



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

Αριθμητικές μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης για
την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων

Διπλωματική Εργασία
της
Ξυνοπούλου Ιωάννα-Δέσποινα

Επιβλέπων: Χρυσάφινος Κωνσταντίνος
Καθηγητής

12 Ιουλίου 2023



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

Αριθμητικές μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης για
την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων

Διπλωματική Εργασία
της
Ξυνοπούλου Ιωάννα-Δέσποινα

Επιβλέπων: Χρυσάφινος Κωνσταντίνος
Καθηγητής

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή:

.....
Χρυσάφινος Κωνσταντίνος
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Κολέτσος Ιωάννης
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Κοκκίνης Βασίλειος
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

12 Ιουλίου 2023

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή κ. Κωνσταντίνο Χρυσάφινο για την επίβλεψη αυτής της διπλωματικής εργασίας και την πολύτιμη βοήθεια του. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου για την συμπαράσταση που μου προσέφεραν καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου.

.....
Ιωάννα-Δέσποινα Ξυνοπούλου

© (2023) Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. All rights Reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σ' αυτό το έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευτεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περίληψη

Οι συνήθεις διαφορικές εξισώσεις (ΣΔΕ) εμφανίζονται πολύ συχνά σε μαθηματικά μοντέλα που περιγράφουν προβλήματα φυσικών, τεχνολογικών και βιολογικών επιστημών. Η αναλυτική επίλυση τους είναι συχνά δύσκολη ή και αδύνατη, ειδικά για μη γραμμικές εξισώσεις. Ως εκ τούτου, οι αριθμητικές μέθοδοι έχουν γίνει ένα ουσιαστικό εργαλείο για την προσέγγιση των λύσεων των ΣΔΕ.

Η παρούσα διπλωματική διερευνά την εφαρμογή της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης για την αριθμητική επίλυση ΣΔΕ. Είναι μια δημοφιλής αριθμητική μέθοδος που συνδυάζει τα πλεονεκτήματα τόσο των άμεσων όσο και των έμμεσων μεθόδων και συνήθως χρησιμοποιεί τις Adams-Bashforth και Adams-Moulton. Είναι γνωστή για την υψηλή ακρίβεια, ευστάθεια και αποτελεσματικότητά της.

Στόχος της εργασίας είναι να παρέχει μια ολοκληρωμένη μελέτη της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης, με έμφαση στις θεωρητικές βάσεις και τις πρακτικές εφαρμογές της. Αφού εξετάσουμε τη βιβλιογραφία σχετικά με τις αριθμητικές μεθόδους θα συγκρίνουμε τη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης με άλλες δημοφιλείς μεθόδους όπως η μέθοδος Euler και οι μέθοδοι Runge-Kutta.

Επιπλέον, εφαρμόζεται η μέθοδος predictor-corrector στο MATLAB και διεξάγονται αριθμητικά πειράματα για να αξιολογήσουμε την απόδοσή της για διάφορους τύπους προβλημάτων. Συγκρίνονται τα αποτελέσματα της με άλλες αριθμητικές μεθόδους και αναλύουμε την ευαισθησία της σε διαφορετικές παραμέτρους, όπως το μέγεθος του βήματος. Παράλληλα, εστιάζουμε στην εφαρμογή της στο μοντέλο Lotka-Volterra θηράματος-θηρευτή, το οποίο είναι ένα κλασικό παράδειγμα ενός συστήματος ΣΔΕ που περιγράφει την αλληλεπίδραση μεταξύ των πληθυσμών θηρευτών και θηραμάτων. Τα αποτελέσματα των αριθμητικών πειραμάτων καταδεικνύουν την ανώτερη ακρίβεια των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης για ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων.

Λέξεις κλειδιά: μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης, Adams-Bashforth, Adams-Moulton, MATLAB

Abstract

Ordinary differential equations (ODEs) is appearing very often in mathematical models which describe problems in physics, technology and biology. The analytical solution is often difficult or even impossible, especially for nonlinear equations. Therefore, numerical methods have become an essential tool for approximating the solutions of the ODEs.

This thesis explores the application of the predictor-corrector method for the numerical solution of ODEs. Predictor-corrector is a popular numerical method that combines the advantages of both explicit and implicit schemes and typically uses the Adams-Bashforth and Adams-Moulton methods. It is known for its high accuracy, stability and efficiency.

The aim of this paper is to provide a comprehensive study of the predictor-corrector method, with emphasis on its theoretical foundations and practical applications. After reviewing the relevant bibliography on numerical methods we will compare the predictor-corrector method with other popular methods such as Euler method and Runge-Kutta method.

In addition, the predictor-corrector method is applied in MATLAB and conduct numerical experiments to evaluate its performance for various types of problems. The results are compared with other numerical methods and analyze the sensitivity of the method to different parameters, such as stepsize. At the same time, we focus on the application of the method to the Lotka-Volterra predator-prey model, which is a classic example of a system of ODEs describing the interaction between predator and prey populations. The results of numerical experiments demonstrate the superior accuracy of the methods for a wide variety of problems.

Keywords: predictor-corrector method, Adams-Bashforth, Adams-Moulton, MATLAB

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Βασικές έννοιες διαφορικών εξισώσεων	1
1.2	Πρόβλημα αρχικών τιμών	2
1.3	Αριθμητικές μέθοδοι	5
1.4	Σφάλματα αριθμητικών μεθόδων	6
1.5	Ευστάθεια αριθμητικών μεθόδων	7
1.6	Εξισώσεις διαφορών	9
2	Μέθοδοι απλού βήματος	11
2.1	Μέθοδος Euler	11
2.1.1	Ανάλυση μεθόδου Euler	13
2.1.2	Έμμεση μέθοδος Euler	14
2.1.3	Μέθοδος τραπεζίου	15
2.1.4	Βελτιωμένη μέθοδος Euler	16
2.2	Μέθοδοι Runge-Kutta	18
2.2.1	Άμεση μέθοδος Runge-Kutta δύο σταδίων	19
2.2.2	Άμεση μέθοδος Runge-Kutta τριών σταδίων	21
2.2.3	Άμεση μέθοδος Runge-Kutta τεσσάρων σταδίων	22
2.2.4	Ευστάθεια μεθόδων Runge-Kutta	22
3	Μέθοδοι πολλαπλού βήματος	25
3.1	Εισαγωγή	25
3.2	Ανάλυση πολυβηματικών μεθόδων	27
3.2.1	Τάξη ακρίβειας και συνέπεια πολυβηματικών μεθόδων	27
3.2.2	Μηδενική ευστάθεια πολυβηματικών μεθόδων	30
3.2.3	Σύγκλιση πολυβηματικών μεθόδων	31
3.2.4	Απόλυτη ευστάθεια πολυβηματικών μεθόδων	34
3.3	Μέθοδοι Adams	36
3.3.1	Μέθοδος Adams-Bashforth	36
3.3.2	Μέθοδος Adams-Moulton	38
4	Μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης	40
4.1	Εισαγωγικά	40
4.2	Έναρξη μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης	43
4.3	Τάξη ακρίβεια και σφάλμα μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης	43
4.4	Ευστάθεια μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης	46
4.5	Μεταβλητό μέγεθος βήματος	49
4.5.1	Τεχνική παρεμβολής	49
4.5.2	Τεχνική μεταβλητού συντελεστή	51

5	Αριθμητικά Παραδείγματα	53
5.1	Προβλήματα αρχικών τιμών πρώτης τάξης	53
5.2	Συστήματα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης	60
5.3	Μοντέλο Lotka–Volterra	63
6	Επίλογος	68
	A' Παράρτημα	69
	B' Παράρτημα	71
	Κατάλογος Σχημάτων	73
	Κατάλογος Πινάκων	74
	Βιβλιογραφία	75

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Το παρόν κεφάλαιο χρησιμεύει ως εισαγωγή στις συνήθεις διαφορικές εξισώσεις και στις αριθμητικές μεθόδους επίλυσής τους, θέτοντας τα θεμέλια για τη μετέπειτα διερεύνηση των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης.

1.1 Βασικές έννοιες διαφορικών εξισώσεων

Μία διαφορική εξίσωση συνδέει τις τιμές μιας άγνωστης συνάρτησης μιας ή περισσότερων μεταβλητών και των παραγώγων της πρώτου, δεύτερου ή ανώτερου βαθμού. Στην περίπτωση που η άγνωστη συνάρτηση εξαρτάται από μία ανεξάρτητη μεταβλητή, τότε η διαφορική εξίσωση περιλαμβάνει συνήθεις παραγώγους και ονομάζεται συνήθης διαφορική εξίσωση (ΣΔΕ). Όταν εξαρτάται από πολλές ανεξάρτητες μεταβλητές, στην διαφορική εξίσωση υπεισέρχονται μερικές παράγωγοι και ονομάζεται μερική διαφορική εξίσωση (ΜΔΕ). Στην παρούσα διπλωματική θα ασχοληθούμε μόνο με τις συνήθεις διαφορικές εξισώσεις [1] [2].

Τάξη n μίας διαφορικής εξίσωσης ονομάζεται η τάξη της μεγαλύτερης παραγώγου που υπάρχει στην εξίσωση. Η γενική ή αλλιώς πεπλεγμένη μορφή μίας ΣΔΕ n -οστής τάξης είναι

$$f(x, y(x), y'(x), \dots, y^{(n)}(x)) = 0. \quad (1.1)$$

Η κανονική ή αλλιώς λυμένη μορφή μίας ΣΔΕ n -οστής τάξης είναι:

$$f(x, y(x), y'(x), \dots, y^{(n-1)}(x)) = y^{(n)}(x). \quad (1.2)$$

Επίσης, οι διαφορικές εξισώσεις ταξινομούνται ανάλογα με την γραμμικότητα τους. Η ΣΔΕ είναι γραμμική αν η συνάρτηση f είναι γραμμική συνάρτηση ως προς τις μεταβλητές και τις παραγώγους της. Η γενική μορφή γραμμικής ΣΔΕ τάξης n είναι:

$$a_0(x)y^{(n)}(x) + a_1(x)y^{(n-1)}(x) + \dots + a_n(x)y(x) = g(x). \quad (1.3)$$

Η γραμμική ΣΔΕ καλείται ομογενής όταν ισχύει $g(x) = 0$, ενώ όταν $g(x) \neq 0$ λέγεται μη ομογενής. Ο βαθμός μίας ΣΔΕ είναι η δύναμη στην οποία είναι υψωμένη η παράγωγος της μεγαλύτερης τάξης όταν η ΣΔΕ είναι σε πολυωνυμική μορφή.

Επιπρόσθετα, μία ΣΔΕ ονομάζεται αυτόνομη όταν η συνάρτηση f δεν εξαρτάται από το x . Διαφορετικά λέγεται μη αυτόνομη.

Ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων περιλαμβάνει δύο ή περισσότερες άγνωστες συναρτήσεις και γράφεται ως εξής:

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)) \\ y_2' &= f_2(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)) \\ &\vdots \\ y_n' &= f_n(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)). \end{aligned} \quad (1.4)$$

1.2 Πρόβλημα αρχικών τιμών

Το πρόβλημα αρχικών τιμών (ή αλλιώς πρόβλημα Cauchy) είναι μια συνήθης διαφορική εξίσωση μαζί με μια δεδομένη αρχική συνθήκη που καθορίζει την τιμή της άγνωστης συνάρτησης και ορίζεται ως εξής [3]:

Έστω $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, $f : [a, b] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ μια συνεχής συνάρτηση για $(x, y) \in [a, b] \times \mathbb{R}$ και $y_0 \in \mathbb{R}$ μία δοθείσα αρχική τιμή. Ζητείται συνάρτηση $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, τέτοια ώστε:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), & a \leq x \leq b, \\ y(a) = y_0. \end{cases} \quad (1.5)$$

Κάθε συνάρτηση $y \in C^1[a, b]$ που ικανοποιεί το παραπάνω σύστημα καλείται κλασική λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (1.5). Μία αριθμητική λύση του προβλήματος αρχικών τιμών κατασκευάζει μία ακολουθία τιμών για την ανεξάρτητη μεταβλητή x_0, x_1, \dots, x_n και μία ακολουθία τιμών για την εξαρτημένη μεταβλητή y_0, y_1, \dots, y_n έτσι ώστε $y_n \approx y(x_n)$, $n = 0, 1, \dots$

Αν η συνάρτηση f είναι συνεχής στο x , τότε η λύση του (1.5) ικανοποιεί την σχέση:

$$y(x) - y_0 = \int_a^x f(s, y(s)) ds. \quad (1.6)$$

Όταν η διαφορική εξίσωση είναι γραμμική, δηλαδή το πρόβλημα αρχικών τιμών γράφεται στην μορφή:

$$\begin{cases} y'(x) = p(x)y(x) + q(x), & a \leq x \leq b, \\ y(a) = y_0, \end{cases} \quad (1.7)$$

τότε η ύπαρξη μίας ακριβώς λύσης του προβλήματος είναι γνωστή και δίνεται από τον τύπο:

$$y(x) = e^{\int_a^x p(s) ds} y_0 + \int_a^x q(s) e^{\int_s^x p(t) dt} ds, \quad a \leq x \leq b.$$

Επειτα, αποδείχτηκαν τα παρακάτω θεωρήματα του Picard, για την μη γραμμική περίπτωση, τα οποία εξασφαλίζουν την ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης του προβλήματος αρχικών τιμών.

Θεώρημα 1.2.1 (βλ. [4], Theorem 110C, σελ.23)

Έστω $f : [a, b] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ μία συνεχής συνάρτηση ως προς τα δύο ορίσματα, η οποία ικανοποιεί την συνθήκη του Lipschitz ως προς y , ομοιόμορφα ως προς x , δηλαδή $\exists L \geq 0$ τέτοιο ώστε:

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L |y_1 - y_2|, \quad \forall x \in [a, b], \forall y_1, y_2 \in \mathbb{R}. \quad (1.8)$$

Τότε για κάθε $y_0 \in \mathbb{R}$, το πρόβλημα αρχικών τιμών (1.5) έχει μοναδική λύση.

Απόδειξη. Έστω M ο πλήρης μετρικός χώρος των συνεχών συναρτήσεων $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ έτσι ώστε $y(a) = y_0$.

Η μετρική ορίζεται ως εξής:

$$\rho(y, z) = \sup_{x \in [a, b]} e^{-K(x-a)} \|y(x) - z(x)\|,$$

όπου $K > L$. Για κάποιο $y \in M$, ορίζουμε $\phi(y)$ την λύση του προβλήματος αρχικών τιμών:

$$\begin{aligned} Y'(x) &= f(x, Y(x)), \quad a \leq x \leq b, \\ Y(a) &= y_0. \end{aligned}$$

Η λύση του προβλήματος δίνεται από την ολοκλήρωση:

$$\phi(y)(x) = y_0 + \int_a^x f(s, y(s)) ds.$$

Η ϕ είναι συστολή καθώς για οποιαδήποτε $y, z \in M$ έχουμε:

$$\begin{aligned} \rho(\phi(y), \phi(z)) &\leq \sup_{x \in [a, b]} e^{-K(x-a)} \left\| \int_a^x (f(s, y(s)) - f(s, z(s))) ds \right\| \\ &\leq \sup_{x \in [a, b]} e^{-K(x-a)} \int_a^x \|f(s, y(s)) - f(s, z(s))\| ds \\ &\leq L \sup_{x \in [a, b]} e^{-K(x-a)} \int_a^x \|y(s) - z(s)\| ds \\ &\leq L \sup_{x \in [a, b]} e^{-K(x-a)} \int_a^x e^{K(s-a)} ds \\ &\leq \frac{L}{K} \rho(y, z), \end{aligned}$$

όπου $\frac{L}{K}$ είναι μια σταθερά.

Με βάση το θεώρημα σταθερού σημείου του Banach, η συστολή ϕ έχει μοναδικό y τέτοιο ώστε $\phi(y) = y$, επομένως είναι η μοναδική λύση στο πρόβλημα αρχικών τιμών (1.5). □

Θεώρημα 1.2.2 (βλ. [3], Θεώρημα 1.2, σελ.7)

Έστω $c > 0$ και $f \in C([a, b] \times [y_0 - c, y_0 + c])$. Αν η f ικανοποιεί την συνθήκη του Lipschitz στο $[a, b] \times [y_0 - c, y_0 + c]$ ως προς y , ομοιόμορφα ως προς x , δηλαδή

$$\begin{aligned} \exists L \geq 0, \forall x \in [a, b], \forall y_1, y_2 \in [y_0 - c, y_0 + c] \\ |f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L |y_1 - y_2|. \end{aligned} \tag{1.9}$$

Τότε το πρόβλημα αρχικών τιμών (1.5) έχει μοναδική λύση στο διάστημα $[a, b']$, όπου

$$b' := \min\left(b, a + \frac{c}{A}\right),$$

και

$$A := \max_{\substack{a \leq x \leq b \\ y_0 - c \leq y \leq y_0 + c}} |f(x, y)|.$$

Με παρόμοιο τρόπο εξαρτώνται τα συστήματα ΣΔΕ. Έστω μια συνήθης διαφορική εξίσωση n τάξης σε λυμένη μορφή:

$$\begin{cases} y^{(n)}(x) = f(x, y(x), y^{(1)}(x), \dots, y^{(n-1)}(x)), & x \in [a, b], \\ y^{(i)}(a) = \beta_i, & i = 0, \dots, n-1. \end{cases} \quad (1.10)$$

Αυτό το πρόβλημα μπορεί να αναχθεί σε πρόβλημα αρχικών τιμών για συστήματα διαφορικών εξισώσεων 1ης τάξης με n εξισώσεις.

Αρχικά, θεωρούμε τις συναρτήσεις:

$$\begin{aligned} y_1(x) &= y(x) \\ y_2(x) &= y^{(1)}(x) \\ y_3(x) &= y^{(2)}(x) \\ &\vdots \\ y_n(x) &= y^{(n-1)}(x), \end{aligned}$$

οπότε, έχουμε το σύστημα n εξισώσεων 1ης τάξης:

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

με τις αρχικές συνθήκες

$$\begin{aligned} y_1(a) &= \beta_0 \\ y_2(a) &= \beta_1 \\ y_3(a) &= \beta_2 \\ &\vdots \\ y_n(a) &= \beta_{n-1}. \end{aligned}$$

Συμπερασματικά, το πρόβλημα (1.10) ανάγεται στο:

$$\begin{cases} Y'(x) = g(x, Y(x)), & x \in [a, b], \\ Y(a) = \beta, \end{cases} \quad (1.11)$$

όπου $g = [y_2(x), y_3(x), \dots, y_n(x), f(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x))]^T$.

Τέλος, το θεώρημα ύπαρξης και μοναδικότητας λύσεων του προβλήματος αρχικών τιμών γενικεύεται για συστήματα ΣΔΕ πρώτης τάξης αν γίνει αντικατάσταση της απόλυτης τιμής με κάποια νόρμα $\|\cdot\|$ του \mathbb{R}^m . Επομένως, διατυπώνεται το ακόλουθο θεώρημα:

Θεώρημα 1.2.3 (βλ. [3], Θεώρημα 1.3, σελ.12)

Έστω η συνεχής συνάρτηση $f : [a, b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, η οποία ικανοποιεί την συνθήκη του Lipschitz ως προς y , ομοιόμορφα ως προς x , ως προς μια νόρμα $\|\cdot\|$ του \mathbb{R}^m , δηλαδή

$$\exists L \geq 0, \forall x \in [a, b], y_1, y_2 \in \mathbb{R}^m, \quad \|f(x, y_1) - f(x, y_2)\| \leq L\|y_1 - y_2\|. \quad (1.12)$$

Τότε, για κάθε $y_0 \in \mathbb{R}^m$ το πρόβλημα αρχικών τιμών (1.5) έχει μοναδική λύση.

1.3 Αριθμητικές μέθοδοι

Οι περισσότερες διαφορικές εξισώσεις δεν μπορούν να λυθούν με αναλυτικές τεχνικές καθώς αυτές είτε δεν εφαρμόζονται είτε η χρήση τους είναι εξαιρετικά πολύπλοκη. Συνεπώς, καθίσταται αναγκαία η χρήση αριθμητικών μεθόδων, οι οποίες προσεγγίζουν την λύση ενός προβλήματος αρχικών τιμών σε ξεχωριστά σημεία [1].

Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών (1.5) και μία ομοιόμορφη διαμέριση του $[a, b]$. Οι αριθμητικές μέθοδοι υπολογίζουν τις προσεγγίσεις y_n των τιμών $y(x_n)$, $n = 1, 2, \dots, N$, σε μία ακολουθία διακεκριμένων σημείων x_n του πεδίου ορισμού της, τα οποία δίνονται από την σχέση $x_n = a + nh$, $n = 0, 1, \dots, N$. Τα σημεία αυτά είναι ισαπέχοντα και η μεταξύ τους απόσταση καλείται βήμα και ισούται με $h = (b - a)/N$ [5].

