα c ,
- όλες οι άλλες κορυφές στον πίνακα A .

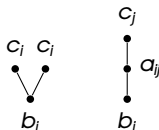
Δέντρα με ρίζες και στοιχειώδη βάρη

Δέντρα και στοιχειώδη βάρη

- Το πρώτης τάξης δέντρο τ αντιστοιχεί $\sum_{i=1}^s b_i$.
- Το δεύτερης τάξης δέντρο t_{21} και αντιστοιχεί $\sum_{i=1}^s b_i c_i$.



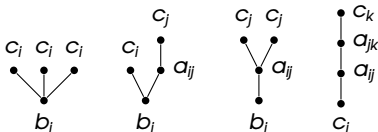
- Τα δέντρα τρίτης τάξης t_{31} και t_{32}



στα στοιχειώδη βάρη $\sum_{i=1}^s b_i c_i^2$ ανδ $\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j$.

Δέντρα με ρίζες και στοιχειώδη βάρη

Τα δέντρα τέταρτης τάξης

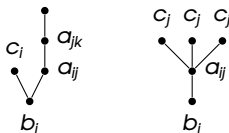


στα στοιχειώδη βάρη

$$\begin{aligned}\Phi(t_{41}) &= \sum_i^s b_i c_i^3 & \Phi(t_{42}) &= \sum_{i,j=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j \\ \Phi(t_{43}) &= \sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j^2 & \Phi(t_{44}) &= \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} c_k\end{aligned}$$

Δέντρα με ρίζες και στοιχειώδη βάρη

Για τα πέμπτης τάξης δέντρα t_{54} και t_{56}



τα στοιχειώδη βάρη είναι

$$\Phi(t_{54}) = \sum_{i,j,k=1}^s b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k \quad \Phi(t_{56}) = \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} c_j^3$$

Τάξη μεθόδων RK - στοιχειώδη βάρη

Το ακόλουθο θεώρημα δόθηκε από τον Butcher

Θεώρημα

Μια μέθοδος Runge-Kutta είναι τάξης p αν

$$\Phi(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$$

για όλα τα δέντρα τάξης $\leq p$.

Συνθήκες τάξης μεθόδων RK με χρήση πινάκων

Ένας βολικός τρόπος για να γράψουμε τις συνθήκες τάξης είναι με τη χρήση πινάκων.
Για μια μέθοδο 2 σταδίων

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} c_1 & 0 \\ 0 & c_2 \end{pmatrix}, \quad e = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

για άμεσες μεθόδους

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & c_2 \end{pmatrix}$$

Τότε οι συνθήκες για την πρώτη και δεύτερη τάξη είναι

$$b^T e = 1 \quad b^T C e = \frac{1}{2}$$

Συνθήκες τάξης μεθόδων RK με χρήση πινάκων

Για μια μέθοδο 3 σταδίων

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} c_1 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 \end{pmatrix}, \quad e = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

για άμεση μέθοδο

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 \end{pmatrix}$$

τότε οι συνθήκες τάξης είναι

$$b^T e = 1 \quad b^T C e = \frac{1}{2} \quad b^T C^2 e = \frac{1}{3} \quad b^T A C e = \frac{1}{6}$$

Συνθήκες τάξης μεθόδων RK με χρήση πινάκων

Μέθοδοι με τέσσερα στάδια

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} c_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_4 \end{pmatrix}$$

για άμεση μέθοδο

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_4 \end{pmatrix}$$

Οι συνθήκες για την τέταρτη τάξη είναι

$$b^T C^3 e = \frac{1}{4} \quad b^T C A C e = \frac{1}{8}$$

$$b^T A C^2 e = \frac{1}{12} \quad b^T A A C e = \frac{1}{24}$$

Συνθήκες τάξης

$$\begin{array}{ll} t_1 & \sum_{i=1}^s b_i = 1 \\ t_{21} & \sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2} \end{array} \quad \begin{array}{l} b^T e = 1 \\ b^T C e = \frac{1}{2} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} t_{31} & \sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3} \\ & b^T C^2 e = \frac{1}{3} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} t_{32} & \sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6} \\ & b^T A C e = \frac{1}{6} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} t_{41} & \sum_{i=1}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{4} \\ & b^T C^3 e = \frac{1}{2} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} t_{42} & \sum_{i,j=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8} \\ & b^T C A C e = \frac{1}{8} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} t_{43} & \sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12} \\ & b^T A C^2 e = \frac{1}{12} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} t_{44} & \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24} \\ & b^T A^2 C e = \frac{1}{24} \end{array}$$