Υπάρχουν δύο βασικές κατηγορίες αριθμητικών μεθόδων για τον υπολογισμό των y_n :

- Μέθοδοι απλού βήματος ή μονοβηματικές μέθοδοι (one-step methods): Μια τέτοια μέθοδος, για τον προσδιορισμό του y_{n+1} απαιτεί μόνο την προηγούμενη προσέγγιση, δηλαδή το y_n , $\forall n \geq 0$. Η γενική μορφή μιας μονοβηματικής μεθόδου δίνεται από την σχέση:

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

για κάποια $\Phi(x, y, h)$ κατάλληλα υπολογισμένη έκφραση.

- Μέθοδοι πολλαπλού βήματος ή πολυβηματικές μέθοδοι (multistep methods): Στην περίπτωση αυτή, για τον προσδιορισμό της λύσης σε κάποιο σημείο της διαμέρισης, είναι απαραίτητες περισσότερες από μία προηγούμενες τιμές. Αν η μέθοδος έχει k -βήματα, τότε η προσέγγιση της λύσης στο σημείο x_{n+k} υπολογίζεται με βάση την προσέγγιση της λύσης στα k προηγούμενα σημεία $x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+k-1}$. Η γενική μορφή μιας πολυβηματικής μεθόδου είναι:

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

Αν η συνάρτηση Φ είναι ανεξάρτητη της προσέγγισης y_{n+k} τότε η μέθοδος καλείται άμεση ή μη πεπλεγμένη (explicit), διαφορετικά καλείται έμμεση ή πεπλεγμένη (implicit) [6].

Γενικά, ένα χαρακτηριστικό των αριθμητικών μεθόδων είναι η ακρίβεια, η οποία δείχνει πόσο κοντά είναι η προσέγγιση που μας δίνει η μέθοδος στην πραγματική τιμή της λύσης. Όσο μεγαλύτερο είναι το μέγεθος βήματος, τόσο ελαττώνεται η ακρίβεια των αποτελεσμάτων [2].

Επίσης, μας ενδιαφέρει το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου, δηλαδή το πλήθος των βημάτων και πράξεων που χρειάζεται να κάνει ο υπολογιστής για τον προσδιορισμό των λύσεων του προβλήματος. Στόχος είναι η επιλογή μιας αριθμητικής μεθόδου που το πλήθος των απαιτούμενων πράξεων για την εύρεση προσεγγιστικών τιμών να είναι όσο το δυνατόν μικρότερο και τότε η μέθοδος λέμε ότι είναι αποδοτική [2].

Τέλος, οι αριθμητικές μέθοδοι που αναλύονται στα επόμενα κεφάλαια μπορούν να εφαρμοστούν όπως είναι στη λύση συστημάτων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης [7].

1.4 Σφάλματα αριθμητικών μεθόδων

Κατά την εφαρμογή μιας αριθμητικής μεθόδου για την προσέγγιση λύσης του προβλήματος αρχικών τιμών (1.5) προκύπτουν σφάλματα. Υπάρχουν δύο είδη σφαλμάτων:

1. Σφάλμα στρογγυλοποίησης (rounding error): Οφείλεται στο γεγονός ότι κάθε αριθμός που χρησιμοποιείται στον υπολογιστή δεν μπορεί να αποθηκευτεί με απόλυτη ακρίβεια, καθώς η αριθμητική κινητής υποδιαστολής του υπολογιστή διαθέτει περιορισμένο πλήθος ψηφίων.
2. Σφάλμα αποκοπής ή διακριτοποίησης (truncation error): Ορίζονται ως τα σφάλματα που προκύπτουν από τη χρήση μιας προσέγγισης στη θέση μιας ακριβούς μαθηματικής διαδικασίας, όπως για παράδειγμα ο τερματισμός μιας επαναληπτικής διαδικασίας πριν από τη σύγκλιση.

Έστω ότι χρησιμοποιούμε μια μονοβηματική μέθοδο για την προσέγγιση της λύσης του προβλήματος (1.5). Αν $y(x_n)$ είναι η ακριβής λύση του προβλήματος αρχικών τιμών στο x_n και \hat{y}_n η αριθμητική τιμή της προσεγγιστικής λύσης στο σημείο x_n , τότε ορίζουμε τα ακόλουθα.

Το τοπικό σφάλμα αποκοπής (local truncation error) T_{n+1} είναι το σφάλμα που παράγεται σε ένα βήμα της αριθμητικής μεθόδου και υπολογίζει πόσο αποτυγχάνει η ακριβής λύση του προβλήματος να ικανοποιήσει τη μέθοδο. Δίνεται από τον τύπο:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\Phi(x_n, y(x_n), h). \quad (1.13)$$

Το ολικό σφάλμα αποκοπής ϵ_{n+1} (global truncation error) είναι η διαφορά της υπολογισμένης και της πραγματικής λύσης στο σημείο x_{n+1} και δίνεται:

$$\epsilon_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}. \quad (1.14)$$

Το τοπικό σφάλμα στρογγυλοποίησης (local rounding error) R_{n+1} μετράει πόσο η αριθμητική τιμή της λύσης που λαμβάνεται από τον υπολογιστή δεν ικανοποιεί τη μέθοδο. Ορίζεται:

$$R_{n+1} = \hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n - h\Phi(x_n, \hat{y}_n, h). \quad (1.15)$$

Το ολικό σφάλμα στρογγυλοποίησης (global rounding error) r_{n+1} δίνεται από την σχέση:

$$r_{n+1} = y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}. \quad (1.16)$$

Η απόλυτη τιμή του ολικού σφάλματος για τον υπολογισμό του $y(x_{n+1})$ δίνεται από την εξίσωση:

$$|y(x_{n+1}) - \hat{y}_{n+1}| = |y(x_{n+1}) - y_{n+1} + y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}|.$$

Χρησιμοποιώντας την τριγωνική ανισότητα

$$|a + b| \leq |a| + |b|,$$

προκύπτει:

$$\begin{aligned} |y(x_{n+1}) - \hat{y}_{n+1}| &\leq |y(x_{n+1}) - y_{n+1}| + |y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}| \\ &\leq |\epsilon_{n+1}| + |r_{n+1}|. \end{aligned}$$

Συμπερασματικά, το απόλυτο συνολικό σφάλμα φράσσεται από το άθροισμα των απόλυτων τιμών του ολικού σφάλματος αποκοπής και του ολικού σφάλματος στρογγυλοποίησης. Επιπρόσθετα, βλέπουμε ότι τα δύο αυτά σφάλματα δεν είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Για παράδειγμα, αν μειωθεί το μέγεθος του βήματος h θα μειωθεί το ολικό σφάλμα αποκοπής και το ολικό σφάλμα στρογγυλοποίησης ενδεχομένως θα αυξηθεί, επειδή θα χρειαστούν περισσότερα βήματα για να καλυφθεί ένα συγκεκριμένο διάστημα. Στη συνέχεια, θα αγνοήσουμε το σφάλμα στρογγυλοποίησης, καθώς εξαρτάται από το είδος του υπολογιστή που χρησιμοποιείται και μας απασχολεί μόνο όταν απαιτείται πολύ μεγάλη ακρίβεια [1].

Ορισμός 1.4.1. *Μια αριθμητική μέθοδος προσέγγισης της λύσης του προβλήματος αρχικών τιμών έχει τάξη ακρίβειας p όταν ικανοποιείται η συνθήκη:*

$$T_{n+1} = O(h^{p+1}),$$

όπου T_{n+1} το τοπικό σφάλμα αποκοπής στο σημείο x_{n+1} . Από την παραπάνω σχέση συνεπάγεται ότι, υπάρχει σταθερά $C > 0$ για την οποία ισχύει:

$$|T_{n+1}| \leq Ch^{p+1}, \quad \forall h, \text{ με } 0 < h < h_0 \quad (1.17)$$

Η σταθερά C εξαρτάται συνήθως από τις μερικές παραγώγους και το μήκος του διαστήματος υπολογισμού της λύσης, αλλά είναι ανεξάρτητη από το μέγεθος του βήματος h και τον αριθμό των βημάτων [8].

Ορισμός 1.4.2. *Η αριθμητική μέθοδος επίλυσης του προβλήματος αρχικών τιμών (1.5), με ολικό σφάλμα αποκοπής ϵ_n , είναι συγκλίνουσα ως προς την ακριβή λύση $y(x_n)$ όταν:*

$$\lim_{h \rightarrow 0} (\max_{0 \leq n \leq N} |\epsilon_n|) = 0.$$

Με άλλα λόγια, καθώς το μέγεθος του βήματος h τείνει στο μηδέν, οι προσεγγιστικές τιμές της αριθμητικής λύσης προσεγγίζουν τις τιμές της πραγματικής λύσης. Φυσικά, όσο υψηλότερη είναι η τάξη p , τόσο πιο γρήγορη είναι η σύγκλιση.

1.5 Ευστάθεια αριθμητικών μεθόδων

Ο έλεγχος της ευστάθειας των αριθμητικών αλγορίθμων αποτελεί σημαντικό στάδιο της αριθμητικής ανάλυσης. Γενικά, μας ενδιαφέρει να μελετήσουμε αν τα μικρά σφάλματα που προκύπτουν κατά την μαθηματική επίλυση τείνουν να εξαφανιστούν ή να αυξηθούν. Όταν τα σφάλματα αυξηθούν, είναι πολύ πιθανό οι προσεγγίσεις της λύσης που θα προκύψουν να διαφέρουν από την ακριβή λύση του προβλήματος αρχικών τιμών.

Ορισμός 1.5.1. *Ένα πρόβλημα ονομάζεται καλά τοποθετημένο (well-posed) κατά Hadamard όταν:*

- το πρόβλημα έχει λύση
- η λύση είναι μοναδική
- η λύση αλλάζει με συνεχή τρόπο από τα αρχικά δεδομένα

Αντίθετα, ένα πρόβλημα που δεν ικανοποιεί την παραπάνω ιδιότητα ονομάζεται μη καλά τοποθετημένο (ill-posed) κατά Hadamard.

Η αριθμητική επίλυση μη καλά τοποθετημένων προβλημάτων οδηγεί σε μεγάλα σφάλματα, επομένως πρέπει πρώτα να μετατραπούν σε καλά τοποθετημένα προβλήματα [9].

Για την ανάλυση της ευστάθειας του προβλήματος Cauchy εξετάζεται το ακόλουθο πρόβλημα αρχικών τιμών, το οποίο προκύπτει από το (1.5) διαταράσσοντας την αρχική τιμή του προβλήματος από y_0 σε $y_0 + \epsilon$.

$$\begin{cases} y'_\epsilon(x) = f(x, y_\epsilon(x)), & a \leq x \leq b, \\ y_\epsilon(a) = y_0 + \epsilon. \end{cases} \quad (1.18)$$

Χρησιμοποιώντας τις ίδιες υποθέσεις του θεωρήματος (1.2.1), αποδεικνύεται ότι για μικρές τιμές του ϵ , τα $y(x)$ και $y_\epsilon(x)$ ανήκουν στο διάστημα $[a, b]$ και επιπλέον:

$$\|y_\epsilon - y\|_\infty \equiv \max_{a \leq x \leq b} |y_\epsilon(x) - y(x)| \leq c\epsilon, \quad (1.19)$$

για κάποιο $c > 0$ ανεξάρτητο του ϵ . Επομένως, μικρές μεταβολές στην αρχική τιμή y_0 οδηγούν σε μικρές μεταβολές στην λύση $y(x)$ του προβλήματος αρχικών τιμών [7].

Ορισμός 1.5.2. Η λύση ενός προβλήματος αρχικών τιμών καλείται ευσταθής όταν μικρές αλλαγές στις αρχικές συνθήκες δεν επιτρέπουν αυθαίρετα μεγάλες αλλαγές στη λύση καθώς $x \rightarrow \infty$. Διαφορετικά η λύση ονομάζεται ασταθής.

Σαφώς, επιθυμούμε τα προβλήματα προς επίλυση να είναι ευσταθή, έτσι ώστε η αριθμητική προσεγγιστική λύση να μην αποκλίνει από την ακριβή λύση. Αν ένα πρόβλημα είναι ασταθές δεν μπορεί να μετατραπεί σε ευσταθές. Ακόμη, η απαίτηση ότι το πρόβλημα αρχικών τιμών (1.5) είναι ευσταθές είναι ισοδύναμη με την απαίτηση να είναι καλά τοποθετημένο.

Ορισμός 1.5.3. Με βάση τον *Dahlquist*, μία αριθμητική μέθοδος για την επίλυση του προβλήματος αρχικών τιμών (1.5) ονομάζεται απόλυτα ευσταθής για κάποιο $h > 0$ εάν για το απλό γραμμικό πρόβλημα:

$$\begin{cases} y'(x) = \lambda y, & \lambda \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} \lambda < 0, \quad x \in [0, \infty), \\ y(0) = 1, \end{cases} \quad (1.20)$$

δίνει προσεγγίσεις y_n , $n = 1, 2, \dots$ οι οποίες παραμένουν φραγμένες καθώς $n \rightarrow \infty$.

Η περιοχή S του μιγαδικού επιπέδου για την οποία η αριθμητική μέθοδος είναι απόλυτα ευσταθής για $h\lambda \in S$, καλείται περιοχή απόλυτης ευστάθειας της μεθόδου.

Ορισμός 1.5.4. Αν η περιοχή απόλυτης ευστάθειας μιας αριθμητικής μεθόδου είναι η μέγιστη δυνατή, δηλαδή περιέχει όλο το αριστερό μιγαδικό ημιεπίπεδο, τότε η μέθοδος ονομάζεται *A*-ευσταθής.

Τα προβλήματα τα οποία απαιτούν το μέγεθος βήματος h να είναι πολύ μικρό προκειμένου να εξασφαλιστεί η ευστάθεια, παρά η ακρίβεια, ονομάζονται δύσκαμπτα (*stiff*). Η δύσκαμψια εξαρτάται από τη δομή της διαφορικής εξίσωσης, τα αρχικά δεδομένα και την αριθμητική μέθοδο. Γενικά, ένα πρόβλημα ονομάζεται δύσκαμπτο αν η λύση μεταβάλλεται αργά με το x ενώ υπάρχουν κοντινές λύσεις που αλλάζουν γρήγορα κοντά στο x και τότε η αριθμητική μέθοδος απαιτείται να κάνει μικρά βήματα. Για τέτοια προβλήματα, η ανάλυση της ευστάθειας είναι σημαντική για την αξιολόγηση της καταλληλότητας της μεθόδου που θα χρησιμοποιηθεί στην αριθμητική επίλυση [4][8].

Παράδειγμα 1. Το ακόλουθο είναι ένα κλασικό παράδειγμα προβλήματος αρχικών τιμών για μια δύσκαμπτη διαφορική εξίσωση.

$$\begin{cases} y' = \lambda y + f'(x) - \lambda f(x), & x \geq 0, \\ y(0) = y_0, \end{cases} \quad (1.21)$$

με $\lambda \in \mathbb{C}$, $\operatorname{Re} \lambda < 0$. Η αναλυτική λύση του ΠΑΤ είναι

$$y(x) = f(x) + e^{\lambda x}[y(0) - f(0)], \quad x \geq 0. \quad (1.22)$$

Αν η f μεταβάλλεται αργά με το x , τότε ο όρος $f(x)$ στην αναλυτική λύση είναι ο σημαντικός, αφού ο δεύτερος όρος τείνει πολύ γρήγορα στο μηδέν.

1.6 Εξισώσεις διαφορών

Στην ενότητα αυτή θα επισημάνουμε κάποια στοιχεία της θεωρίας των εξισώσεων διαφορών, που θα χρειαστούμε στις πολυβηματικές μεθόδους. Συνήθως χρησιμοποιούνται όταν τα μεγέθη ορίζονται μέσω γραμμικών αναδρομικών σχέσεων. Οι γραμμικές εξισώσεις διαφορών τάξης k είναι της μορφής:

$$a_k y_{n+k} + a_{k-1} y_{n+k-1} + \dots + a_0 y_n = \phi_{n+k}, \quad n \geq 0, \quad (1.23)$$

όπου $a_0, \dots, a_k \in \mathbb{R}$ συντελεστές και θεωρούμε ότι $a_k, a_0 \neq 0$. Αν οι συντελεστές αυτοί δεν εξαρτώνται από το n τότε λέμε ότι η γραμμική εξίσωση διαφορών έχει σταθερούς συντελεστές. Μία ακολουθία τιμών $(y_n)_{n=0,1,\dots}$ που ικανοποιεί την εξίσωση (1.23) καλείται λύση της εξίσωσης διαφορών. Ο χώρος λύσεων της εξίσωσης είναι γραμμικός [3].

Αν $\phi_{n+k} = 0$, τότε η εξίσωση είναι ομογενής και γράφεται:

$$a_k y_{n+k} + a_{k-1} y_{n+k-1} + \dots + a_0 y_n = 0, \quad n \geq 0. \quad (1.24)$$

Εστω $(y_j^n)_{n=0,1,\dots}$, $j = 1, \dots, m$, οι λύσεις της εξίσωσης (1.24). Αν υπάρχουν σταθερές $\gamma_1, \dots, \gamma_m$, που δεν είναι όλες ίσες με μηδέν, τέτοιες ώστε:

$$\gamma_1 y_1^n + \dots + \gamma_m y_m^n = 0, \quad n \geq 0,$$

τότε λέμε ότι οι λύσεις είναι γραμμικά εξαρτημένες. Διαφορετικά, είναι γραμμικά ανεξάρτητες.

Ψάχνουμε μία έκφραση της λύσης που να εξαρτάται μόνο από τους συντελεστές a_0, \dots, a_k και από τα αρχικά δεδομένα. Κάθε λύση της ομογενούς εξίσωσης διαφορών μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$y_n = y_0 y_0^n + y_1 y_1^n + \dots + y_{k-1} y_{k-1}^n, \quad n \geq 0, \quad (1.25)$$

όπου οι λύσεις είναι γραμμικά ανεξάρτητες. Οι k πρώτες συνιστώσες των ακολουθιών που ορίζονται από αυτήν την σχέση ονομάζονται θεμελιώδεις λύσεις της ομογενούς εξίσωσης. Κάθε βάση του χώρου λύσεων της (1.24) καλείται θεμελιώδες σύστημα.

Εστω $(y_n)_{n=0,1,\dots}$, $j = 1, \dots, k$ ένα θεμελιώδες σύστημα της (1.24) και $(\gamma_n)_{n=0,1,\dots}$ μία λύση της. Αν c_1, \dots, c_k η μοναδική λύση του συστήματος τότε ισχύει:

$$\sum_{j=0}^k y_j^n c_j = \gamma_n, \quad n = 0, \dots, k-1.$$

Ένας άλλος τρόπος για να ορίσουμε ένα θεμελιώδες σύστημα είναι μέσω του χαρακτηριστικού πολυωνύμου p :

$$p(z) = a_k z^k + a_{k-1} z^{k-1} \dots + a_1 z + a_0.$$

Οι ρίζες του πολυωνύμου είναι διάφορες του μηδενός αφού $a_0 \neq 0$. Επιθυμούμε να προσδιορίσουμε λύσεις της (1.24) που να μην έχουν όλους τους όρους μηδέν. Κάθε ρίζα του πολυωνύμου $p(z)$ την οποία συμβολίζουμε με z_j^n , $j = 0, \dots, k$ είναι λύση της ομογενούς εξίσωσης διαφορών (1.24), δηλαδή $y_n = z^n$. Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

1. Αν οι ρίζες του πολυωνύμου p είναι απλές και διαφορετικές ανά δύο, τότε για τις ακολουθίες λύσεων $(y_j^n)_{n=0,1,\dots}$ ισχύει $y_j^n = z_j^n$ και αποτελούν θεμελιώδες σύστημα της ομογενούς εξίσωσης (1.24).
2. Αν το πολυώνυμο p έχει πολλαπλές ρίζες, τότε για τις ακολουθίες λύσεων $(y_j^n)_{n=0,1,\dots}$ ισχύει:

$$\begin{cases} y_1^n = z^n \\ y_2^n = n z^n \\ \vdots \\ y_\nu^n = n(n-1) \dots (n-\nu+2) z^n \end{cases}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (1.26)$$

όπου ν η πολλαπλότητα της ρίζας z . Οι λύσεις αποτελούν ένα θεμελιώδες σύστημα της ομογενούς εξίσωσης διαφορών (1.24). Η απόδειξη παραλείπεται.

Κεφάλαιο 2

Μέθοδοι απλού βήματος

Στο παρόν κεφάλαιο συστήνονται συνοπτικά οι μέθοδοι απλού βήματος (one-step methods), που αποτελούν μία κατηγορία των αριθμητικών μεθόδων για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Ονομάζονται μέθοδοι «ενός βήματος» επειδή απαιτούν μόνο τη λύση στο τρέχον χρονικό βήμα για να υπολογίσουν τη λύση στο επόμενο χρονικό βήμα. Κάποιες δημοφιλείς μονοβηματικές μέθοδοι είναι η μέθοδος του Euler με ορισμένες γενικεύσεις της και οι μέθοδοι Runge-Kutta, οι οποίες χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των αρχικών τιμών στις μεθόδους πρόβλεψης-διόρθωσης όπως θα δούμε σε επόμενο κεφάλαιο. Αυτές οι μέθοδοι διαφέρουν ως προς την ακρίβεια της προσέγγισης και το υπολογιστικό κόστος. Είναι εύκολες και αποτελεσματικές στην εφαρμογή τους, όμως μπορεί να μην είναι αρκετά ακριβείς για ορισμένα προβλήματα, ιδιαίτερα εάν η λύση παρουσιάζει ακαμψία ή εάν απαιτείται υψηλό επίπεδο ακρίβειας.

2.1 Μέθοδος Euler

Έστω ότι έχουμε το πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), & a \leq x \leq b, \\ y(a) = y_0, \end{cases} \quad (2.1)$$

και μια ομοιόμορφη διαμέριση του διαστήματος $[a, b]$, δηλαδή με $N \in \mathbb{N}$ θέτουμε βήμα $h = \frac{(b-a)}{N}$ και έχουμε $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, \dots, N$.

Η πιο απλή μέθοδος που προσεγγίζει τις λύσεις y_1, y_2, \dots, y_N προτάθηκε από τον μαθηματικό Leonhard Euler (1768) και δίνεται από τον εξής αναδρομικό τύπο:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), & n = 0, 1, \dots, N-1, \\ y_0. \end{cases} \quad (2.2)$$

Η μέθοδος αυτή καλείται άμεση μέθοδος Euler και μπορεί να κατασκευαστεί με πολλούς τρόπους.

1. Ολοκλήρωση: Έστω $y(x)$ η λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (2.1). Θα ολοκληρώσουμε την $y' = f(x, y)$ στο διάστημα $[x_n, x_{n+1}]$ και θα λάβουμε:

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

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

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx, \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.3)$$

Το ολοκλήρωμα στην εξίσωση (2.3) υπολογίζεται ως το εμβαδόν του χωρίου κάτω από την καμπύλη $y' = f(x, y(x))$ μεταξύ των σημείων x_n και x_{n+1} . Θα αντικαταστήσουμε το $f(x, y(x))$ με την τιμή του $f(x_n, y(x_n))$ και θα προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα με το εμβαδόν του ορθογωνίου.

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

Οπότε προκύπτει η σχέση:

$$y(x_{n+1}) \cong y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)), \quad n = 0, 1, \dots, N-1.$$

Τέλος, οι προσεγγιστικές τιμές y_{n+1} και y_n θα αντικαταστήσουν τις τιμές $y(x_{n+1})$ και $y(x_n)$ και προκύπτει ο τύπος του Euler:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots, N-1.$$

2. Παραγωγήσιση: Έστω y η πραγματική λύση του προβλήματος (2.1). Με βάση τον ορισμό της παραγώγου στο σημείο x_n έχουμε:

$$y'(x_n) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(x_n + h) - y(x_n)}{h}$$

$$y'(x_n) \cong \frac{y(x_n + h) - y(x_n)}{h}$$

$$y(x_n + h) \cong y(x_n) + hy'(x_n).$$

Τέλος, θα αντικαταστήσουμε τις τιμές $y(x_n)$ και $y'(x_n)$ με τις τιμές προσέγγισης y_n και y'_n αντίστοιχα, και θα προκύψει ο τύπος της άμεσης μεθόδου του Euler:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, \dots, N.$$

3. Ανάπτυγμα Taylor: Θεωρούμε ότι η λύση $y(x)$ του προβλήματος (2.1) έχει ανάπτυγμα Taylor γύρω από το σημείο x_n . Κατά συνέπεια έχουμε:

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \dots,$$

ή

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

Αν κρατήσουμε τους δύο πρώτους όρους της σειράς και αντικαταστήσουμε τις τιμές $y(x_{n+1})$ και $y(x_n)$ με τις αντίστοιχες προσεγγιστικές τιμές y_{n+1} και y_n , θα προκύψει η μέθοδος του Euler.

Όπως αναφέραμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, για μια αριθμητική μέθοδο μας ενδιαφέρει το κόστος της. Είναι σύνηθες, το κόστος να εκτιμάται ως το πλήθος υπολογισμών της τιμής της f ανά βήμα. Η μέθοδος Euler χρειάζεται να υπολογίσει την f στο σημείο (x_n, y_n) σε κάθε βήμα, με άλλα λόγια έναν υπολογισμό ανά βήμα. Συνεπώς, το κόστος της μεθόδου Euler είναι πολύ μικρό [3].

2.1.1 Ανάλυση μεθόδου Euler

Αρχικά, θα προσδιορίσουμε ένα φράγμα σφάλματος στο ολικό σφάλμα της μεθόδου του Euler, η απόδειξη του οποίου βρίσκεται στο ([3], Θεώρημα 2.1, σελ.32-33).

Θεώρημα 2.1.1 (Εκτίμηση σφάλματος της μεθόδου Euler)

Έστω y η λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (2.1). Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση f ικανοποιεί τη συνθήκη του Lipschitz ως προς το y και έστω y_0, \dots, y_N οι προσεγγίσεις που δίνει η μέθοδος Euler για την ομοιόμορφη διαμέριση του $[a, b]$ με βήμα $h = \frac{(b-a)}{N}$. Τότε ισχύει:

$$\max_{0 \leq n \leq N} |y(x_n) - y_n| \leq \frac{M}{2L} (e^{L(b-a)} - 1)h, \quad (2.4)$$

όπου

$$M := \max_{a \leq x \leq b} |y''(x)|,$$

και L η σταθερά Lipschitz της f ως προς y .

Με βάση το θεώρημα λοιπόν, μία εκτίμηση για το ολικό σφάλμα αποκοπής ϵ_n της μεθόδου Euler σε ένα πεπερασμένο διάστημα είναι:

$$|\epsilon_n| \leq Ch, \quad (2.5)$$

όπου C μία σταθερά ανεξάρτητη του h . Αφού το ολικό σφάλμα αποκοπής είναι ανάλογο του βήματος h στην πρώτη δύναμη, τότε η άμεση μέθοδος Euler έχει τάξη ακρίβειας ένα [1].

Ορισμός 2.1.1. Μία μονοβηματική μέθοδος είναι συνεπής ως προς το πρόβλημα αρχικών τιμών (2.1), αν για το τοπικό σφάλμα αποκοπής

$$T_n = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} - \Phi(x_n, y(x_n), h),$$

ισχύει ότι για κάθε $\delta > 0$ υπάρχει αριθμός $h(\delta)$ τέτοιος ώστε:

$$|T_n| < \delta, \quad 0 < h < h(\delta),$$

για κάθε ζεύγος σημείων $(x_n, y(x_n)), (x_{n+1}, y(x_{n+1}))$ τα οποία βρίσκονται πάνω στην καμπύλη λύσεων. Υποθέτουμε ότι η Φ και η y' είναι συνεχείς συναρτήσεις στο $[a, b]$. Επομένως, θα έχουμε:

$$\lim_{h \rightarrow 0} T_n = y'(x_n) - \Phi(x_n, y(x_n), h).$$

Έτσι, συνάγεται ότι η μέθοδος απλού βήματος είναι συνεπής, αν και μόνο αν ισχύει $\Phi(x, y, 0) = f(x, y)$.

Η άμεση μέθοδος του Euler είναι συνεπής γιατί $\Phi(x, y(x), h) := f(x, y(x))$, οπότε ισχύει η σχέση $\Phi(x, y(x), 0) = f(x, y(x))$.

Θεώρημα 2.1.2 (βλ. [6], Θεώρημα 15.1, σελ.27)

Υποθέτουμε ότι το πρόβλημα αρχικών τιμών (2.1) ικανοποιεί τις υποθέσεις του θεωρήματος Picard και η ακολουθία προσεγγίσεων $\{y_n\}$ που κατασκευάζει η γενική μονοβηματική μέθοδος ανήκει στο \mathbb{R} για $h < h_0$. Έστω ότι η συνάρτηση Φ είναι συνεχής στο $\mathbb{R} \times [0, h_0]$ και ικανοποιεί την συνθήκη του Lipschitz ως προς y δηλαδή:

$$|\Phi(x, y, h) - \Phi(x, z, h)| \leq L|y - z|,$$

στο $\mathbb{R} \times [0, h_0]$. Επιπλέον, η μέθοδος είναι συνεπής ως προς το πρόβλημα αρχικών τιμών. Έστω ότι η ακολουθία $\{y_n\}$ παράγεται σε ομοιόμορφη διαμέριση $x_n = a + nh$, $n = 1, 2, \dots, N$ και λαμβάνονται όλο και μικρότερες τιμές $h \in [0, h_0]$. Τότε, η αριθμητική λύση θα συγκλίνει στην λύση του (2.1), δηλαδή:

$$|y(x_n) - y_n| \rightarrow 0,$$

όταν $h \rightarrow 0$, $x_n \in [a, b]$.

Έστω ότι έχουμε το ακόλουθο πρόβλημα αρχικών τιμών

$$\begin{cases} y'(x) = \lambda y, & \lambda \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} \lambda < 0, \quad x \in [0, \infty], \\ y(0) = 1, \end{cases} \quad (2.6)$$

και η ακριβής λύση του $y(x) = e^{\lambda x}$ φθίνει εκθετικά στο μηδέν καθώς $x \rightarrow \infty$. Θέλουμε να ελέγξουμε αν η διακριτή ακολουθία που παράγει η άμεση μέθοδος Euler για το πρόβλημα αρχικών τιμών (2.6) παραμένει φραγμένη.

Η άμεση μέθοδος Euler για αυτό το πρόβλημα αρχικών τιμών είναι:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n, \\ y_0 = 1. \end{cases} \quad (2.7)$$

Επομένως,

$$y_{n+1} = (1 + h\lambda)y_n, \quad n \geq 0.$$

Επαγωγικά έχουμε,

$$\begin{aligned} y_n &= (1 + h\lambda)^n y_0, \quad n \geq 0 \\ y_n &= (1 + h\lambda)^n, \quad n \geq 0. \end{aligned}$$

Η ακολουθία των προσεγγίσεων $y_n = (1 + h\lambda)^n$ παραμένει φραγμένη αν ισχύει $|1 + h\lambda| \leq 1$, επομένως η περιοχή απόλυτης ευστάθειας της άμεσης μεθόδου Euler στο μιγαδικό ημιπίεδο είναι το σύνολο $S = \{z \in \mathbb{C} : |1 + h\lambda| \leq 1\}$, δηλαδή ο μοναδιαίος δίσκος με κέντρο -1 και ακτίνα 1 που περιέχεται στο αριστερό μιγαδικό ημιπίεδο $\mathbb{C}^- = \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} z \leq 0\}$ [3].

Για πολλά προβλήματα, η άμεση μέθοδος του Euler μπορεί να οδηγήσει σε επαρκώς ακριβή αποτελέσματα μόνο με πολύ μικρά μεγέθη βημάτων h . Οπότε, έχουν αναπτυχθεί πιο ακριβείς μέθοδοι, οι οποίες παρουσιάζονται στις επόμενες παραγράφους.

2.1.2 Έμμεση μέθοδος Euler

Για τον προσδιορισμό της άμεσης μεθόδου του Euler με παραγωγή χρησιμοποιήσαμε το εμπροσθοδρομικό πηλίκο διαφορών $[y(x_{n+1}) - y(x_n)]/h$. Αν χρησιμοποιήσουμε τον οπισθοδρομικό τύπο διαφορών $[y(x_n) - y(x_{n-1})]/h$ για τον προσδιορισμό της παραγώγου προκύπτει:

$$\begin{aligned} y(x_n) - y(x_{n-1}) &\cong hf(x_n, y(x_n)) \\ y(x_n) &\cong y(x_{n-1}) + hf(x_n, y(x_n)). \end{aligned}$$

Αυξάνοντας τον δείκτη από n σε $n + 1$ προκύπτει η έμμεση ή πεπλεγμένη μέθοδος του Euler:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}), & n = 0, 1, \dots, N - 1, \\ y_0. \end{cases} \quad (2.8)$$

Η μέθοδος καλείται έμμεση γιατί για να υπολογιστεί το y_{n+1} από το y_n πρέπει πρώτα να επιλυθεί μια μη γραμμική εξίσωση. Το πόσο δύσκολη είναι η επίλυση εξαρτάται από τη φύση της συνάρτησης f . Συνήθως εφαρμόζεται μια επαναληπτική μέθοδος, όπως είναι η μέθοδος σταθερού σημείου ή η μέθοδος Newton–Raphson. Μία καλή αρχική τιμή για να τρέξει ο αλγόριθμος επίλυσης της μη γραμμικής εξίσωσης είναι η λύση στο προηγούμενο βήμα, δηλαδή αν θέλουμε να υπολογίσουμε το y_{n+1} , ως αρχική τιμή θα πάρουμε το y_n [6].

Στη συνέχεια, θα ελέγξουμε αν η έμμεση μέθοδος Euler είναι απόλυτα ευσταθής. Έστω ότι έχουμε το πρόβλημα αρχικών τιμών (2.6). Τότε, η έμμεση μέθοδος Euler για το πρόβλημα είναι:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1}, \\ y_0 = 1. \end{cases} \quad (2.9)$$

Προκύπτει:

$$\begin{cases} (1 - h\lambda)y_{n+1} = y_n, \\ y_0 = 1. \end{cases}$$

Εφαρμόζοντας επαναληπτικά τον τύπο βλέπουμε ότι δίνει τις προσεγγίσεις:

$$y_n = \frac{1}{(1 - h\lambda)^n} \cdot y_0, \quad n \geq 0,$$

$$y_n = \frac{1}{(1 - h\lambda)^n}, \quad n \geq 0.$$

Άρα, η περιοχή απόλυτης ευστάθειας της έμμεσης μεθόδου Euler είναι το σύνολο $S = \{z \in \mathbb{C} : |1 - z| \leq 1\}$, δηλαδή το εξωτερικό του μοναδιαίου δίσκου με κέντρο 1 και ακτίνα 1. Αφού η περιοχή απόλυτης ευστάθειας περιέχει όλο το αριστερό μιγαδικό ημιπίεδο, συμπεραίνουμε ότι η έμμεση μέθοδος του Euler είναι A-ευσταθής. [3].

Η έμμεση μέθοδος Euler έχει τάξη ακρίβειας 1, οπότε ισχύει και για αυτήν η εκτίμηση σφάλματος:

$$\max_{0 \leq n \leq N} |y(x_n) - y_n| \leq Ch,$$

όπου C σταθερά ανεξάρτητη του h .

Συνοψίζοντας, η έμμεση ή πεπλεγμένη μέθοδος Euler έχει μεγάλο υπολογιστικό κόστος σε κάθε βήμα και μικρή τάξη ακρίβειας, κάτι που περιορίζει αρκετά την χρήση της. Ωστόσο, το πλεονέκτημα της είναι η μεγάλη περιοχή απόλυτης ευστάθειας της μεθόδου σε σχέση με την αντίστοιχη άμεση μέθοδο.

2.1.3 Μέθοδος τραπεζίου

Ένα μειονέκτημά της άμεσης και της έμμεσης μεθόδου Euler είναι η χαμηλή τάξη ακρίβειας. Στη συνέχεια, παρουσιάζεται μία μέθοδος που έχει μεγαλύτερη τάξη ακρίβειας και η ιδιότητα της ευστάθειας ισχύει για οποιοδήποτε μέγεθος βημάτων.

Για τον προσδιορισμό της άμεσης μεθόδου του Euler με ολοκλήρωση, προσεγγίσαμε το ολοκλήρωμα με το εμβαδόν του ορθογωνίου. Έστω ότι θα προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα με τον τύπο του τραπεζίου, δηλαδή με το $(h/2)[f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))]$. Τότε θα πάρουμε την αριθμητική μέθοδο της μορφής:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})], & n = 0, 1, \dots, N - 1, \\ y_0, \end{cases} \quad (2.10)$$

η οποία ονομάζεται μέθοδος του τραπεζίου ή μέθοδος του Crank-Nicolson.

Η μέθοδος αυτή προσεγγίζει τη λύση στα διάφορα σημεία της διαμέρισης με μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με την άμεση μέθοδο Euler. Είναι έμμεση, αφού απαιτείται η επίλυση μιας μεθόδου σε κάθε σημείο x_{n+1} για τον υπολογισμό της y_{n+1} .

Θα εφαρμόσουμε την μέθοδο του τραπεζίου στο πρόβλημα αρχικών τιμών (2.6) για να βρούμε το χωρίο απόλυτης ευστάθειας και θα παραχθεί η σχέση:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[\lambda y_n + \lambda y_{n+1}], \\ y_0 = 1, \end{cases}$$

ή

$$\begin{cases} (1 - \frac{h\lambda}{2})y_{n+1} = (1 + \frac{h\lambda}{2})y_n, \\ y_0 = 1. \end{cases}$$

Οπότε, προκύπτει ο αναγωγικός τύπος:

$$y_n = \left(\frac{1 + h\lambda/2}{1 - h\lambda/2} \right)^n y_0 = \left(\frac{1 + h\lambda/2}{1 - h\lambda/2} \right)^n, \quad n \geq 0.$$

Η περιοχή απόλυτης ευστάθειας περιέχει ολόκληρο το αριστερό μιγαδικό ημιεπίπεδο, άρα η μέθοδος του τραπεζίου είναι A-ευσταθής [9].

Η μέθοδος του τραπεζίου έχει τάξη ακρίβειας 2 και η εκτίμηση του σφάλματος της είναι:

$$\max_{0 \leq n \leq N} |y(x_n) - y_n| \leq Ch^2,$$

όπου C σταθερά ανεξάρτητη του h .

2.1.4 Βελτιωμένη μέθοδος Euler

Αν στην μέθοδο του τραπεζίου

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \left[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}) \right], \quad n = 0, 1, \dots, N-1,$$

χρησιμοποιήσουμε την άμεση μέθοδο του Euler

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots, N-1,$$

για να προσεγγίσουμε την τιμή της $y(x_{n+1})$, τότε θα προκύψει η μέθοδος:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \left[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n)) \right], \\ y_0. \end{cases} \quad n = 0, 1, \dots, N-1,$$

(2.11)

Η μέθοδος αυτή ονομάζεται βελτιωμένη μέθοδος του Euler ή αλλιώς μέθοδος του Heun. Ουσιαστικά, είναι μια μέθοδος δύο βημάτων, αφού πρώτα υπολογίζουμε το $y_n + hf_n$ από τον άμεσο τύπο του Euler και ακολούθως χρησιμοποιούμε αυτό το αποτέλεσμα για τον υπολογισμό του y_{n+1} [1].

Εφαρμόζουμε την μέθοδο του Heun στο πρόβλημα αρχικών τιμών (2.6) και προκύπτει:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[\lambda y_n + \lambda(y_n + h\lambda y_n)], \\ y_0 = 1, \end{cases}$$

ή

$$\begin{cases} y_{n+1} = \left[1 + \frac{h\lambda}{2} + \frac{h\lambda}{2} + \frac{(h\lambda)^2}{2} \right] y_n, \\ y_0 = 1. \end{cases}$$

Οπότε, ο αναγωγικός τύπος είναι:

$$y_n = \left[1 + h\lambda + \frac{(h\lambda)^2}{2} \right]^n y_0 = \left[1 + h\lambda + \frac{(h\lambda)^2}{2} \right]^n, \quad n \geq 0.$$

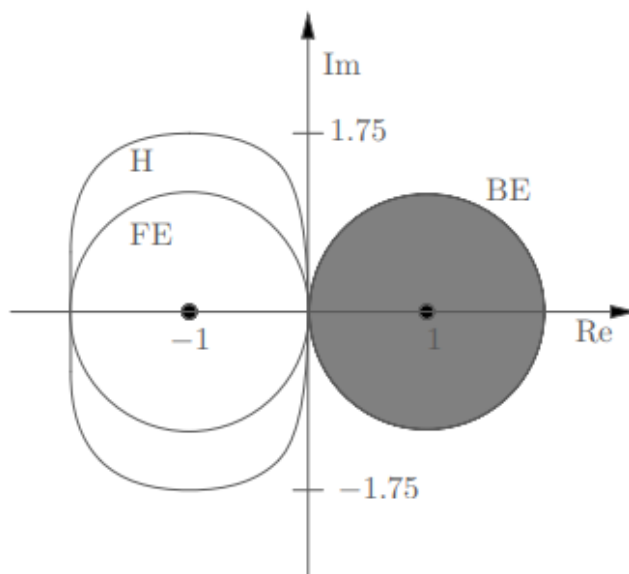
Η περιοχή απόλυτης ευστάθειας της μεθόδου Heun είναι μεγαλύτερη από την αντίστοιχη της άμεσης μεθόδου Euler αλλά τα όρια της στον άξονα των πραγματικών αριθμών είναι τα ίδια [9].