Συνθήκες τάξης

$$t_{51} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i c_i^4 = \frac{1}{5}$$

$$b^T C^4 e = \frac{1}{5}$$

$$t_{52} \quad \sum_{i,j=1}^s b_i c_i^2 a_{ij} c_j = \frac{1}{10}$$

$$b^T C^2 A C e = \frac{1}{10}$$

$$t_{53} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15}$$

$$b^T C A C^2 e = \frac{1}{15}$$

$$t_{54} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{30}$$

$$b^T C A^2 C e = \frac{1}{30}$$

$$t_{55} \quad \sum_{i=1}^s b_i \left(\sum_{j=1}^4 a_{ij} c_j \right)^2 = \frac{1}{20}$$

$$b^T ((A C e) * (A C e)) = \frac{1}{20}$$

Συνθήκες τάξης

$$t_{56} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20} \quad b^T A C^3 e = \frac{1}{20}$$

$$t_{57} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k = \frac{1}{40} \quad b^T A C A C e = \frac{1}{40}$$

$$t_{58} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60} \quad b^T A^2 C^2 e = \frac{1}{60}$$

$$t_{59} \quad \sum_{i,j,k,l=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} a_{kl} c_l = \frac{1}{120} \quad b^T A^3 C e = \frac{1}{120}$$

Φράγματα στην τάξη

Όπως είδαμε μπορούμε να κατασκευάσουμε μεθόδους τάξης $p = 1, 2, 3, 4$ με $s = 1, 2, 3, 4$ στάδια αντίστοιχα. Δεν μπορούμε να κατασκευάσουμε μέθοδο s σταδίων που να έχει τάξη μεγαλύτερη από s όπως βλέπουμε στο Θεώρημα.

Θεώρημα

Αν μια άμεση μέθοδος έχει τάξη p τότε έχει τουλάχιστον $s = p$ στάδια.

Επιπλέον δεν αρκούν τα 5 στάδια για να κατασκευάσουμε μέθοδο πέμπτης τάξης αλλά χρειάζονται 6 στάδια.

Όμοια για την κατασκευή μεθόδων έκτης τάξης απαιτούνται τουλάχιστον 7 στάδια ενώ για την κατασκευή μεθόδου έβδομης τάξης απαιτούνται τουλάχιστον 9 στάδια.

Ο Butcher το 1985 απέδειξε ότι δεν υπάρχει μέθοδος όγδοης τάξης με 10 στάδια.

Για την κατασκευή μεθόδου πέμπτης τάξης πρέπει να ικανοποιούνται 17 συνθήκες.

Μια RK μέθοδος με $s = 5$ στάδια έχει 15 συντελεστές, ο Kutta έθεσε το ερώτημα της υπάρξης μεθόδου 5ης τάξης που να ικανοποιεί τις 17 συνθήκες τάξης.

Μη μπορώντας να δώσει απάντηση κατασκεύασε μέθοδο 5ης τάξης με 6 στάδια.

Φράγματα στην τάξη

Σύμφωνα με τον Hairer το ερώτημα έμεινε αναπάντητο για περισσότερα από 60 έτη και απαντήθηκε ανεξάρτητα από τρεις επιστήμονες Ceschino-Kuntzmann, Shanks και Butcher τα έτη 1963, 1966 και 1964, 1965.

Θεώρημα

Αν μια άμεση μέθοδος s σταδίων έχει τάξη $p \geq 5$, τότε $s > p$.

Το 1965 αποδείχθηκε από τον Butcher το ακόλουθο

Θεώρημα

Αν μια άμεση μέθοδος s σταδίων έχει τάξη $p \geq 7$, τότε $s > p + 1$.

Το 1985 αποδείχθηκε από τον Butcher ότι δεν υπάρχει μέθοδος όγδοης τάξης ($p = 8$) με $s = 10$ στάδια.

Θεώρημα

Αν μια άμεση μέθοδος s σταδίων έχει τάξη $p \geq 8$, τότε $s > p + 2$.

Φράγματα στην τάξη

Αν και δεν έχουν δημοσιευθεί άρθρα για τον ελάχιστο αριθμό σταδίων για μεθόδους μεγαλύτερης τάξης γνωρίζουμε ότι υπάρχει μέθοδος δέκατης τάξης ($p = 10$) με $s = 17$ στάδια που κατασκεύασε ο Hairer το 1978.