Η μέθοδος του Heun έχει την ίδια τάξη ακρίβειας με την μέθοδο του τραπεζίου, οπότε ισχύει:

$$\max_{0 \leq n \leq N} |y(x_n) - y_n| \leq ch^2,$$

όπου c σταθερά ανεξάρτητη του h .

Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται η περιοχή απόλυτης ευστάθειας για τις μεθόδους άμεση Euler, έμμεση Euler και Heun .



Σχήμα 2.1: Περιοχή απόλυτης ευστάθειας για την άμεση μέθοδο Euler (FE), την έμμεση μέθοδο Euler (BE) και την μέθοδο του Heun(H). Η περιοχή απόλυτης ευστάθειας της έμμεσης μεθόδου Euler βρίσκεται έξω από το γραμμοσκιασμένο χωρίο [9]

Συνοψίζοντας, η έμμεση μέθοδος του Euler και η έμμεση μέθοδος του τραπεζίου είναι A-ευσταθής. Η ιδιότητα αυτή δεν μπορεί να γενικευτεί για όλες τις έμμεσες μεθόδους. Η άμεση μέθοδος Euler και η βελτιωμένη μέθοδος Euler έχουν μικρότερη περιοχή απόλυτης ευστάθειας. Τέλος, όλες οι παραπάνω μέθοδοι ανήκουν στην κατηγορία των Runge-Kutta μεθόδων, τις οποίες θα μελετήσουμε στην επόμενη ενότητα.

2.2 Μέθοδοι Runge-Kutta

Μια πολύ δημοφιλής κατηγορία μεθόδων αριθμητικής επίλυσης προβλημάτων αρχικών τιμών είναι οι μέθοδοι Runge-Kutta. Αναπτύχθηκαν γύρω στο 1905 από τους Γερμανούς μαθηματικούς Carl Runge και Wilhelm Kutta. Είναι μονοβηματικές μέθοδοι, δηλαδή για τον προσδιορισμό της y_{n+1} χρησιμοποιείται η προηγούμενη τιμή της y_n , και αποφεύγουν τον υπολογισμό παραγώγων της συνάρτησης $f(x, y)$. Η βασική ιδέα των μεθόδων Runge-Kutta είναι ο υπολογισμός της λύσης σε ένα βήμα υπολογίζοντας τη λύση της f σε ενδιάμεσα σημεία μεταξύ του τρέχοντος βήματος και του επόμενου βήματος. Στοχεύουν σε μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με τις μεθόδους του Euler [10].

Μια μέθοδος Runge-Kutta s σταδίων ορίζεται ως εξής:

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(x_n, y_n, h), \quad n \geq 0, \quad (2.12)$$

όπου Φ είναι η συνάρτηση αύξησης που ορίζεται ως:

$$\Phi(x_n, y_n, h) = \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (2.13)$$

όπου

$$k_i = f(x_n + hc_i, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), \quad i = 1, 2, \dots, s,$$

και

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1, \dots, s.$$

Μία γενική μονοβηματική μέθοδος χαρακτηρίζεται από τις παραμέτρους a_{ij} , b_i , c_i , k_i . Οι συντελεστές k_i ονομάζονται εσωτερικά στάδια της μεθόδου ή αλλιώς κλίση, τα a_{ij} και b_i είναι τα βάρη και τα c_i είναι οι κόμβοι της μεθόδου. Η θεωρητική τεκμηρίωση των μεθόδων αυτών έγινε από τον John Butcher, ο οποίος χρησιμοποίησε έναν πίνακα για την αναπαράσταση των μεθόδων γνωστό ως Butcher array ή Butcher tableau:

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & & & & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array}$$

ή

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$$

όπου $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{s \times s}$, $b = (b_1, \dots, b_s)^T \in \mathbb{R}^s$ και $c = (c_1, \dots, c_s)^T \in \mathbb{R}^s$.

Αν οι συντελεστές $a_{ij} = 0$ για $j \geq i$, $i = 1, \dots, s$ δηλαδή ο πίνακας A είναι γνήσια κάτω τριγωνικός, τότε κάθε k_i μπορεί να υπολογιστεί από τους προηγούμενους συντελεστές k_1, \dots, k_{i-1} που έχουν ήδη προσδιοριστεί. Σε αυτήν την περίπτωση η μέθοδος Runge-Kutta είναι άμεση. Όλες οι άλλες μέθοδοι λέγονται έμμεσες ή πεπλεγμένες, αφού απαιτείται η επίλυση ενός μη γραμμικού συστήματος μεγέθους s για τον υπολογισμό των εσωτερικών σταδίων k_i [3].

Μία άμεση μέθοδος Runge-Kutta s σταδίων έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(x_n, y_n), \\
 k_2 &= f(x_n + hc_2, y_n + ha_{21}k_1), \\
 k_3 &= f(x_n + hc_3, y_n + h(a_{31}k_1 + a_{32}k_2)), \\
 &\vdots \\
 k_s &= f(x_n + hc_s, y_n + h(a_{s1}k_1 + a_{s2}k_2 + \dots + a_{s,s-1}k_{s-1})), \\
 y_{n+1} &= y_n + h(b_1k_1 + b_2k_2 + \dots + b_s k_s).
 \end{aligned}
 \tag{2.14}$$

Τότε, ο πίνακας Butcher γράφεται:

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & & & & \\
 c_2 & a_{21} & & & \\
 c_3 & a_{31} & a_{32} & & \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
 c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} & b_s
 \end{array}$$

Παρατηρούμε ότι το μητρώο με $s = 1$

$$\begin{array}{c|c}
 0 & 0 \\
 \hline
 & 1
 \end{array}$$

περιγράφει την άμεση μέθοδο του Euler. Πράγματι, έχουμε

$$\begin{cases}
 y_{n,1} = y_n, \\
 y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n).
 \end{cases}
 \tag{2.15}$$

2.2.1 Άμεση μέθοδος Runge-Kutta δύο σταδίων

Μία μέθοδος με $s = 2$ στάδια γράφεται:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + h(b_1k_1 + b_2k_2), \\
 k_1 &= f(x_n, y_n), \\
 k_2 &= f(x_n + hc_2, y_n + ha_{21}k_1).
 \end{aligned}
 \tag{2.16}$$

Για να οριστεί η μέθοδος πρέπει να προσδιορίσουμε τους συντελεστές a_{ij} , b_i , c_i ταιριάζοντας όρους στα αναπτύγματα των σειρών Taylor. Η τάξη ακρίβειας μιας μεθόδου είναι ο εκθέτης της μικρότερης δύναμης του h που δεν μπορεί να ταιριαστεί.

Αρχικά, η μέθοδος θα πρέπει να είναι συνεπής, δηλαδή πρέπει να ισχύει $\Phi(x, y, 0) = f(x, y)$. Οπότε,

$$\Phi(x, y, h) = b_1f(x, y) + b_2f(x + hc_2, y + ha_{21})f(x, y)$$

$$\Phi(x, y, 0) = b_1f(x, y) + b_2f(x, y)$$

$$\Phi(x, y, 0) = (b_1 + b_2)f(x, y).$$

Επομένως, λόγω της συνέπειας θα πρέπει να ισχύει:

$$b_1 + b_2 = 1. \quad (2.17)$$

Η εξίσωση αυτή ονομάζεται εξίσωση πρώτης τάξης της μεθόδου. Έπειτα, θα μεγιστοποιήσουμε την τάξη ακρίβειας της μεθόδου για να προκύψουν κάποιες σχέσεις για τους συντελεστές. Το ανάπτυγμα της $y(x)$ σε σειρά Taylor είναι:

$$y(x_n + h) = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}f'(x_n, y_n) + \dots + \frac{h^s}{s!}f^{(s-1)}(x_n, y_n) + \dots .$$

Για απλοποίηση θα χρησιμοποιήσουμε τους συμβολισμούς:

$$f = f(x, y), \quad f_x = \frac{\partial}{\partial x}f(x, y), \quad f_{xx} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}f(x, y), \quad f_{xy} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}f(x, y), \quad \dots$$

Οπότε προκύπτει,

$$y(x_n + h) = y_n + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y f) + \frac{h^3}{6}(f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_y f_x + f_y^2 f) + \dots \quad (2.18)$$

Επιπλέον, θα αναπτύξουμε το k_2 σε σειρά Taylor:

$$k_2 = f + (hc_2 f_x + ha_{21} k_1 f_y) + \left(\frac{1}{2}(hc_2)^2 f_{xx} + (hc_2)(ha_{21} k_1) f_{xy} + \frac{1}{2}(ha_{21} k_1)^2 f_{yy} \right) + O(h^3).$$

Αντικαθιστούμε τις εκφράσεις των k_1 και k_2 στην μέθοδο και προκύπτει:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2) \\ y_{n+1} &= y_n + h(b_1 + b_2)f + h^2 b_2 (c_2 f_x + a_{21} f f_y) \\ &\quad + \frac{1}{2} h^3 b_2 (c_2^2 f_{xx} + 2c_2 a_{21} f f_{xy} + a_{21}^2 f^2 f_{yy}) + O(h^4). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Η μέγιστη τάξη ακρίβειας της μεθόδου 2-σταδίων είναι δύο, αφού τα αναπτύγματα (2.18) και (2.19) συμφωνούν μέχρι τους όρους που εξαρτώνται από το h^2 . Αυτό σημαίνει πως θα πρέπει να ισχύουν οι εξισώσεις:

$$\begin{cases} b_2 c_2 = \frac{1}{2} \\ b_2 a_{21} = \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (2.20)$$

οι οποίες ονομάζονται εξισώσεις δεύτερης τάξης της μεθόδου. Επομένως, οι τρεις εξισώσεις τάξης της μεθόδου είναι:

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ b_2 c_2 = \frac{1}{2} \\ c_2 = a_{21}. \end{cases} \quad (2.21)$$

Το σύστημα έχει τρεις εξισώσεις και τέσσερις αγνώστους, άρα μπορεί να ορίσει μια μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων της μορφής:

$$b_1 = 1 - \frac{1}{2c_2}, \quad b_2 = \frac{1}{2c_2}, \quad c_2 = a_{21}.$$

Για $c_2 = 1$ προκύπτουν οι συντελεστές $a_{21} = 1$, $b_1 = \frac{1}{2}$, $b_2 = \frac{1}{2}$. Η μέθοδος γράφεται:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n), \\ k_2 &= f(x_n + h, y_n + hk_1), \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}h(k_1 + k_2), \end{aligned} \quad (2.22)$$

και είναι η γνωστή μέθοδος του τραπεζίου.

2.2.2 Άμεση μέθοδος Runge-Kutta τριών σταδίων

Μία μέθοδος με $s = 3$ στάδια γράφεται:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + b_3 k_3), \\
 k_1 &= f(x_n, y_n), \\
 k_2 &= f(x_n + hc_2, y_n + ha_{21}k_1), \\
 k_3 &= f(x_n + hc_3, y_n + ha_{31}k_1 + ha_{32}k_2), \\
 c_2 &= a_{21}, \quad c_3 = a_{31} + a_{32}.
 \end{aligned}
 \tag{2.23}$$

Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία όπως στην προηγούμενη ενότητα, προκύπτει ότι η τάξη ακρίβειας της μεθόδου είναι τρία αν ικανοποιούνται οι εξισώσεις:

$$\begin{cases}
 b_1 + b_2 + b_3 = 1 \\
 b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{1}{2} \\
 b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{1}{3} \\
 b_3 c_2 a_{32} = \frac{1}{6}.
 \end{cases}
 \tag{2.24}$$

Λύνοντας το σύστημα έχουμε την ακόλουθη οικογένεια λύσεων:

$$\begin{aligned}
 b_1 &= \frac{2 - 3(c_2 + c_3 - 2c_2c_3)}{6c_2c_3}, \\
 b_2 &= \frac{2 - 3c_3}{6c_2(c_2 - c_3)}, \\
 b_3 &= \frac{3c_2 - 2}{6c_3(c_2 - c_3)}, \\
 a_{32} &= \frac{1}{6c_2b_3}.
 \end{aligned}$$

Αν θέσουμε $c_2 = \frac{1}{2}$ και $c_3 = 1$ τότε προκύπτουν οι συντελεστές

$$b_1 = \frac{1}{6}, \quad b_2 = \frac{2}{3}, \quad b_3 = \frac{1}{6}, \quad a_{21} = \frac{1}{2}, \quad a_{31} = -1, \quad a_{32} = 2.$$

Η μέθοδος αυτή καλείται κλασική μέθοδος Runge-Kutta τρίτης τάξης και ορίζεται ως εξής:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(x_n, y_n), \\
 k_2 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1\right), \\
 k_3 &= f(x_n + h, y_n - hk_1 + 2hk_2), \\
 y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3).
 \end{aligned}
 \tag{2.25}$$

2.2.3 Άμεση μέθοδος Runge-Kutta τεσσάρων σταδίων

Έστω ότι $s = 4$, τότε η μέθοδος γράφεται:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + h(b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3 + b_4k_4), \\
 k_1 &= f(x_n, y_n), \\
 k_2 &= f(x_n + hc_2, y_n + a_{21}hk_1), \\
 k_3 &= f(x_n + hc_3, y_n + ha_{31}k_1 + ha_{32}k_2), \\
 k_4 &= f(x_n + hc_4, y_n + ha_{41}k_1 + ha_{42}k_2 + ha_{43}k_3), \\
 c_2 &= a_{21}, \quad c_3 = a_{31} + a_{32}, \quad c_4 = a_{41} + a_{42} + a_{43}.
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

Η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη μέθοδος είναι η κλασική μέθοδος των Runge-Kutta τεσσάρων σταδίων και συχνά αναφέρεται ως RK4. Αυτή η μέθοδος προσεγγίζει τη λύση στο επόμενο χρονικό βήμα υπολογίζοντας τέσσερα ενδιάμεσα σημεία, το καθένα με διαφορετικό βάρος, και στη συνέχεια λαμβάνοντας ένα σταθμισμένο μέσο όρο αυτών των ενδιάμεσων σημείων. Είναι άμεση, η τάξη ακρίβειας είναι 4 και δίνεται από τον τύπο:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(x_n, y_n), \\
 k_2 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1\right), \\
 k_3 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2\right), \\
 k_4 &= f(x_n + h, y_n + hk_3), \\
 y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

Μέχρι στιγμής, η τάξη ακρίβειας των μεθόδων είναι ίση με το πλήθος των σταδίων, όταν αυτό είναι μέχρι και τέσσερα. Η ακόλουθη πρόταση καθορίζει μια σχέση μεταξύ της τάξης ακρίβειας και τον αριθμό των σταδίων των άμεσων μεθόδων Runge-Kutta.

Πρόταση 2.2.1 (βλ. [9], Property 11.4, σελ. 510-511)

Η τάξη ακρίβειας p μιας άμεσης μεθόδου Runge-Kutta s σταδίων δεν μπορεί να είναι μεγαλύτερη από s , δηλαδή $p \leq s$. Επίσης, δεν υπάρχει μέθοδος με τάξη ακρίβειας p που να έχει p στάδια υπολογισμού όταν $p \geq 5$.

Συγκεκριμένα, όταν η τάξη ακρίβειας κυμαίνεται μεταξύ 1 και 8, ο ελάχιστος αριθμός σταδίων που απαιτούνται για να ληφθεί μια μέθοδος αντίστοιχης τάξης φαίνεται στον παρακάτω πίνακα:

<i>order</i>	1	2	3	4	5	6	7	8
<i>s_{min}</i>	1	2	3	4	6	7	9	11

Επομένως, γίνεται αντιληπτό ότι ο μέγιστος αριθμός σταδίων για τον οποίο η τάξη της μεθόδου δεν είναι μικρότερη από τον αριθμό των σταδίων είναι τέσσερα. Για αυτόν το λόγο, η μέθοδος Runge-Kutta 4 σταδίων είναι η πιο διαδεδομένη και χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των αρχικών τιμών στις πολυβηματικές μεθόδους που θα μελετήσουμε στην συνέχεια.

2.2.4 Ευστάθεια μεθόδων Runge-Kutta

Ορισμός 2.2.1. Μία μέθοδος Runge-Kutta είναι ευσταθής, αν για κάθε πρόβλημα αρχικών τιμών (2.1), το οποίο ικανοποιεί τις υποθέσεις του θεωρήματος Picard, υπάρχει

σταθερά C , ανεξάρτητη του h , τέτοια ώστε για τις ακολουθίες προσεγγίσεων $\{y_n\}$ και $\{z_n\}$ που κατασκευάζει η μέθοδος Runge-Kutta να ισχύει:

$$\max_{1 \leq n \leq N} |y_n - z_n| \leq C |y_0 - z_0|. \quad (2.28)$$

Για να προσδιορίσουμε την περιοχή απόλυτης ευστάθειας μίας μεθόδου Runge-Kutta s -σταδίων, θα την εφαρμόσουμε στο πρόβλημα δοκιμής (2.6), δηλαδή το:

$$\begin{cases} y'(x) = \lambda y, & \lambda \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} \lambda < 0, & x \in [0, \infty], \\ y(0) = 1. \end{cases} \quad (2.29)$$

Τότε, για τις προσεγγίσεις που προκύπτουν ισχύει

$$k_i = y_n + h\lambda \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j, \quad 1 \leq i \leq s, \quad (2.30)$$

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda \sum_{i=1}^s b_i k_i. \quad (2.31)$$

Αν I είναι ο μοναδιαίος πίνακας $s \times s$ και $e := (1, \dots, 1)^T$, τότε η (2.30) γράφεται

$$(I - h\lambda A)(k_1, \dots, k_s)^T = y_n e.$$

Αν ο $I - h\lambda A$ είναι αντιστρέψιμος πίνακας, έχουμε

$$(k_1, \dots, k_s)^T = (I - h\lambda A)^{-1} y_n e.$$

Συνοπάγεται ότι,

$$\sum_{i=1}^s b_i k_i = y_n b^T (I - h\lambda A)^{-1} e,$$

οπότε η εξίσωση (2.31) γράφεται ως εξής

$$y_{n+1} = y_n [1 + h\lambda b^T (I - h\lambda A)^{-1} e], \quad n \geq 0.$$

Επομένως,

$$y_{n+1} = R(h\lambda) y_n, \quad n \geq 0,$$

όπου $R(h\lambda)$ είναι η συνάρτηση ευστάθειας της μεθόδου και ισούται με

$$R(h\lambda) := [1 + h\lambda b^T (I - h\lambda A)^{-1} e].$$

Η συνάρτηση είναι καλά ορισμένη για κάθε μιγαδικό αριθμό $h\lambda$, με εξαίρεση τα $h\lambda$ για τα οποία ο πίνακας $I - h\lambda A$ δεν είναι αντιστρέψιμος.

Η περιοχή απόλυτης ευστάθειας S μιας μεθόδου Runge-Kutta είναι

$$S = \{h\lambda \in \mathbb{C} : |R(h\lambda)| \leq 1\}.$$

Αν η μέθοδος Runge-Kutta είναι άμεση, τότε ο πίνακας A είναι γνήσια κάτω τριγωνικός, οπότε ο πίνακας $I - h\lambda A$ είναι κάτω τριγωνικός με μονάδες στην διαγώνιο.

Άρα ισχύει $\det(I - h\lambda A) = 1$. Τότε, η συνάρτηση ευστάθειας R είναι πολυωνυμική για την μεταβλητή $h\lambda$ και μπορεί να γραφεί στην μορφή:

$$R(h\lambda) = \frac{\det(1 - h\lambda A + h\lambda e b^T)}{\det(1 - h\lambda A)}.$$

Για μία άμεση μέθοδο Runge-Kutta με s στάδια και τάξη ακρίβεια p ισχύει ότι

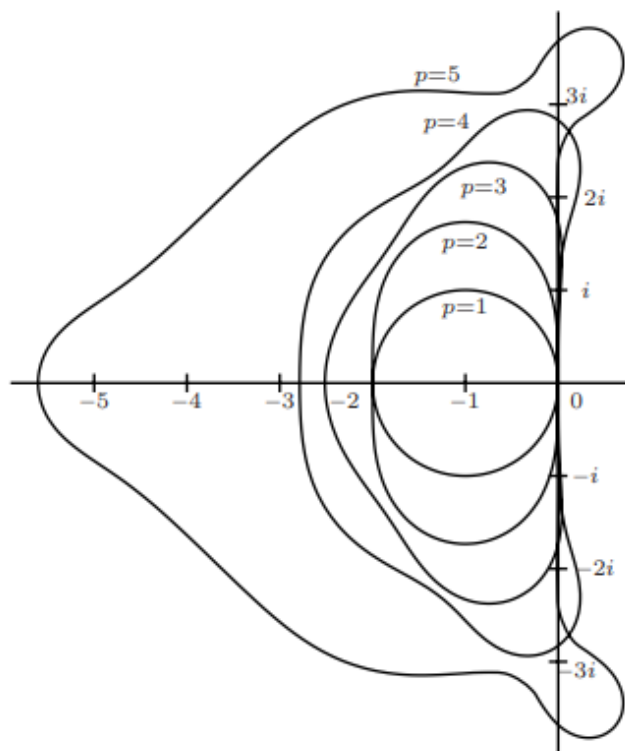
$$R(h\lambda) = 1 + h\lambda + \frac{h\lambda^2}{2!} + \dots + c_{p+1}h\lambda^{p+1} + \dots + c_p h\lambda^p.$$

Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι δεν υπάρχει άμεση A-ευσταθής μέθοδος Runge-Kutta αφού δεν μπορεί να ισχύει $|R(h\lambda)| \leq 1$ για όλα τα $h\lambda \in \mathbb{C}$ με $\text{Re}h\lambda < 0$.

Για τις άμεσες μεθόδους Runge-Kutta με $s = p$, η συνάρτηση ευστάθειας έχει την μορφή

$$R(h\lambda) = \sum_{p=0}^s \frac{1}{p!} (h\lambda)^p.$$

Οι περιοχές απόλυτης ευστάθειας των άμεσων μεθόδων Runge-Kutta τάξης ακρίβειας p σχεδιάζονται στο σχήμα (2.2). Παρατηρούμε ότι η περιοχή απόλυτης ευστάθειας αυξάνεται καθώς αυξάνεται η τάξη ακρίβειας.



Σχήμα 2.2: Περιοχή απόλυτης ευστάθειας στο μιγαδικό επίπεδο για άμεσες μεθόδους Runge-Kutta τάξης p [4]

Κεφάλαιο 3

Μέθοδοι πολλαπλού βήματος

Σε αυτό το κεφάλαιο θα μελετήσουμε τις γραμμικές μεθόδους πολλαπλού βήματος ή αλλιώς πολυβηματικές μεθόδους (multistep methods) για την επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών. Οι πολυβηματικές μέθοδοι προσδιορίζουν την αριθμητική λύση y_{n+1} χρησιμοποιώντας την πληροφορία σε περισσότερα από το τελευταίο σημείο του πλέγματος. Απαιτείται μεγαλύτερη μνήμη σε σχέση με τις μονοβηματικές μεθόδους, καθώς χρειάζεται αποθήκευση περισσότερων προηγούμενων τιμών. Οι μέθοδοι Runge-Kutta, που ασχοληθήκαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, υπερτερούν στις ιδιότητες ευστάθειας, αλλά οι πολυβηματικές μέθοδοι έχουν καλύτερο υπολογιστικό κόστος και απαιτήσεις μεγάλης ακρίβειας. Θα θεωρήσουμε σε αυτό το κεφάλαιο ότι το μέγεθος του βήματος είναι σταθερό. Επίσης, θα παρουσιάσουμε τους τύπους Adams-Bashforth και Adams-Moulton.

3.1 Εισαγωγή

Θεωρούμε πάλι το πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), & a \leq x \leq b, \\ y(a) = y_0. \end{cases} \quad (3.1)$$

Έστω $N \in \mathbb{N}$ και ομοιόμορφη διαμέριση $x_n = a + nh$, $n = 0, 1, \dots, N$ με βήμα $h := (b - a)/N$. Θα παρουσιάσουμε δύο τρόπους για την κατασκευή πολυβηματικών μεθόδων, χρησιμοποιώντας ως παράδειγμα διβηματικές μεθόδους.

1. Ολοκλήρωση: Έστω τα σημεία της διαμέρισης x_{n-1} , $x_n = x_{n-1} + h$ και $x_{n+1} = x_{n-1} + 2h$. Θα ολοκληρώσουμε την $y' = f(x, y(x))$ στο διάστημα $[x_{n-1}, x_{n+1}]$ και θα προκύψει:

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

Αν προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα στο δεξί μέλος της εξίσωσης με τον κανόνα του Simpson θα προκύψει η σχέση:

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_{n-1}) + \frac{h}{3} \{f(x_{n-1}, y(x_{n-1})) + 4f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))\}.$$

Οπότε, παίρνουμε την διβηματική μέθοδο:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1}), \quad (3.2)$$

όπου $f_{n+j} = f(x_{n+j}, y_{n+j})$, $j = -1, 0, 1$. Πρέπει οι προσεγγίσεις y_{n-1} και y_n να είναι γνωστές για τον υπολογισμό της προσέγγισης y_{n+1} .

2. Ανάπτυγμα Taylor: Αναπτύσσουμε τις συναρτήσεις $y(x_n + h)$ και $y(x_n - h)$ σε σειρά Taylor στα σημεία $x_n + h$ και $x_n - h$ αντίστοιχα:

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

και

$$y(x_n - h) = y(x_n) - hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) - \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x_n) + \dots.$$

Αφαιρώντας κατά μέλη έχουμε:

$$y(x_n + h) - y(x_n - h) = 2hy'(x_n) + 2\frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x_n) + \dots.$$

Αν κρατήσουμε μόνο τον πρώτο όρο στο δεύτερο μέλος και αντικαταστήσουμε την $y'(x_n)$ από την $f(x_n, y(x_n))$, τότε προκύπτει η προσεγγιστική σχέση:

$$y(x_n + h) - y(x_n - h) \approx 2hf(x_n, y(x_n)).$$

Οπότε, προκύπτει η διβηματική μέθοδος της μορφής:

$$y_{n+1} - y_{n-1} = 2hf_n. \quad (3.3)$$

Γενικά, μία γραμμική k -βηματική μέθοδος έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k b_j f_{n+j}, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}, \end{cases} \quad (3.4)$$

όπου a_j, b_j σταθερές που καθορίζουν την μέθοδο. Για να είναι η μέθοδος k -βηματική, θα υποθέσουμε ότι $a_k = 1$ και ότι $|a_0| + |b_0| \neq 0$.

- Αν $b_k = 0$, τότε η μέθοδος θα είναι άμεση, δηλαδή ο προσδιορισμός της λύσης y_{n+k} θα γίνεται με απλή αντικατάσταση των τιμών y_{n+i} , $i = 0, \dots, k-1$.
- Αν $b_k \neq 0$, τότε η μέθοδος θα είναι έμμεση, δηλαδή για τον προσδιορισμό της λύσης y_{n+k} απαιτείται η επίλυση της μη γραμμικής εξίσωσης:

$$y_{n+k} = hb_k f(x_{n+k}, y_{n+k}) + g_n,$$

όπου g_n δεδομένο.

Ο υπολογισμός των αρχικών τιμών y_0, y_1, \dots, y_k , που χρειαζόμαστε για την εφαρμογή μιας k -βηματικής μεθόδου για την προσέγγιση λύσης, συνήθως πραγματοποιείται μέσω μιας μεθόδου Runge-Kutta που έχει συγκρίσιμη ακρίβεια με την πολυβηματική μέθοδο, για μια δεδομένη αρχική τιμή y_0 .

Οι k -βηματικές μέθοδοι της μορφής:

$$\begin{cases} y_{n+k} - y_{n+k-1} = h \sum_{j=0}^k b_j f_{n+j}, & n = 0, \dots, N - k, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}. \end{cases} \quad (3.5)$$

ονομάζονται μέθοδοι Adams. Όταν $b_k = 0$, οι μέθοδοι λέγονται Adams-Bashforth και είναι άμεσες. Αντιθέτως, όταν $b_k \neq 0$, τότε οι μέθοδοι λέγονται Adams-Moulton και είναι πεπλεγμένες. Σε επόμενη ενότητα θα αναλύσουμε περαιτέρω αυτές τις μεθόδους.

Επιπλέον, υπάρχουν μέθοδοι της μορφής:

$$\begin{cases} y_{n+k} - y_{n+k-2} = h \sum_{j=0}^k b_j f_{n+j}, & n = 0, \dots, N - k, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}. \end{cases} \quad (3.6)$$

Αν $b_k = 0$ ονομάζονται μέθοδοι του Nyström, ενώ αν $b_k \neq 0$ τότε ονομάζονται μέθοδοι του Milne-Simpson.

Τέλος, υπάρχουν οι μέθοδοι BDF (backward differentiation formula) που δίνονται από τον τύπο:

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} = h b_k f_{n+k}, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}, \end{cases} \quad (3.7)$$

όπου $b_{-1} \neq 0$.

3.2 Ανάλυση πολυβηματικών μεθόδων

3.2.1 Τάξη ακρίβειας και συνέπεια πολυβηματικών μεθόδων

Αρχικά, ορίζουμε το πρώτο και το δεύτερο χαρακτηριστικό πολυώνυμο της μεθόδου ως εξής:

$$p(z) = \sum_{j=0}^k a_j z^j,$$

$$\sigma(z) = \sum_{j=0}^k b_j z^j,$$

με $a_k \neq 0$ και $a_0^2 + b_0^2 \neq 0$.

Το τοπικό σφάλμα αποκοπής για μία γραμμική k -βηματική μέθοδο ισούται με:

$$T_{n+k} = \sum_{j=0}^k a_j y(x_{n+j}) - h \sum_{j=0}^k b_j f(x_{n+j}, y(x_{n+j})),$$

όπου $y(x)$ η αναλυτική λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (3.1). Ισοδύναμα

$$T_{n+k} = \sum_{j=0}^k a_j y(x_{n+j}) - h \sum_{j=0}^k b_j y'(x_{n+j}).$$

Ορισμός 3.2.1. Ο γραμμικός τελεστής διαφοράς \mathcal{L} που σχετίζεται με τη γραμμική πολυβηματική μέθοδο (3.4) ορίζεται ως εξής:

$$\mathcal{L}[z(x); h] := \sum_{j=0}^k [a_j z(x + jh) - hb_j z'(x + jh)], \quad (3.8)$$

όπου $z(x) \in C^1[a, b]$ μια αυθαίρετη συνάρτηση.

Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση $z(x)$ είναι διαφορίσιμη και επεκτείνουμε το $z(x - jh)$ και το $z'(x - jh)$ ως προς x . Προκύπτει:

$$\mathcal{L}[z(x); h] = C_0 z(x) + C_1 h z'(x) + \dots + C_p h^p z^{(p)}(x) + \dots, \quad (3.9)$$

όπου οι σταθερές C_j ανεξάρτητες των y, x, h και υπολογίζονται από τους τύπους:

$$\begin{aligned} C_0 &= \sum_{j=0}^k a_j, \\ C_1 &= \sum_{j=1}^k j a_j - \sum_{j=0}^k b_j, \\ C_2 &= \sum_{j=1}^k \frac{j^2}{2!} a_j - \sum_{j=1}^k j b_j, \\ &\vdots \\ C_p &= \sum_{j=1}^k \frac{j^p}{p!} a_j - \sum_{j=1}^k \frac{j^{p-1}}{(p-1)!} b_j. \end{aligned}$$

Το τοπικό σφάλμα αποκοπής της πολυβηματικής μεθόδου μπορεί να γραφεί ως

$$T_{n+k} = \mathcal{L}[y(x_n); h],$$

όπου \mathcal{L} ο γραμμικός τελεστής διαφοράς και $y(x)$ η ακριβής λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (3.1). Αν $y(x) \in C^{p+1}[a, b]$ τότε το τοπικό σφάλμα αποκοπής δίνεται από τον τύπο:

$$T_{n+k} = C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}), \quad (3.10)$$

όπου C_{p+1} ονομάζεται σταθερά σφάλματος. Ο όρος $C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n)$ καλείται κύριο τοπικό σφάλμα αποκοπής (PLTE).

Ορισμός 3.2.2. Η πολυβηματική μέθοδος (3.4) έχει τάξη ακρίβειας p , αν p είναι ο μεγαλύτερος θετικός ακέραιος αριθμός τέτοιος ώστε για κάθε ομαλή λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (3.1) στο \mathbb{R} , να υπάρχουν σταθερές $K > 0$ και $h_0 > 0$ έτσι ώστε:

$$T_n \leq K h^p, \quad \forall h \in (0, h_0),$$

για οποιαδήποτε $(k+1)$ σημεία $\left((x_n, y(x_n)), (x_{n+1}, y(x_{n+1})), \dots, (x_{n+k}, y(x_{n+k})) \right)$ της καμπύλης λύσης.

Συνεπώς, λέμε ότι η πολυβηματική μέθοδος είναι τάξης ακρίβειας p αν και μόνο αν

$$C_0 = C_1 = \dots = C_p = 0 \quad \text{και} \quad C_{p+1} \neq 0.$$

Η τάξη ακρίβειας μιας πολυβηματικής μεθόδου δείχνει ουσιαστικά πόσο γρήγορα το σφάλμα αποκοπής τείνει στο μηδέν εάν $h \rightarrow 0$. Ωστόσο, διαφορετικές μέθοδοι της ίδιας τάξης μπορεί να έχουν διαφορετικά σφάλματα. Τότε θα διακρίνονται από τη σταθερά σφάλματος [11].

Ορισμός 3.2.3. Η πολυβηματική μέθοδος (3.4) λέγεται συνεπής ως προς το πρόβλημα αρχικών τιμών (3.1) αν το σφάλμα αποκοπής είναι τέτοιο ώστε για κάθε $\epsilon > 0$, υπάρχει $h(\epsilon) > 0$ ώστε:

$$T_n < \epsilon, \quad \forall h \in (0, h_0),$$

για οποιαδήποτε $(k+1)$ σημεία $\left((x_n, y(x_n)), (x_{n+1}, y(x_{n+1})), \dots, (x_{n+k}, y(x_{n+k})) \right)$ της καμπύλης λύσης του προβλήματος αρχικών τιμών.

Με βάση τον ορισμό, παρατηρούμε ότι για να είναι μία μέθοδος συνεπής πρέπει $T_n \rightarrow 0$ όταν $h \rightarrow 0$, δηλαδή απαιτείται $C_0 = 0$ και $C_1 = 0$. Άρα προκύπτει η ικανή και αναγκαία συνθήκη για να είναι μία πολυβηματική μέθοδος συνεπής:

$$\begin{cases} C_0 = a_0 + a_1 + \dots + a_k = 0 \\ C_1 = a_1 + 2a_2 + \dots + ka_k - (b_0 + \dots + b_k) = 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

Συνεπάγεται,

$$\begin{cases} p(1) = 0 \\ p'(1) = \sigma(1). \end{cases} \quad (3.12)$$

Συμπεραίνοντας, αν η τάξη ακρίβειας μιας μεθόδου είναι τουλάχιστον ένα, τότε η μέθοδος είναι συνεπής. Επισημαίνουμε ότι, αν $\sigma(1) = 0$, τότε $p(1) = p'(1) = 0$. Αυτό σημαίνει ότι το χαρακτηριστικό πολυώνυμο p θα έχει την $x = 1$ διπλή ρίζα και τότε η μέθοδος δεν θα ικανοποιεί την συνθήκη των ριζών. Επομένως, για μια συνεπή και μηδενικά ευσταθή πολυβηματική μέθοδο ισχύει $p(1) = \sigma(1) \neq 0$ [5].

Παράδειγμα 2. Έστω η μέθοδος Adams-Bashforth για $k = 4$ της μορφής:

$$\begin{cases} y_{n+4} - y_{n+3} = h \left(\frac{55}{24} f_{n+3} - \frac{59}{24} f_{n+2} + \frac{37}{24} f_{n+1} - \frac{9}{24} f_n \right) \\ y_0, y_1, y_2, y_3 \end{cases}$$

Οι συντελεστές του πρώτου χαρακτηριστικού πολυωνύμου είναι

$$a_4 = 1, \quad a_3 = -1, \quad a_2 = a_1 = a_0 = 0,$$

και οι συντελεστές του δεύτερου χαρακτηριστικού πολυωνύμου είναι

$$b_4 = 0, \quad b_3 = \frac{55}{24}, \quad b_2 = -\frac{59}{24}, \quad b_1 = \frac{37}{24}, \quad b_0 = -\frac{9}{24}.$$

Παρατηρούμε ότι συντελεστές ικανοποιούν την ικανή και αναγκαία συνθήκη (3.11), οπότε η μέθοδος είναι συνεπής.

3.2.2 Μηδενική ευστάθεια πολυβηματικών μεθόδων

Ορισμός 3.2.4. Μια γραμμική k -βηματική μέθοδος για την επίλυση του προβλήματος αρχικών τιμών (3.1) είναι μηδενικά-ευσταθής (zero-stable), αν υπάρχει σταθερά $C > 0$ τέτοια ώστε αν η ακολουθία $\{y_n\}$ που παράγει η μέθοδος με αρχικά δεδομένα y_0, y_1, \dots, y_{k-1} και η ακολουθία $\{z_n\}$ που παράγει η μέθοδος με δεδομένα z_0, z_1, \dots, z_{k-1} , να ισχύει

$$|y_n - z_n| \leq C \max\{|y_0 - z_0|, |y_1 - z_1|, \dots, |y_{k-1} - z_{k-1}|\}, \quad (3.13)$$

για $x_n \leq x_M$.

Η μηδενική ευστάθεια αναφέρεται στην ικανότητα μιας αριθμητικής μεθόδου να παράγει ακριβείς λύσεις όταν εφαρμόζεται σε συγκεκριμένα προβλήματα, ακόμη και όταν το μέγεθος βήματος που χρησιμοποιείται στη μέθοδο πλησιάζει το μηδέν. Επίσης, αποτελεί μια επιθυμητή ιδιότητα για πρακτικούς σκοπούς, καθώς διασφαλίζει ότι τα αριθμητικά σφάλματα δεν θα συσσωρεύονται με την πάροδο του χρόνου οδηγώντας τη λύση να γίνει ασταθής.

Η μελέτη της μηδενικής ευστάθειας συνήθως αποφεύγεται. Ορίζεται μια αλγεβρικά ισοδύναμη έννοια που λέγεται συνθήκη ρίζας (root condition), η οποία απλοποιεί την διαδικασία.

Ορισμός 3.2.5. Μια πολυβηματική μέθοδος ικανοποιεί την συνθήκη των ριζών, αν για το πρώτο χαρακτηριστικό πολυώνυμο p ισχύει ότι:

- όλες οι ρίζες του πολυωνύμου p έχουν μέτρο το πολύ ένα, δηλαδή

$$p(z) = 0 \Rightarrow |z| \leq 1,$$

- όλες οι ρίζες του πολυωνύμου p που το μέτρο τους ισούται με την μονάδα είναι απλές ρίζες, δηλαδή

$$p(z) = p'(z) = 0 \Rightarrow |z| < 1.$$

Ορισμός 3.2.6. Λέμε ότι η πολυβηματική μέθοδος ικανοποιεί την ισχυρή συνθήκη ριζών, αν πληροί την συνθήκη ριζών και η σχέση $|z| < 1$ ισχύει για μία μόνο ρίζα.

Θεώρημα 3.2.1 (βλ. [9], Theorem 11.4, σελ. 496)

Για μία συνεπή k -βηματική μέθοδο, η συνθήκη των ριζών είναι ισοδύναμη με την μηδενική ευστάθεια.

Το δεύτερο χαρακτηριστικό πολυώνυμο δεν παίζει ρόλο στην μηδενική ευστάθεια, αφού αυτή αναφέρεται στη συμπεριφορά της μεθόδου στο πρόβλημα αρχικών τιμών $y'(x) = 0$.

Παράδειγμα 3. Έστω η μέθοδος Adams-Bashforth για $k = 3$ της μορφής:

$$\begin{cases} y_{n+3} - y_{n+2} = h(b_1 f_n + b_2 f_{n+1} + b_3 f_{n+2}), \\ y_0, y_1, y_2. \end{cases}$$

Τότε οι συντελεστές του πρώτου χαρακτηριστικού πολυωνύμου είναι $a_3 = 1$, $a_2 = -1$, $a_1 = a_0 = 0$, οπότε $p(z) = z^3 - z^2 = z^2(z - 1)$. Οι ρίζες του πολυωνύμου είναι η $z = 0$, η οποία βρίσκεται μέσα στον μοναδιαίο δίσκο και η $z = 1$, η οποία είναι πάνω στον μοναδιαίο δίσκο και είναι απλή. Συνεπώς, με βάση το θεώρημα (3.2.1) η μέθοδος είναι μηδενικά ευσταθής. Με τον ίδιο τρόπο αποδεικνύεται ότι όλες οι μέθοδοι Adams είναι μηδενικά ευσταθείς.