Ο απαιτούμενος αριθμός σταδίων για την κατασκευή μεθόδων έως και όγδοης τάξης είναι:

τάξη	1	2	3	4	5	6	7	8
στάδια	1	2	3	4	6	7	9	11

Βέβαια μπορούμε να μειώσουμε τον αριθμό των σταδίων αν θεωρήσουμε πεπλεγμένες μεθόδους.

Απλοποιητικές παραδοχές

Οι απλοποιητικές παραδοχές είναι σχέσεις μεταξύ των συνελεστών της μεθόδου RK που κάνουν το σύστημα των συνθηκών τάξης ευκολότερο. Έχουμε ήδη δει την συνθήκη γραμμής που δόθηκε από τον Kutta που μειώνει τον αριθμό των συνθηκών τάξης για την τρίτη και την τέταρτη τάξη.

$$\sum_{j=1}^s a_{ij} = c_i$$

Ονομάζουμε την παραδοχή αυτή C(1). Ο Butcher μας έδωσε την παραδοχή C(2)

$$\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j = \frac{c_i^2}{2}$$

Με αυτήν την συνθήκη για τα δέντρα δεύτερης τάξης



έστω t_1 και t_2 τότε $\gamma(t_1) = 2\gamma(t_2)$ και $\Phi(t_2) = 2\Phi(t_1)$ συνεπώς οι δύο συνθήκες είναι ισοδύναμες και μπορούμε να εξαιρέσουμε την συνθήκη $\Phi(t_1) = 1/\gamma_1$ από το σύνολο των συνθηκών τάξης.

Απλοποιητικές παραδοχές

Για την τρίτη τάξη $\Phi(t_{32}) = 1/6$ και $\Phi(t_{31}) = 1/3$

$$\Phi(t_{32}) = \sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j \quad \text{και} \quad \Phi(t_{31}) = \sum_{i=1}^s b_i c_i^2$$



Η δεύτερη συνθήκη συνεπάγεται την πρώτη

$$\begin{aligned} \Phi(t_1) &= \sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j = \sum_{i=1}^s b_i \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j = \\ &= \sum_{i=1}^s b_i \frac{c_i^2}{2} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{2} \Phi(t_2) = \frac{1}{6} \end{aligned}$$

Απλοποιητικές παραδοχές

Για την τέταρτη τάξη έχουμε τα δέντρα t_{42} και t_{41}



$$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8} \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{4}$$

Η δεύτερη συνθήκη συνεπάγεται την πρώτη

$$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j = \sum_{i=1}^s b_i c_i \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j = \sum_{i=1}^s b_i c_i \frac{c_i^2}{2} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{8}$$

Όμοια για τα δέντρα t_{44} και t_{43}



και συνθήκες

$$\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24} \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^s b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}$$

Απλοποιητικές παραδοχές

Έχουμε από μία συνθήκη για τις τάξεις 1,2 και 3 και δύο συνθήκες για την τάξη 4.
Για την πέμπτη τάξη οι συνθήκες που απομένουν είναι τέσσερεις.

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1 \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2} \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3} \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{4}$$

$$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i c_i^4 = \frac{1}{5} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15}$$

$$\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60}$$

Απλοποιητικές παραδοχές

Ο Butcher εισήγαγε την παραδοχή $D(1)$

$$\sum_{i=1}^s b_i a_{ij} = b_j(1 - c_j), \quad j = 1, 2, \dots, s$$

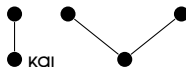
ή

$$bA = b(I - C)$$

Η συνθήκη που αντιστοιχεί στο δέντρο 3ης τάξης t_{32}



προκύπτει από τις συνθήκες που αντιστοιχούν στα δέντρα t_{21} και t_{31}



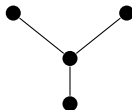
$$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j = \sum_{j=1}^s b_j(1 - c_j)c_j = \sum_{j=1}^s b_j c_j - \sum_{j=1}^s b_j c_j^2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$$

Απλοποιητικές παραδοχές

Στην 4η τάξη η συνθήκη

$$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}$$

που αντιστοιχεί στο t_{43}



προκύπτει από τις

$$\sum_{j=1}^s b_j c_j^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{j=1}^s b_j c_j^3 = \frac{1}{4}$$