3.2.3 Σύγκλιση πολυβηματικών μεθόδων

Αρχικά, θα ορίσουμε την έννοια της σύγκλισης μιας πολυβηματικής μεθόδου, καθώς μας ενδιαφέρει οι αριθμητικές προσεγγίσεις y_n στα σημεία της διαμέρισης x_n να βρίσκονται κοντά στις τιμές $y(x_n)$ της αναλυτικής λύσης.

Ορισμός 3.2.7. Έστω y_0, y_1, \dots, y_{k-1} τέτοια ώστε

$$\lim_{h \rightarrow 0} y_i = y_0, \quad i = 0, 1, \dots, k-1.$$

Επίσης, η k -βηματική μέθοδος (3.4) δίνει την προσέγγιση y_n της αναλυτικής λύσης. Η μέθοδος αυτή είναι συγκλίνουσα, αν για κάθε πρόβλημα αρχικών τιμών της μορφής (3.1), όπου η f ικανοποιεί τις υποθέσεις του θεωρήματος Picard, ισχύει η σχέση

$$\lim_{h \rightarrow 0} y_n = y(x_n),$$

όταν $h \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$ έτσι ώστε $a + nh \rightarrow x$.

Σύμφωνα με τον ορισμό, η προσεγγιστική λύση πρέπει να συγκλίνει προς την αναλυτική σε κάθε σημείο της διαμέρισης, όταν οι k αρχικές τιμές y_0, y_1, \dots, y_{k-1} τείνουν προς την αρχική συνθήκη. Ακολουθώντας, παραθέτουμε κάποιες προτάσεις που δείχνουν την σχέση μεταξύ συνέπειας, σύγκλισης και μηδενικής ευστάθειας στις πολυβηματικές μεθόδους.

Πρόταση 3.2.1 (βλ. [3], Πρόταση 4.2, σελ.204-206)

Κάθε συγκλίνουσα πολυβηματική μέθοδος είναι μηδενικά ευσταθής.

Απόδειξη. Έστω το πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$\begin{cases} y'(x) = 0, & 0 \leq x \leq x_M, \\ y(0) = 0. \end{cases} \quad (3.14)$$

Εφαρμόζουμε την πολυβηματική μέθοδο (3.4) σε αυτό το πρόβλημα αρχικών τιμών, οπότε έχουμε:

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} = 0, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}. \end{cases} \quad (3.15)$$

Αφού η μέθοδος είναι συγκλίνουσα, αν υποθέσουμε ότι

$$\lim_{h \rightarrow 0} y_i = 0, \quad i = 0, 1, \dots, k-1,$$

τότε, θα ισχύει

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = 0, \quad h = \frac{x_M}{n}. \quad (3.16)$$

Έστω z ρίζα του πρώτου χαρακτηριστικού πολυωνύμου $p(z)$, όπου $z = re^{i\phi}$, $r \geq 0$, $0 \leq \phi < 2\pi$. Επειδή οι συντελεστές του p είναι πραγματικοί αριθμοί, η ακολουθία $y_l = h \operatorname{Re}(z^l) = hr^l \cos(l\phi)$, $l \in \mathbb{N}_0$ ικανοποιεί την (3.15). Εξαιτίας του παράγοντα h στον ορισμό της, η ακολουθία ικανοποιεί και την (3.16).

Αν $\phi = 0$ ή $\phi = \pi$, για να ισχύει η σχέση (3.16) πρέπει

$$|y_n| = \frac{x_M}{n} r^n \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty,$$

δηλαδή $r \leq 1$, οπότε ισχύει $|z| \leq 1$.

Αν $\phi \neq 0$ και $\phi \neq \pi$, τότε

$$y_n^2 - y_{n+1}y_{n-1} = h^2 r^{2n} \cos^2(n\phi) - h^2 r^{2n} \cos[(n+1)\phi] \cos[(n-1)\phi].$$

Χρησιμοποιώντας την τριγωνομετρική ταυτότητα προκύπτει:

$$y_n^2 - y_{n+1}y_{n-1} = h^2 r^{2n} \sin^2(\phi)$$

$$\frac{y_n^2 - y_{n+1}y_{n-1}}{\sin^2(\phi)} = h^2 r^{2n}.$$

Το αριστερό μέλος της εξίσωσης για $n \rightarrow \infty$ τείνει στο μηδέν. Επομένως,

$$h^2 r^{2n} = x_M^2 \left(\frac{r^n}{n} \right)^2 \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty,$$

όποτε $|r| \leq 1$. Άρα, για κάθε ρίζα z του πρώτου χαρακτηριστικού πολυωνύμου p μιας πολυβηματικής μεθόδου ισχύει $|z| \leq 1$. Έπειτα, υποθέτουμε ότι $z \in \mathbb{C}$ είναι μια πολλαπλή ρίζα του πολυωνύμου p . Τότε ισχύει $p(z) = p'(z) = 0$. Η ακολουθία $y_l = h l \operatorname{Re}(z^l) = h l r^l \cos(l\phi)$, $l \in \mathbb{N}_0$ ικανοποιεί την μέθοδο.

Αν $\phi = 0$ ή $\phi = \pi$, για να ισχύει η σχέση (3.16) πρέπει

$$|y_n| = h n r^n = x_M r^n \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty,$$

δηλαδή $r < 1$.

Αν $\phi \neq 0$ και $\phi \neq \pi$, τότε

$$\frac{x_n^2 - x_{n+1}x_{n-1}}{\sin^2(\phi)} = r^{2n},$$

όπου $x_l := \frac{1}{h} y_l$.

Αφού $x_n := \frac{1}{x_M} y_n \rightarrow 0$, τότε $r^{2n} \rightarrow 0$, και συνεπώς $|r| < 1$. Δηλαδή, κάθε πολλαπλή ρίζα του πρώτου χαρακτηριστικού πολυωνύμου p της μεθόδου έχει μέτρο μικρότερο της μονάδας. Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι μια συγκλίνουσα πολυβηματική μέθοδος ικανοποιεί την συνθήκη των ριζών, επομένως είναι μηδενικά ευσταθής. \square

Πρόταση 3.2.2 (βλ. [3], Πρόταση 4.3, σελ. 214-216)

Κάθε συγκλίνουσα πολυβηματική μέθοδος είναι συνεπής.

Απόδειξη. Αρχικά, θέλουμε να δείξουμε ότι $p(1) = 0$. Θεωρούμε το ακόλουθο πρόβλημα αρχικών τιμών, στο οποίο $f = 0$ έτσι ώστε να μην υπεισέρχονται οι συντελεστές b_0, \dots, b_k .

$$\begin{cases} y'(x) = 0, & 0 \leq x \leq x_M, \\ y(0) = 1. \end{cases} \quad (3.17)$$

Η λύση του προβλήματος είναι $y(x) = 1$, $x \in [0, x_M]$. Η πολυβηματική μέθοδος (3.4) για αυτό το πρόβλημα γράφεται:

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} = 0, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}. \end{cases} \quad (3.18)$$

Έστω ότι για τις αρχικές τιμές ισχύει $y_0, y_1, \dots, y_{k-1} = 1$. Αφού η μέθοδος είναι συγκλίνουσα, τότε από την προηγούμενη πρόταση θα είναι μηδενικά ευσταθής και θα ισχύει:

$$p(1) = 0 \Rightarrow \sum_{j=0}^k a_j = 0.$$

Έπειτα, θέλουμε να αποδείξουμε ότι $p'(1) = \sigma(1)$, οπότε υποθέτουμε το ακόλουθο πρόβλημα αρχικών τιμών, στο οποίο $f \neq 0$ έτσι ώστε να εισχωρούν οι συντελεστές b_0, \dots, b_k .

$$\begin{cases} y'(x) = 1, & 0 \leq x \leq x_M, \\ y(0) = 0. \end{cases} \quad (3.19)$$

Η αναλυτική λύση του προβλήματος είναι $y(x) = x$, $x \in [0, x_M]$. Η πολυβηματική μέθοδος για αυτό το πρόβλημα είναι:

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k b_j, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}. \end{cases} \quad (3.20)$$

Η μέθοδος είναι συγκλίνουσα, άρα αν

$$\lim_{h \rightarrow 0} y_i = 0, \quad i = 0, 1, \dots, k-1,$$

τότε, θα ισχύει

$$\lim_{N \rightarrow \infty} y_N = x_M, \quad Nh = x_M. \quad (3.21)$$

Η μέθοδος είναι μηδενικά ευσταθής, επειδή είναι συγκλίνουσα. Οπότε, αφού $p(1) = 0$, τότε θα ισχύει $p'(1) \neq 0$. Ορίζουμε:

$$y_h^n := nh \frac{\sigma(1)}{p'(1)}, \quad n = 0, \dots, N, \quad h = \frac{x_M}{N},$$

τότε

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} &= h \frac{\sigma(1)}{p'(1)} \sum_{j=0}^k (n+j) a_j = h \frac{\sigma(1)}{p'(1)} \sum_{j=0}^k j a_j \\ &= h \frac{\sigma(1)}{p'(1)} p'(1) = h \sigma(1) = h \sum_{j=0}^k b_j. \end{aligned}$$

Οπότε, ικανοποιείται η πολυβηματική μέθοδος και σύμφωνα με την (3.21) προκύπτει

$$x_M = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(hN \frac{\sigma(1)}{p'(1)} \right) = x_M \frac{\sigma(1)}{p'(1)}.$$

Επομένως, $\frac{\sigma(1)}{p'(1)} = 1$ και $\sigma(1) = p'(1) \neq 0$, άρα η μέθοδος είναι συνεπής. \square

Στη συνέχεια, συνδυάζοντας τα παραπάνω οδηγούμαστε στο ακόλουθο θεώρημα, το οποίο είναι γνωστό ως θεώρημα ισοδυναμίας Dahlquist, που πήρε το όνομά του από τον Germund Dahlquist. Αυτό το θεώρημα είναι παρόμοιο με το θεώρημα ισοδυναμίας Lax-Richtmyer για μεθόδους πεπερασμένων διαφορών [9].

Θεώρημα 3.2.2 (Ισοδυναμίας Dahlquist)

Έστω μια πολυβηματική μέθοδος που είναι συνεπής ως προς πρόβλημα αρχικών τιμών, όπου η f ικανοποιεί την συνθήκη του Lipschitz ως προς y και το σφάλμα στα αρχικά δεδομένα τείνει στο μηδέν καθώς το h τείνει στο μηδέν. Τότε η μηδενική ευστάθεια είναι αναγκαία και ικανή συνθήκη για την σύγκλιση της μεθόδου.

Επιπλέον, αν η λύση $y(x)$ έχει συνεχείς παραγώγους μέχρι τάξη $(p + 1)$ και το τοπικό σφάλμα αποκοπής $T_n \leq Kh^p$, όπου $K > 0$ σταθερά, τότε

$$|\epsilon_n| \leq K'h^p.$$

Τέλος, ολοκληρώνουμε αυτήν την ενότητα με το ακόλουθο θεώρημα, το οποίο καθορίζει ένα ανώτατο όριο για την τάξη ακρίβειας των μεθόδων πολλαπλών βημάτων [12].

Θεώρημα 3.2.3 (Πρώτο φράγμα Dahlquist)

Δεν υπάρχει μηδενικά ευσταθής γραμμική k -βηματική μέθοδος, της οποίας η τάξη ακρίβειας να ξεπεράσει το $k + 1$ αν k είναι περιττός ή το $k + 2$ αν το k είναι άρτιος.

Για την απόδειξη του θεωρήματος, σας παραπέμπουμε στο (βλ. [4], Theorem 441C, σελ. 355-356).

3.2.4 Απόλυτη ευστάθεια πολυβηματικών μεθόδων

Στην παράγραφο αυτή θα ασχοληθούμε με τις ιδιότητες ευσταθειας των πολυβηματικών μεθόδων. Θεωρούμε ότι το βήμα h είναι ένας σταθερός θετικός αριθμός. Έστω το πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$\begin{cases} y'(x) = \lambda y, & \lambda \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} \lambda < 0, \quad x \in [0, \infty], \\ y(0) = 1. \end{cases} \quad (3.22)$$

Εφαρμόζοντας την πολυβηματική μέθοδο (3.4) σε αυτό το πρόβλημα αρχικών τιμών προκύπτει η γραμμική διαφορική εξίσωση:

$$\sum_{j=0}^k (a_j - h\lambda b_j) y_{n+j} = 0, \quad n \geq 0.$$

Η προσέγγιση της λύσης y_n γράφεται ως ένας γραμμικός συνδυασμός δυνάμεων των ριζών r_j και αντικαθιστώντας το πρώτο και δεύτερο πολυώνυμο προκύπτει:

$$\pi(r, h\lambda) = p(r) - h\lambda\sigma(r),$$

όπου το $\pi(r, h\lambda)$ λέγεται πολυώνυμο ευσταθειας της μεθόδου.

Ορισμός 3.2.8. Η πολυβηματική μέθοδος είναι απόλυτα ευσταθής αν και μόνο αν το πολυώνυμο $\pi(\cdot, h\lambda)$ ικανοποιεί την συνθήκη των ριζών. Διαφορετικά, η μέθοδος λέμε ότι είναι απόλυτα ασταθής.

Η εύρεση της περιοχής απόλυτης ευσταθειας μιας γραμμικής πολυβηματικής μεθόδου κάποιες φορές είναι περίπλοκη. Συνήθως, όσο αυξάνεται η τάξη ακρίβειας, τόσο μειώνεται η περιοχή. Ο υπολογισμός της ανάγεται στην μελέτη των ριζών του πολυωνύμου ευσταθειας, η οποία μπορεί να γίνει μέσω του κριτηρίου του Schur ή του κριτηρίου των Routh-Hurwitz (βλ. [3], Παρατήρηση 4.1, σελ.210-211).

1. Κριτήριο του Schur: Θεωρούμε ένα πολυώνυμο π βαθμού το πολύ k της μορφής

$$\pi(z) = c_0 + c_1z + \dots + c_kz^k,$$

με c_i μιγαδικούς συντελεστές και $c_0 \neq 0$, $c_k \neq 0$. Το πολυώνυμο $\pi(z)$ ονομάζεται πολυώνυμο του Schur αν όλες οι ρίζες του βρίσκονται μέσα στον ανοικτό μοναδιαίο δίσκο $D = \{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}$. Έστω το πολυώνυμο

$$\hat{\pi}(z) = \hat{c}_k + \hat{c}_{k-1}z + \dots + \hat{c}_0z^k,$$

όπου \hat{c}_i οι συζυγείς των c_i , $1, 2, \dots, k$. Επίσης, έστω το πολυώνυμο βαθμού το πολύ $k - 1$:

$$\pi_1(z) = \frac{1}{z}[\hat{\pi}(0)\pi(z) - \pi(0)\hat{\pi}(z)].$$

Θα ισχύει ότι το π είναι πολυώνυμο του Schur αν και μόνο αν ισχύει $|\hat{\pi}(0)| > |\pi(0)|$ και το π_1 είναι πολυώνυμο του Schur.

Κατά συνέπεια, το S είναι η περιοχή απόλυτης ευστάθειας της μεθόδου αν για κάθε $h\lambda \in S$ το πολυώνυμο ευστάθειας $\pi(r, h\lambda)$ είναι πολυώνυμο Schur.

2. Κριτήριο των Routh-Hurwitz: Υποθέτουμε ένα πολυώνυμο π βαθμού το πολύ k της μορφής

$$\pi(z) = a_0 + a_1z + \dots + a_kz^k,$$

με a_i πραγματικούς συντελεστές και $a_0 \neq 0$, $a_k \neq 0$. Θεωρούμε την μεταβλητή

$$\omega = \frac{1+z}{1-z} \Rightarrow z = \frac{\omega-1}{\omega+1},$$

η οποία απεικονίζει τον δίσκο $D = \{\omega \in \mathbb{C} : |\omega| < 1\}$ στο αριστερό ημιεπίπεδο $Re z < 0$. Έστω το πολυώνυμο

$$\bar{\pi}(z) = (1-z)^k \pi(\omega) = \beta_0z^k + \beta_1z^{k-1} + \dots + \beta_k.$$

Αν οι ρίζες του πολυωνύμου $\bar{\pi}$ βρίσκονται μέσα στο αριστερό ημιεπίπεδο $Re z < 0$, τότε το πολυώνυμο π είναι πολυώνυμο Schur και αντίστροφα. Για $k = 2, 3, 4$, οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες για να είναι η k -βηματική μέθοδος απόλυτα ευσταθής είναι οι εξής:

$$k = 2 : \beta_i > 0, \quad 0 \leq i \leq 2,$$

$$k = 3 : \beta_i > 0, \quad 0 \leq i \leq 3, \quad \beta_1\beta_2 - \beta_3\beta_0 > 0,$$

$$k = 4 : \beta_i > 0, \quad 0 \leq i \leq 4, \quad \beta_1\beta_2\beta_3 - \beta_3^2\beta_0 - \beta_1^2\beta_4 > 0.$$

Το ακόλουθο θεώρημα (βλ. [13], Theorem 1.4, σελ.247-248), δείχνει μια σχέση μεταξύ της τάξης μιας πολυβηματικής μεθόδου και των ιδιοτήτων της ευστάθειας .

Θεώρημα 3.2.4 (Δεύτερο φράγμα Dahlquist)

Μία άμεση γραμμική πολυβηματική μέθοδος δεν μπορεί να είναι A -ευσταθής. Επίσης, η μέγιστη τάξη ακρίβειας μιας A -ευσταθούς γραμμικής πολυβηματικής μεθόδου είναι 2. Μεταξύ των γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων που είναι A -ευσταθής με τάξη 2, η μέθοδος τραπεζίου έχει τη μικρότερη σταθερά σφάλματος $c^* = \frac{1}{12}$.

3.3 Μέθοδοι Adams

Στην ενότητα αυτή θα ασχοληθούμε με τις μεθόδους Adams. Είναι αρκετά δημοφιλής κατηγορία γραμμικών μεθόδων πολλαπλού βήματος επειδή είναι σχετικά απλές στην εφαρμογή τους και μπορούν να παρέχουν ακριβείς λύσεις για τις συνήθεις διαφορικές εξισώσεις. Είναι ιδιαίτερα χρήσιμες για την επίλυση μη δύσκαμπτων προβλημάτων και αποτελούν την βάση πολλών μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης. Αυτές οι μέθοδοι βασίζονται στην ιδέα της χρήσης ενός συνδυασμού προηγούμενων τιμών λύσης για την πρόβλεψη της τιμής της λύσης στο επόμενο βήμα. Ορίζονται από τον τύπο:

$$\begin{cases} y_{n+k} - y_{n+k-1} = h \sum_{j=0}^k b_j f_{n+j}, & n = 0, \dots, N - k, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}. \end{cases} \quad (3.23)$$

Οι άμεσες μέθοδοι ($b_k = 0$) λέγονται Adams-Bashforth, ενώ οι έμμεσες μέθοδοι ($b_k \neq 0$) ονομάζονται Adams-Moulton.

Μία ισοδύναμη μορφή του παραπάνω τύπου είναι η εξής:

$$\begin{cases} y_{n+1} - y_n = h \sum_{j=0}^k b_j f_{n+j-k+1}, \\ y_0, y_1, \dots, y_{k-1}. \end{cases} \quad (3.24)$$

Ένα πλεονέκτημα των μεθόδων Adams είναι ότι δεν απαιτούν τη χρήση παραγώγων για τον υπολογισμό της λύσης, κάτι που τις καθιστά χρήσιμες για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων σε περιπτώσεις όπου η παράγωγος είναι δύσκολο ή αδύνατο να υπολογιστεί άμεσα. Ωστόσο, έχουν ορισμένους περιορισμούς, συμπεριλαμβανομένου του γεγονότος ότι μπορεί να μην είναι κατάλληλες για την επίλυση δύσκαμπτων προβλημάτων με ακανόνιστη συμπεριφορά [5].

3.3.1 Μέθοδος Adams-Bashforth

Για την κατασκευή της πολυβηματικής μεθόδου Adams-Bashforth θα ολοκληρώσουμε την $y' = f(x, y(x))$ στο διάστημα $[x_n, x_{n+1}]$ και θα προκύψει:

$$\begin{aligned} \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x) dx &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx, \\ y(x_{n+1}) - y(x_n) &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx, \end{aligned} \quad (3.25)$$

όπου $y(x)$ η αναλυτική λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (3.1). Στις μεθόδους Adams-Bashforth, για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος στο δεξί μέλος της εξίσωσης χρησιμοποιείται το πολυώνυμο παρεμβολής Newton $P_q(x)$ βαθμού q ως μια προσέγγιση του $f(x, y(x))$. Θα συμβολίσουμε την $f(t_j, y_j)$ με f_j , $j \in \mathbb{N}$ για συντομία [1].