δέντρα



Κατασκευή μεθόδου 5ης τάξης με 6 στάδια

Θέλουμε να κατασκευάσουμε μέθοδο 5ης τάξης με 6 στάδια. Θεωρούμε τις απλοποιητικές παραδοχές $C(1)$, $C(2)$ και $D(1)$,

$$\sum_{j=1}^6 a_{ij} = c_j \quad i = 2, \dots, 6$$

$$\sum_{j=2}^6 a_{ij} c_j = \frac{c_j^2}{2} \quad i = 3, \dots, 6$$

$$\sum_{i=1}^6 b_i a_{ij} = b_j(1 - c_j) \quad j = 1, \dots, 6$$

$$b_2 = 0$$

Η παραδοχή $D(1)$ για $j = 6$ γίνεται $b_6(1 - c_6) = 0$ αφού $a_{i6} = 0$ για όλα τα i . Από όπου παίρνουμε $c_6 = 1$.

Κατασκευή μεθόδου 5ης τάξης με 6 στάδια

Από τις συνθήκες

$$\begin{aligned}\sum_i b_i c_i \sum_j a_{ij} \sum_k a_{jk} c_k &= \frac{1}{30} \\ \sum_i b_i c_i \sum_j a_{ij} c_j^2 &= \frac{1}{15}\end{aligned}$$

παίρνουμε

$$\sum_i b_i c_i \sum_j a_{ij} \left(\sum_k a_{jk} c_k - \frac{c_j^2}{2} \right) = 0$$

η παρένθεση είναι ίση με το 0 για $j = 3, 4, 5, 6$ που συνεπάγεται

$$\sum_i b_i c_i a_{i2} = 0$$

Κατασκευή μεθόδου 5ης τάξης με 6 στάδια

Από τις συνθήκες

$$\begin{aligned}\sum_i b_i \sum_j a_{ij} \sum_k a_{jk} c_k &= \frac{1}{24} \\ \sum_i b_i \sum_j a_{ij} c_j^2 &= \frac{1}{12}\end{aligned}$$

με αφαίρεση παίρνουμε

$$\sum_i b_i a_{ij} \left(\sum_k a_{jk} c_k - \frac{c_j^2}{2} \right) = 0$$

η παρένθεση είναι ίση με το 0 για $j = 3, 4, 5, 6$ που συνεπάγεται

$$\sum_i b_i a_{i2} = 0$$

Τότε

$$\sum_i b_i (1 - c_i) a_{i2} = 0$$

Κατασκευή μεθόδου 5ης τάξης με 6 στάδια

Οι συνθήκες

$$\sum_i b_i \sum_j a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}$$

$$\sum_i b_i c_i \sum_j a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15}$$

$$\sum_i b_i \sum_j a_{ij} c_j = \frac{1}{6}$$

$$\sum_i b_i c_i \sum_j a_{ij} c_j = \frac{1}{8}$$

δίνουν

$$b_i(1 - c_i)a_{ij}c_j(c_j - c_3) = \frac{1}{60} - \frac{c_3}{24}$$

ή

$$b_5(1 - c_5)a_{54}c_4(c_4 - c_3) = \frac{1}{60} - \frac{c_3}{24}$$

Κατασκευή μεθόδου 5ης τάξης με 6 στάδια

Αλγόριθμος κατασκευής μεθόδου πέμπτης τάξης

❶ $b_2 = 0, c_6 = 1$ ανδ c_2, c_3, c_4, c_5 είναι ελεύθερες παράμετροι.

❷ b_1, b_3, b_4, b_5, b_6 από το γραμμικό σύστημα

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1 \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2} \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3} \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{4} \quad \sum_{i,j,k=1}^s b_i c_i^4 = \frac{1}{5}$$

❸ a_{32} από την $C(2)$ για $i = 3$ $a_{32} c_2 = c_3^2/2$

❹ a_{42} ελεύθερη παράμετρος

❺ a_{43} από την $C(2)$ για $i = 4$ $a_{42} c_2 + a_{43} c_3 = c_4^2/2$

❻ a_{52} από $b_3 c_3 a_{32} + b_4 c_4 a_{42} + b_5 c_5 a_{52} = 0$

❼ a_{54} από $b_5(1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3) = 1/60 - c_3/24$

❽ a_{53} από την $C(2)$ για $i = 5$ $a_{52} c_2 + a_{53} c_3 + a_{54} c_4 = c_5^2/2$

❾ a_{63}, a_{64}, a_{65} από την $D(1)$

❿ a_{62} από την $C(2)$ για $i = 6$

⓫ $a_{21}, a_{31}, a_{41}, a_{51}, a_{61}$ από τη συνθήκη γραμμής.