- Για $q = 0$, το πολυώνυμο μηδενικού βαθμού $P_0(x) = f_n$ είναι η άμεση μέθοδος του Euler, που αποτελεί τον τύπο Adams-Bashforth πρώτης τάξης και το τοπικό σφάλμα αποκοπής είναι ανάλογο του h^2 .
- Για $q = 1$, το πολυώνυμο πρώτου βαθμού είναι $P_1(x) = Ax + B$. Αφού το P_1 είναι μια προσέγγιση του $f(x, y)$ στα σημεία (x_n, y_n) και (x_{n-1}, y_{n-1}) , τότε έχουμε τις εξισώσεις:

$$P_1(x_n) = f_n \Rightarrow Ax_n + B = f_n,$$

$$P_1(x_{n-1}) = f_{n-1} \Rightarrow Ax_{n-1} + B = f_{n-1}.$$

Επιλύοντας ως προς τους συντελεστές A και B και αντικαθιστώντας $h = x_n - x_{n-1}$ λόγω της ομοιόμορφης διαμέρισης, έχουμε

$$A = \frac{f_n - f_{n-1}}{h},$$

$$B = \frac{f_{n-1}x_n - f_n x_{n-1}}{h}.$$

Άρα, το ολοκλήρωμα στην σχέση (3.25) προσεγγίζεται ως εξής:

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) \cong \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_1(x) dx$$

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) \cong \frac{A}{2}(x_{n+1}^2 - x_n^2) + B(x_{n+1} - x_n).$$

Αντικαθιστούμε τα A και B και προκύπτει:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{3}{2}hf(x_n, y(x_n)) - \frac{1}{2}hf(x_{n-1}, y(x_{n-1})).$$

Επομένως, ο τύπος του Adams-Bashforth δεύτερης τάξης είναι:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1}), \quad (3.26)$$

ο οποίος έχει τοπικό σφάλμα αποκοπής ανάλογο του h^3 .

- Για $q = 2$, το πολυώνυμο δευτέρου βαθμού $P_2(x)$ προσδιορίζεται χρησιμοποιώντας τα τρία σημεία (x_n, y_n) , (x_{n-1}, y_{n-1}) και (x_{n-2}, y_{n-2}) . Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία προκύπτει ο τύπος Adams-Bashforth τρίτης τάξης:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}). \quad (3.27)$$

Το τοπικό σφάλμα αποκοπής του τύπου τρίτης τάξης είναι ανάλογο του h^4 .

- Για $q = 3$, το πολυώνυμο τρίτου βαθμού $P_3(x)$ καθορίζεται από τα σημεία (x_n, y_n) , (x_{n-1}, y_{n-1}) , (x_{n-2}, y_{n-2}) και (x_{n-3}, y_{n-3}) . Συνεπώς, προκύπτει ο τύπος Adams-Bashforth τέταρτης τάξης:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}), \quad (3.28)$$

και το τοπικό σφάλμα αποκοπής είναι ανάλογο του h^5 .

Γενικά, μία k -βηματική μέθοδος Adams-Bashforth είναι άμεση, έχει τάξη ακρίβειας k και σταθερά σφάλματος C_{k+1} . Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται οι τύποι Adams-Bashforth για $k = 1, \dots, 6$ και τα αντίστοιχα τοπικά σφάλματα αποκοπής.

k	Τύπος	Τοπικό σφάλμα αποκοπής
1	$y_{n+1} = y_n + hf_n$	$T_{n+1} = \frac{1}{2}h^2y''(\xi)$
2	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})$	$T_{n+1} = \frac{5}{12}h^3y^{(3)}(\xi)$
3	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2})$	$T_{n+1} = \frac{3}{8}h^4y^{(4)}(\xi)$
4	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$	$T_{n+1} = \frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\xi)$
5	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}(1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} - 1274f_{n-3} + 251f_{n-4})$	$T_{n+1} = \frac{475}{1440}h^6y^{(6)}(\xi)$
6	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{1440}(4277f_n - 7923f_{n-1} + 9982f_{n-2} - 7298f_{n-3} + 2877f_{n-4} - 475f_{n-5})$	$T_{n+1} = \frac{19087}{60480}h^7y^{(7)}(\xi)$

Πίνακας 3.1: Τύποι Adams-Bashforth και τοπικό σφάλμα αποκοπής [2]

3.3.2 Μέθοδος Adams–Moulton

Η κατασκευή του τύπου Adams–Moulton γίνεται με ανάλογη διαδικασία.

- Για $q = 0$, ο τύπος του Adams–Moulton πρώτης τάξης είναι η έμμεση μέθοδος του Euler.
- Για $q = 1$, το πολυώνυμο παρεμβολής πρώτου βαθμού είναι $Q_1(x) = Cx + D$. Το Q_1 είναι μια προσέγγιση του $f(x, y)$ στα σημεία (x_n, y_n) και (x_{n+1}, y_{n+1}) , οπότε προκύπτουν οι εξισώσεις:

$$Q_1(x_n) = f_n \Rightarrow Cx_n + D = f_n,$$

$$Q_1(x_{n+1}) = f_{n+1} \Rightarrow Cx_{n+1} + D = f_{n+1}.$$

Λύνοντας ως προς C και D και αφού $h = x_{n+1} - x_n$, τότε έπεται

$$C = \frac{f_{n+1} - f_n}{h},$$

$$D = \frac{f_n x_{n+1} - f_{n+1} x_n}{h}.$$

Οπότε αντικαθιστούμε στην σχέση (3.25) και προκύπτει

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) \cong \int_{x_n}^{x_{n+1}} Q_1(x) dx$$

$$y(x_{n+1}) \cong y(x_n) + \frac{1}{2}hf(x_n, y(x_n)) + \frac{1}{2}hf(x_{n+1}, y(x_{n+1})).$$

Συνεπώς, ο τύπος του Adams–Moulton δεύτερης τάξης είναι η μέθοδος του τραπεζίου:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1}), \quad (3.29)$$

και το τοπικό σφάλμα αποκοπής είναι ανάλογο του h^3 .

- Για $q = 2$, το πολυώνυμο παρεμβολής δευτέρου βαθμού $Q_2(x)$ καθορίζεται χρησιμοποιώντας τα τρία σημεία (x_{n-1}, y_{n-1}) , (x_n, y_n) και (x_{n+1}, y_{n+1}) . Οπότε, προκύπτει ο τύπος Adams–Moulton τρίτης τάξης με τοπικό σφάλμα αποκοπής ανάλογο του h^4 ,

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}). \quad (3.30)$$

- Για $q = 3$, το πολυώνυμο παρεμβολής τρίτου βαθμού $Q_3(x)$, του οποίου οι συντελεστές υπολογίζονται από τα σημεία $(x_{n-2}, y_{n-2}), (x_{n-1}, y_{n-1}), (x_n, y_n)$ και (x_{n+1}, y_{n+1}) . Ο τύπος του Adams–Moulton τέταρτης τάξης είναι:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}). \quad (3.31)$$

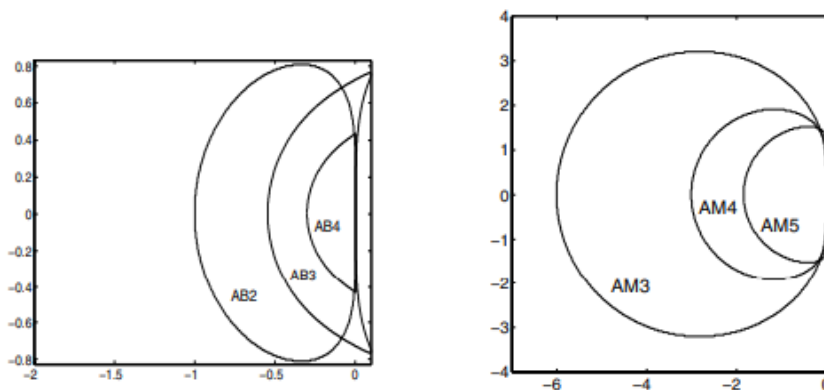
Το τοπικό σφάλμα αποκοπής της μεθόδου είναι ανάλογο του h^5 .

Συμπερασματικά, μία k -βηματική μέθοδος Adams–Moulton είναι έμμεση, έχει τάξη ακρίβειας $k+1$ και σταθερά σφάλματος C_{k+1} . Παρακάτω φαίνονται οι τύποι Adams–Moulton και τα αντίστοιχα τοπικά σφάλματα αποκοπής για $k = 1, \dots, 6$.

k	Τύπος	Τοπικό σφάλμα αποκοπής
1	$y_{n+1} = y_n + hf_{n+1}$	$T_{n+1} = -\frac{1}{2}h^2y''(\xi)$
2	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$	$T_{n+1} = -\frac{1}{12}h^3y^{(3)}(\xi)$
3	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$	$T_{n+1} = -\frac{1}{24}h^4y^{(4)}(\xi)$
4	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$	$T_{n+1} = -\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\xi)$
5	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}(251f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} + 106f_{n-2} - 19f_{n-3})$	$T_{n+1} = -\frac{3}{160}h^6y^{(6)}(\xi)$
6	$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{1440}(475f_{n+1} + 1427f_n - 798f_{n-1} + 482f_{n-2} - 173f_{n-3} + 27f_{n-4})$	$T_{n+1} = -\frac{863}{60480}h^7y^{(7)}(\xi)$

Πίνακας 3.2: Τύποι Adams–Moulton και τοπικό σφάλμα αποκοπής [2]

Στα παρακάτω σχήματα φαίνονται τα εξωτερικά των περιοχών απόλυτης ευστάθειας για κάποιες μεθόδους Adams–Bashforth και Adams–Moulton. Σε αντίθεση με τις μεθόδους Runge–Kutta, παρατηρούμε ότι όταν αυξάνεται η τάξη ακρίβειας των μεθόδων Adams μειώνεται η περιοχή απόλυτης ευστάθειας.



Σχήμα 3.1: Περιοχή απόλυτης ευστάθειας στο μιγαδικό επίπεδο των μεθόδων Adams–Bashforth 2ης,3ης, 4ης τάξης (αριστερά) και των μεθόδων Adams–Moulton 3ης,4ης,5ης τάξης (δεξιά) [9]

Κεφάλαιο 4

Μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης

Στο κεφάλαιο αυτό θα μελετήσουμε την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Θα αναφερθούν οι βασικές αρχές της μεθόδου και θα γίνει μαθηματική ανάλυση της ευστάθειας και της ακρίβειας. Επίσης, θα συζητηθούν μερικά από τα προηγμένα θέματα που σχετίζονται με τις μεθόδους, όπως μεταβλητά μεγέθη βημάτων.

4.1 Εισαγωγικά

Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, τα τοπικά σφάλματα αποκοπής των τύπων Adams-Bashforth και Adams-Moulton είναι ανάλογα της ίδιας δύναμης του μεγέθους βήματος h . Όμως, οι τύποι Adams-Moulton είναι πιο ακριβείς, αφού έχουν μικρότερη σταθερά σφάλματος. Ωστόσο, μία έμμεση μέθοδος είναι βραδύτερη, αφού πρέπει να λύσει σε κάθε βήμα ένα μη γραμμικό σύστημα για τον υπολογισμό της άγνωστη προσέγγισης y^{n+k} . Οπότε, δημιουργείται το δίλημμα, αν προτιμάται ο τύπος Adams-Bashforth που είναι άμεσος και γρηγορότερος, ή ο τύπος Adams-Moulton που είναι έμμεσος και πιο ακριβής [1].

Γι' αυτούς τους λόγους, συνδυάστηκε μία άμεση και μία έμμεση μέθοδος και δημιουργήθηκε μία νέα κατηγορία για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων που ονομάζεται μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης (predictor-corrector). Πρακτικά, γίνεται μια αρκετά ακριβής αρχική πρόβλεψη $y_{n+k}^{(0)}$ του y_{n+k} μέσω μιας βοηθητικής άμεσης k -βηματικής μεθόδου, και, ακολούθως, χρησιμοποιείται επαναληπτικά μία έμμεση μέθοδος για τον υπολογισμό των διορθώσεων $y_{n+k}^{(j)}$, $j \geq 1$. Η γενική μορφή μιας k -βηματικής μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης είναι:

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^k \tilde{a}_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{b}_j f_{n+j}, \\ \sum_{j=0}^k a_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k b_j f_{n+j}. \end{cases} \quad (4.1)$$

Υπάρχουν πολλοί τρόποι με τους οποίους μπορεί να εφαρμοστεί μια μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης. Έστω P (predict) δηλώνει μια εφαρμογή μιας άμεσης μεθόδου στο σημείο x_{n+k} , E (evaluate) μία αξιολόγηση της συνάρτησης $f(x_{n+k}, y^{(0)}(x_{n+k}))$ σε γνωστές τιμές και χρησιμοποιώντας αυτήν γίνεται μία εφαρμογή C (correct) μιας έμμεσης μεθόδου στο σημείο x_{n+k} . Το αποτέλεσμα αυτό αποθηκεύεται και χρησιμοποιείται σε επόμενο βήμα επανάληψης [14].

Μία βασική μορφή της μεθόδου είναι η ακόλουθη:

$$P : y_{n+k}^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{a}_j y_{n+j}^{(1)} = h \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{b}_j f_{n+j}^{(0)}, \quad (4.2\alpha')$$

$$E : f_{n+k}^{(0)} = f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(0)}), \quad (4.2\beta')$$

$$C : y_{n+k}^{(1)} + \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{n+j}^{(1)} = hb_k f_{n+k}^{(0)} + h \sum_{j=0}^{k-1} b_j f_{n+j}^{(0)}. \quad (4.2\gamma')$$

Η διαδικασία αυτή συμβολίζεται για συντομία με PEC ή $P(EC)^1$. Αν υποθέσουμε ότι εκτελεί $m > 1$ επαναλήψεις σε κάθε βήμα x_{n+1} , η παραπάνω διαδικασία γενικεύεται:

$$P : y_{n+k}^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{a}_j y_{n+j}^{(m)} = h \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{b}_j f_{n+j}^{(m-1)}, \quad (4.3\alpha')$$

$$E : f_{n+k}^{(q)} = f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(q)}), \quad (4.3\beta')$$

$$C : y_{n+k}^{(q+1)} + \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{n+j}^{(m)} = hb_k f_{n+k}^{(q)} + h \sum_{j=0}^{k-1} b_j f_{n+j}^{(m-1)}, \quad (4.3\gamma')$$

όπου $q = 1, \dots, m-1$. Αυτό το σύστημα συμβολίζεται ως $P(EC)^m$. Οι επαναλήψεις m βελτιώνουν την τιμή του y_{n+k} . Η επανάληψη σταματάει ανάλογα με την ακρίβεια που θέλουμε να πετύχουμε, δηλαδή πρέπει να ικανοποιηθεί κάποιο κριτήριο της μορφής:

$$\left| y_{n+k}^{(q+1)} - y_{n+k}^{(q)} \right| < \epsilon,$$

όπου $\epsilon > 0$ η ζητούμενη ακρίβεια. Είναι δυνατό να μην σταματήσουμε μετά από m επαναλήψεις και να συνεχίσουμε να επαναλαμβάνουμε την διαδικασία μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση. Αυτό θα οδηγούσε σε καλύτερη ευστάθεια, αλλά το υπολογιστικό κόστος θα αυξανόταν. Επίσης, είναι πιθανό η σύγκλιση να μην μπορεί να επιτευχθεί λόγω σφαλμάτων στρογγυλοποίησης [5] [14].

Συνήθως επιλέγουμε ο αριθμός των επαναλήψεων να είναι $m = 1$ ή $m = 2$. Αν πρέπει να διαλέξουμε μεγαλύτερο αριθμό επαναλήψεων, σημαίνει ότι το μέγεθος του βήματος h είναι μεγάλο και θα πρέπει να ελαττωθεί. Γενικά, για μικρό h το $y_{n+k}^{(q+1)}$ συγκλίνει στο y_{n+k} όταν $(q+1) \rightarrow \infty$, οπότε το h μπορεί να εκτιμηθεί από την σχέση

$$h < \frac{1}{|b_k| L},$$

όπου L η σταθερά του Lipschitz ως προς y .

Μία άλλη υλοποίηση της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης συμβολίζεται με $P(EC)^m E$, όπου στο τέλος της διαδικασίας γίνεται μία αξιολόγηση της f . Δίνεται:

$$P : y_{n+k}^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{a}_j y_{n+j}^{(m)} = h \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{b}_j f_{n+j}^{(m)}, \quad (4.4\alpha')$$

$$E : f_{n+k}^{(q)} = f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(q)}), \quad (4.4\beta')$$

$$C : y_{n+k}^{(q+1)} + \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{n+j}^{(m)} = hb_k f_{n+k}^{(q)} + h \sum_{j=0}^{k-1} b_j f_{n+j}^{(m)}, \quad (4.4\gamma')$$

$$E : f_{n+k}^{(m)} = f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(m)}). \quad (4.4\delta')$$

Μία κλασική μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης είναι αυτή που συνδυάζει τον τύπο Adams-Bashforth 4ης τάξης και τον τύπο Adams-Moulton 4ης τάξης. Τότε το σύστημα *PEC* γράφεται:

$$\begin{aligned}
 P: \quad y_{n+1}^{(0)} &= y_n^{(1)} + \frac{h}{24}(55f_n^{(0)} - 59f_{n-1}^{(0)} + 37f_{n-2}^{(0)} - 9f_{n-3}^{(0)}), \\
 E: \quad f_{n+1}^{(0)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}), \\
 C: \quad y_{n+1}^{(1)} &= y_n^{(1)} + \frac{h}{24}(9f_{n+1}^{(0)} + 19f_n^{(0)} - 5f_{n-1}^{(0)} + f_{n-2}^{(0)}),
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

όπου $n = 1, 2, \dots$

Αντίστοιχα, το σύστημα *PECE* δίνεται:

$$\begin{aligned}
 P: \quad y_{n+1}^{(0)} &= y_n^{(1)} + \frac{h}{24}(55f_n^{(1)} - 59f_{n-1}^{(1)} + 37f_{n-2}^{(1)} - 9f_{n-3}^{(1)}), \\
 E: \quad f_{n+1}^{(0)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}), \\
 C: \quad y_{n+1}^{(1)} &= y_n^{(1)} + \frac{h}{24}(9f_{n+1}^{(0)} + 19f_n^{(0)} - 5f_{n-1}^{(0)} + f_{n-2}^{(0)}), \\
 E: \quad f_{n+1}^{(1)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(1)}).
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Μία επίσης συχνή μέθοδος πρόβλεψης διόρθωσης είναι η μέθοδος του Milne που δίνεται:

$$\begin{aligned}
 P: \quad y_{n+1}^{(0)} &= y_{n-3}^{(1)} + \frac{4h}{3}(2f_n^{(1)} - f_{n-1}^{(1)} + 2f_{n-2}^{(1)}), \\
 E: \quad f_{n+1}^{(0)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}), \\
 C: \quad y_{n+1}^{(1)} &= y_{n-1}^{(1)} + \frac{h}{3}(f_{n+1}^{(0)} + 4f_n^{(0)} + f_{n-1}^{(0)}), \\
 E: \quad f_{n+1}^{(1)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(1)}).
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Ακόμη, η μέθοδος Hamming είναι μία μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης με την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned}
 P: \quad y_{n+1}^{(0)} &= y_{n-3}^{(1)} + \frac{4h}{3}(2f_n^{(1)} - f_{n-1}^{(1)} + 2f_{n-2}^{(1)}), \\
 E: \quad f_{n+1}^{(0)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}), \\
 C: \quad y_{n+1}^{(1)} &= \frac{9}{8}y_n^{(1)} - \frac{1}{8}y_{n-2}^{(1)} + \frac{3h}{8}(f_{n+1}^{(0)} + 2f_n^{(0)} - f_{n-1}^{(0)}), \\
 E: \quad f_{n+1}^{(1)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(1)}).
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Τέλος, η μέθοδος του Heun ή αλλιώς βελτιωμένη μέθοδος του Euler που παρουσιάσαμε στο δεύτερο κεφάλαιο, μπορεί να θεωρηθεί ως μία μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης, όπου η άμεση μέθοδος του Euler κάνει την πρόβλεψη και η πεπλεγμένη μέθοδος του τραπεζίου είναι ο διορθωτής.

$$\begin{aligned}
 P: \quad y_{n+1}^{(0)} &= y_n^{(1)} + hf_n^{(1)}, \\
 E: \quad f_{n+1}^{(0)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}), \\
 C: \quad y_{n+1}^{(1)} &= y_n^{(1)} + \frac{h}{2}(f_{n+1}^{(0)} + f_n^{(0)}), \\
 E: \quad f_{n+1}^{(1)} &= f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(1)}).
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

4.2 Έναρξη μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης

Για να χρησιμοποιηθεί μια μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης για την επίλυση ενός προβλήματος αρχικών τιμών, πρέπει να γνωρίζουμε τις αρχικές τιμές για τις εξαρτημένες μεταβλητές και τις παραγώγους τους. Αυτές οι τιμές λαμβάνονται συνήθως από τη δήλωση προβλήματος ή χρησιμοποιώντας κάποια άλλη μέθοδο για την προσέγγιση της λύσης στον αρχικό χρόνο. Αναφέρονται κάποιοι τρόποι εύρεση αρχικών τιμών για τις μεθόδους πρόβλεψης-διόρθωσης:

1. Δεδομένα: Σε ορισμένες περιπτώσεις, οι αρχικές τιμές για τις εξαρτημένες μεταβλητές και τις παραγώγους τους καθορίζονται απευθείας στη δήλωση προβλήματος. Για παράδειγμα, για μια διαφορική εξίσωση που μοντελοποιεί την κίνηση ενός σωματιδίου, μπορεί να δοθεί η αρχική θέση και η ταχύτητα του σωματιδίου.
2. Μέθοδος Euler: Η μέθοδος Euler είναι μια απλή αριθμητική μέθοδος και περιλαμβάνει τη λήψη ενός μόνο βήματος προς τα εμπρός από τον αρχικό χρόνο χρησιμοποιώντας την παράγωγο της εξαρτημένης μεταβλητής στον αρχικό χρόνο για την εκτίμηση της τιμής της εξαρτημένης μεταβλητής στο επόμενο χρονικό βήμα. Αυτή η τιμή μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως αρχική τιμή για τη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης.
3. Μέθοδοι Runge-Kutta: Οι μέθοδοι Runge-Kutta είναι συνήθως πιο ακριβείς από τη μέθοδο του Euler και επιλέγονται συνήθως για την εκτίμηση των αρχικών τιμών για τη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης. Επιλέγεται μια μέθοδος Runge-Kutta που έχει συγκρίσιμη ακρίβεια με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης.