Κατασκευή μεθόδου 5ης τάξης με 6 στάδια

Αν επιλέξουμε

$$c_2 = \frac{1}{4} \quad c_3 = \frac{1}{4} \quad c_4 = \frac{1}{2} \quad c_5 = \frac{3}{4} \quad a_{42} = 0$$

παίρνουμε τη μέθοδο

0						
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$				
$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{2}$			
$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{16}$	$-\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{16}$		
1	$-\frac{3}{7}$	$\frac{8}{7}$	$\frac{6}{7}$	$-\frac{12}{7}$	$\frac{8}{7}$	
	$\frac{7}{90}$	0	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$

Κατασκευή μεθόδου 5ης τάξης με 6 στάδια

Οι μέθοδοι που κατασκεύασε ο Kutta το 1901 και διορθώθηκαν από τον Nyström το 1925 είναι

0						
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$					
$\frac{2}{5}$	$\frac{4}{25}$	$\frac{6}{25}$				
1	$\frac{1}{4}$	-3	$\frac{15}{4}$			
$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{27}$	$\frac{10}{9}$	$-\frac{50}{81}$	$\frac{8}{81}$		
$\frac{4}{5}$	$\frac{2}{25}$	$\frac{12}{25}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{8}{75}$	0	
	$\frac{23}{192}$	0	$\frac{125}{192}$	0	$-\frac{27}{64}$	$\frac{125}{192}$

Κατασκευή μεθόδου 5ης τάξης με 6 στάδια

0						
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					
$\frac{2}{5}$	0	$\frac{2}{5}$				
1	$\frac{9}{4}$	-5	$\frac{15}{4}$			
$\frac{3}{5}$	$-\frac{63}{100}$	$\frac{9}{5}$	$-\frac{13}{20}$	$\frac{2}{25}$		
$\frac{4}{5}$	$-\frac{6}{25}$	$\frac{4}{5}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{8}{75}$	0	
	$\frac{17}{144}$	0	$\frac{25}{36}$	$\frac{1}{72}$	$-\frac{25}{72}$	$\frac{25}{48}$

Βιβλιογραφία

- ❶ J.C. Butcher, A history of Runge-Kutta methods, Applied Numerical Mathematics 20 (1996), 247-260.
- ❷ J. Butcher, Numerical Integration Ordinary Differential Equations, Wiley, 2016.
- ❸ J.R. Dormand, Numerical Methods for Differential Equations, CRC, 1996.
- ❹ E. Hairer, S.P. Norsett, G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations I Nonstiff Problems, Springer, 2000.
- ❺ J.D. Lambert. Numerical Methods for Ordinary Differential Systems, Wiley, 1990.
- ❻ S. G. Nash ed. A History of Scientific Computing. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 1990.

Βιβλιογραφία

- ❶ Μ. Βραχάτης. Αριθμητική Ανάλυση. Κλειδάριθμός, 2012.
- ❷ Μ. Βραχάτης. Αριθμητική Ανάλυση Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις. Κλειδάριθμός, 2012.
- ❸ Μ. Γουσίδου - Κουτίτα. Αριθμητική Ανάλυση. Κυριακίδη, 2017.
- ❹ Ζ. Καλογηράτου, Θ. Μονοβασίλης, Αριθμητική Επίλυση Διαφορικών Εξισώσεων, ΚΑΛΛΙΠΟΣ, ΑΝΟΙΚΤΕΣ ΑΚΑΔΗΜΑΙΚΕΣ ΕΚΔΟΣΕΙΣ www.kallipos.gr
- ❺ Γ.Σ. Παπαγεωργίου και Χ. Τσίτουρας. Αριθμητική Ανάλυση με εφαρμογές σε MATLAB και Mathematica. Συμεών, 2015.
- ❻ Ι. Φαμέλης. Υπολογιστικά Μαθηματικά. Κριτική, 2021
- ❼ C. Moler. Αριθμητικές Μέθοδοι με το MATLAB . Κλειδάριθμος, 2010.