4.3 Τάξη ακρίβεια και σφάλμα μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης

Τις περισσότερες φορές ο αριθμός των βημάτων της μεθόδου πρόβλεψης είναι μεγαλύτερος από αυτόν της μεθόδου διόρθωσης. Θα θεωρήσουμε ότι ο αριθμός k των βημάτων της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης είναι ίσος με τον αριθμό των βημάτων της μεθόδου πρόβλεψης. Οπότε, δεν χρειάζεται οι συντελεστές της μεθόδου διόρθωσης να ικανοποιούν την σχέση $|a_0| + |b_0| \neq 0$, όπως είχαμε υποθέσει για την ύπαρξη k -βηματικής μεθόδου. Για παράδειγμα, το ζεύγος πρόβλεψης-διόρθωσης

$$\begin{aligned} P: & y_{n+1}^{(0)} = y_n^{(1)} + hf_{n-1}^{(0)}, \\ E: & f_{n+1}^{(0)} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}), \\ C: & y_{n+1}^{(1)} = y_n^{(1)} + \frac{h}{2}(f_n^{(0)} + f_{n+1}^{(0)}), \end{aligned}$$

έχει $k = 2$ βήματα, παρόλο που η μέθοδος διόρθωσης που είναι η πεπλεγμένη μέθοδος του τραπέζιου είναι μονοβηματική [9].

Επιπρόσθετα, το σφάλμα αποκοπής της μεθόδου είναι ένας συνδυασμός του σφάλματος αποκοπής του προβλεπτή και του σφάλματος αποκοπής του διορθωτή. Θεωρούμε \bar{p} η τάξη ακρίβειας της μεθόδου πρόβλεψης και p η τάξη της μεθόδου διόρθωσης, και αντίστοιχα οι σταθερές σφάλματος $C_{\bar{p}+1}$, C_{p+1} .

Έστω $y \in C_{\hat{p}+1}$ όπου $\hat{p} = \max(\tilde{p}, p)$, τότε με βάση την σχέση (3.10) προκύπτουν οι τύποι σφάλματος για την μέθοδο πρόβλεψης και την μέθοδο διόρθωσης:

$$\begin{aligned}\tilde{L}[y(x_n); h] &= \tilde{C}_{\tilde{p}+1} h^{\tilde{p}+1} y^{(\tilde{p}+1)}(x_n) + O(h^{\tilde{p}+2}), \\ L[y(x_n); h] &= C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}).\end{aligned}\tag{4.10}$$

Για την μέθοδο πρόβλεψης ισχύει:

$$\tilde{L}[y(x_n); h] = \sum_{j=0}^k \tilde{a}_j y(x_{n+j}) - h \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{b}_j f(x_{n+j}, y(x_{n+j})),$$

και από την (4.4) έχουμε:

$$y_{n+k}^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{a}_j y_{n+j}^{(m)} = h \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{b}_j f(x_{n+j}, y_{n+j}^{(m)}).$$

Αφαιρώντας τις παραπάνω σχέσεις και χρησιμοποιώντας την υπόθεση ότι $y_{n+j}^{(q)} = y(x_{n+j})$, $j = 0, 1, \dots, k-1$, προκύπτει η σχέση:

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(0)} = \tilde{C}_{\tilde{p}+1} h^{\tilde{p}+1} y^{(\tilde{p}+1)}(x_n) + O(h^{\tilde{p}+2}).\tag{4.11}$$

Αντίστοιχα, για την μέθοδο διόρθωσης ισχύει:

$$L[y(x_n); h] = \sum_{j=0}^k a_j y(x_{n+j}) - h \sum_{j=0}^k b_j f(x_{n+j}, y(x_{n+j})),$$

και από την (4.4):

$$y_{n+k}^{(q+1)} + \sum_{j=0}^{k-1} a_j y_{n+j}^{(m)} = h b_k f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(q)}) + h \sum_{j=0}^{k-1} b_j f(x_{n+j}, y_{n+j}^{(m)}).$$

Άρα, συνδυάζοντας αυτές τις σχέσεις και χρησιμοποιώντας ξανά την υπόθεση $y_{n+j}^{(q)} = y(x_{n+j})$, $j = 0, 1, \dots, k-1$ παίρνουμε:

$$\begin{aligned}y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(q+1)} &= h b_k [f(x_{n+k}, y(x_{n+k})) - f(x_{n+k}, y_{n+k}^{(q)})] + L[y(x_n); h] \\ &= h b_k \frac{\partial f}{\partial y}(x_{n+k}, \eta_q) [y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(q)}] \\ &\quad + C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}),\end{aligned}\tag{4.12}$$

όπου η μπάρα υποδηλώνει ότι κάθε σημείο της μερικής παραγώγου αξιολογείται σε διαφορετική μέση τιμή.

Στην ακόλουθη πρόταση αποδεικνύεται ότι η τάξη ακρίβειας και το τοπικό σφάλμα αποκοπής της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης εξαρτώνται μόνο από την σχέση μεταξύ των \tilde{p} , p και τον αριθμό επαναλήψεων m .

Πρόταση 4.3.1 (βλ. [5], σελ.106-107)

Έστω \tilde{p} η τάξη ακρίβειας της μεθόδου πρόβλεψης, p η τάξη της μεθόδου διόρθωσης και m ο αριθμός των επαναλήψεων σε κάθε βήμα.

- Αν $\tilde{p} \geq p$ (ή $\tilde{p} < p$ με $m > p - \tilde{p}$), τότε η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης έχει την ίδια τάξη και το ίδιο τοπικό σφάλμα αποκοπής με την μέθοδο διόρθωσης.
- Αν $\tilde{p} < p$ και $m = p - \tilde{p}$, τότε η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης έχει την ίδια τάξη με την μέθοδο διόρθωσης, αλλά διαφορετικό τοπικό σφάλμα αποκοπής.
- Αν $\tilde{p} < p$ και $m \leq p - \tilde{p} - 1$, τότε η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης έχει τάξη $\tilde{p} + m$.

Απόδειξη. Αρχικά, έστω ότι $\tilde{p} \geq p$. Για $q = 0$, από την (4.12) παίρνουμε:

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(1)} = C_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}).$$

Για $q = 1$:

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(2)} = C_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}).$$

Επαγωγικά, προκύπτει ότι

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(m)} = C_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}).$$

Άρα, το τοπικό σφάλμα αποκοπής της μεθόδου $P(EC)^mE$ για $m \geq 1$ ισούται με το σφάλμα της μεθόδου διόρθωσης.

Ακολουθώντας, υποθέτουμε ότι $\tilde{p} = p - 1$ (δηλαδή $\tilde{p} < p$), οπότε για $q = 0$ παίρνουμε από τις σχέσεις (4.11) και (4.12):

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(1)} = \left[b_k \frac{\overline{\partial f}}{\partial y} \tilde{C}_p y^{(p)}(x_n) + C_{p+1} y^{(p+1)}(x_n) \right] h^{p+1} + O(h^{p+2}).$$

Συνεπώς, όταν $m = 1$ το τοπικό σφάλμα αποκοπής της μεθόδου $PECE$ δεν είναι ίδιο με το σφάλμα της μεθόδου διόρθωσης, αλλά έχουν ίδια τάξη ακρίβειας. Όμως, για $m \geq 2$ προκύπτει

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(m)} = C_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}).$$

και το τοπικό σφάλμα αποκοπής της μεθόδου θα είναι ίδιο με αυτό της μεθόδου διόρθωσης.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι $\tilde{p} = p - 2$, οπότε για $q = 0$ έχουμε:

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(1)} = b_k \frac{\overline{\partial f}}{\partial y} \tilde{C}_{p-1} h^p y^{(p-1)}(x_n) + O(h^{p+1}).$$

Οπότε, όταν $m = 1$ η τάξη της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης είναι $p - 1$. Για $q = 1$ έχουμε:

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(2)} = \left[b_k \left(\frac{\overline{\partial f}}{\partial y} \right)^2 \tilde{C}_{p-1} y^{(p-1)}(x_n) + C_{p+1} y^{(p+1)}(x_n) \right] h^{p+1} + O(h^{p+2}),$$

δηλαδή όταν $m = 2$ η τάξη της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης είναι ίδια με την τάξη του διορθωτή, αλλά έχουν διαφορετικά τοπικά σφάλματα αποκοπής. Για $m \geq 3$ προκύπτει

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(m)} = C_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}),$$

και άρα το τοπικό σφάλμα αποκοπής της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης είναι ίδιο με αυτό της μεθόδου διόρθωσης. \square

Διαπιστώνουμε ότι τα συστήματα $P(EC)^m E$ και $P(EC)^m$ έχουν πάντα την ίδια τάξη και το ίδιο τοπικό σφάλμα αποκοπής.

Για μια μέθοδο πρόβλεψης τάξης p με την αντίστοιχη μέθοδο διόρθωσης ίδιας τάξης έχουμε:

$$\tilde{C}_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n) = y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(0)} + O(h^{p+2}),$$

και

$$C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n) = y(x_{n+k}) - y_{n+k}^{(m)} + O(h^{p+2}).$$

Στη συνέχεια, αφαιρώντας τις εξισώσεις προκύπτει :

$$(\tilde{C}_{p+1} - C_{p+1}) h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n) = y_{n+k}^{(m)} - y_{n+k}^{(0)}.$$

Επομένως, πολλαπλασιάζοντας με έναν κατάλληλο παράγοντα μπορούμε να βρούμε μία εκτίμηση του PLTE από τον τύπο

$$PLTE = \frac{C_{p+1}}{\tilde{C}_{p+1} - C_{p+1}} \left(y_{n+k}^{(m)} - y_{n+k}^{(0)} \right).$$

Αυτή η σχέση ονομάζεται τέχνασμα του Milne (Milne Device), χρησιμοποιείται για την εκτίμηση τοπικών σφαλμάτων αποκοπής και αποτελεί ένα χρήσιμο εργαλείο για την παρατήρηση της συμπεριφοράς της αριθμητικής λύσης [4].

Η κύρια χρήση της εκτίμησης του $PLTE$ είναι η παρακολούθηση του μήκους του βήματος. Αυτό μπορεί να μειωθεί αν η νόρμα της εκτίμησης υπερβεί κάποια δεδομένη ανοχή, ενώ μπορεί να αυξηθεί αν η νόρμα της είναι μικρότερη από την συγκεκριμένη ανοχή [5].

4.4 Ευστάθεια μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης

Στην παράγραφο αυτή θα ασχοληθούμε με τις ιδιότητες ευστάθειας των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης. Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$\begin{cases} y'(x) = \lambda y, & \lambda \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} \lambda < 0, \quad x \in [0, \infty], \\ y(0) = 1. \end{cases} \quad (4.13)$$

Θέλουμε να βρούμε το πολυώνυμο ευστάθειας για το σύστημα $P(EC)^m E$ που δίνεται από το (4.4). Αρχικά, μπορούμε να γράψουμε τα πρώτα και δεύτερα χαρακτηριστικά πολυώνυμα για την μέθοδο πρόβλεψης και την μέθοδος διόρθωσης ως εξής:

$$\tilde{p}(E)y_n = h\tilde{\sigma}(E)f_n, \quad p(E)y_n = h\sigma(E)f_n,$$

όπου E είναι ένας τελεστής μετατόπισης προς τα εμπρός ο οποίος ορίζεται ως εξής:

$$E f_n = f_{n+1}, \quad E^2 f_n = E(E f_n) = f_{n+2}, \dots$$

Τα πολυώνυμα \tilde{p}, p και σ έχουν τάξη k και το $\tilde{\sigma}$ έχει τάξη το πολύ $k - 1$. Τότε, το σύστημα (4.4) μπορεί να οριστεί ως εξής:

$$\begin{aligned} P: & \quad E^k y_n^{(0)} + [\tilde{p}(E) - E^k] y_n^{(m)} = h\tilde{\sigma}(E) f_n^{(m)}, \\ E: & \quad E^k f_n^{(q)} = f(x_{n+k}, E^k y_n^{(q)}), \\ C: & \quad E^k y_n^{(q+1)} + [p(E) - E^k] y_n^{(m)} = h b_k E^k f_n^{(q)} + h[\sigma(E) - b_k E^k] f_n^{(m)}, \\ E: & \quad E^k f_n^{(m)} = f(x_{n+k}, E^k y_n^{(m)}). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Θα εφαρμόσουμε αυτήν την μέθοδο στο πρόβλημα αρχικών τιμών (4.13), οπότε έχουμε

$$P : E^k y_n^{(0)} + [\tilde{p}(E) - E^k] y_n^{(m)} = \hat{h} \tilde{\sigma}(E) y_n^{(m)}, \quad (4.15)$$

και

$$C : E^k y_n^{(q+1)} + [p(E) - E^k] y_n^{(m)} = \hat{h} b_k E^k f_n^{(q)} + \hat{h} [\sigma(E) - b_k E^k] y_n^{(m)}, \quad (4.16)$$

όπου $\hat{h} = h\lambda$. Επίσης ορίζουμε

$$H := \hat{h} b_k,$$

και η (4.16) αφαιρώντας διαδοχικά γράφεται

$$E^k (y_n^{(q+1)} - y_n^{(q)}) = H E^k (y_n^{(q)} - y_n^{(q-1)}).$$

Συνεπάγεται

$$y_n^{(q+1)} - (1 + H)y_n^{(q)} + H y_n^{(q-1)} = 0.$$

Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο της γραμμικής αυτής εξίσωσης ισούται με $s^2 - (1 + H)s + H$ και οι ρίζες του είναι 1 και H . Τότε η λύση της έχει την μορφή

$$y_n^{(q)} = A + B H^q, \quad q = 0, 1, \dots, m-1.$$

Οι σταθερές A, B είναι ανεξάρτητες του q και μπορούν να εκτιμηθούν επιλέγοντας τις οριακές τιμές $y_n^{(0)}$ και $y_n^{(m)}$. Η λύση που προκύπτει δίνεται από την σχέση:

$$(1 - H^m) y_n^{(q)} = y_n^{(m)} - H^m y_n^{(0)} + H^q (y_n^{(0)} - y_n^{(m)}), \quad q = 0, \dots, m.$$

Για $q = m-1$ παίρνουμε

$$(1 - H^m) y_n^{(m-1)} = H^{m-1} (1 - H) y_n^{(0)} + (1 - H^{m-1}) y_n^{(m)}.$$

Ισοδύναμα, γράφεται

$$H y_n^{(m-1)} = M_m(H) y_n^{(0)} + (H - M_m(H)) y_n^{(m)}, \quad (4.17)$$

όπου ορίζουμε

$$M_m(H) := \frac{H^m (1 - H)}{1 - H^m}.$$

Από τις σχέσεις (4.15) και (4.17) προκύπτει

$$H E^k y_n^{(m-1)} = [H E^k - M_m(H) \tilde{p}(E)] y_n^{(m)} + M_m(H) \hat{h} \tilde{\sigma}(E) y_n^{(m)}. \quad (4.18)$$

Θέτοντας $q = m-1$ στην σχέση (4.16) έχουμε:

$$p(E) y_n^{(m)} = H E^k y_n^{(m-1)} + [\hat{h} \sigma(E) - H E^k] y_n^{(m)}. \quad (4.19)$$

Αφαιρώντας τις σχέσεις (4.18) και (4.19) παίρνουμε:

$$[p(E) - \hat{h} \sigma(E) + H E^k] y_n^{(m)} = [H E^k - M_m(H) \tilde{p}(E) + M_m(H) \hat{h} \tilde{\sigma}(E)] y_n^{(m)}.$$

Συνεπάγεται,

$$\{p(E) - \hat{h} \sigma(E) + M_m(H) [\tilde{p}(E) - \hat{h} \tilde{\sigma}(E)]\} y_n^{(m)} = 0.$$

Επομένως, θα προκύψει το πολυώνυμο ευστάθειας του συστήματος $P(EC)^m E$ που είναι

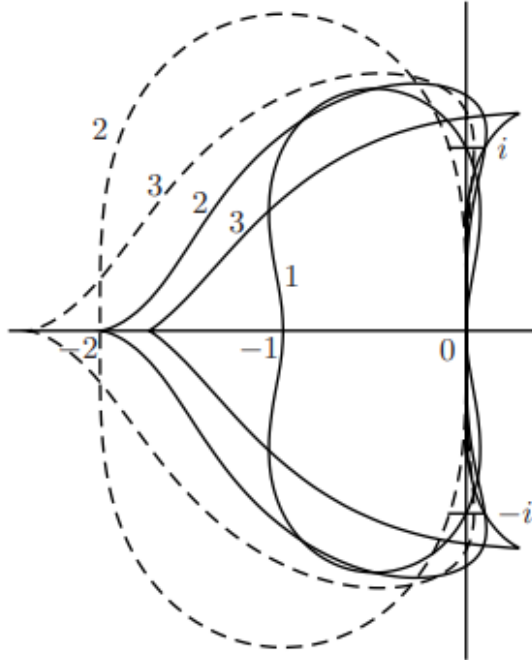
$$\pi_{P(EC)^m E}(r, \hat{h}) = p(r) - \hat{h}\sigma(r) + M_m(H) [\tilde{p}(r) - \hat{h}\tilde{\sigma}(r)]. \quad (4.20)$$

Το πολυώνυμο ευστάθειας καθορίζει την περιοχή απόλυτης ευστάθειας της μεθόδου. Με ανάλογο τρόπο βρίσκεται το πολυώνυμο ευστάθειας για το σύστημα $P(EC)^m$:

$$\pi_{P(EC)^m}(r, \hat{h}) = b_k r^k [p(r) - \hat{h}\sigma(r)] + M_m(H) [\tilde{p}(r)\sigma(r) - p(r)\tilde{\sigma}(r)]. \quad (4.21)$$

Συμπερασματικά, ενώ το κύριο τοπικό σφάλμα αποκοπής είναι αυτό του διορθωτή, τα χαρακτηριστικά της ευστάθειας δεν είναι αυτά του διορθωτή και διαφέρουν σημαντικά στις περιπτώσεις $P(EC)^m E$ και $P(EC)^m$. Το $\pi_{P(EC)^m E}(r, \hat{h})$ είναι ένας γραμμικός συνδυασμός του πολυωνύμου ευστάθειας της μεθόδου πρόβλεψης και της μεθόδου διόρθωσης. Γενικά, το πολυώνυμο ευστάθειας είναι μια διαταραχή $O(\hat{h}^m)$ του πολυωνύμου ευστάθειας της μεθόδου διόρθωσης [5].

Έστω ότι χρησιμοποιούμε την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης Adams-Bashforth-Adams-Moulton (ABM). Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις σχετικά με την τάξη ακρίβειας της μεθόδου. Στην πρώτη περίπτωση η μέθοδος πρόβλεψης έχει την ίδια τάξη ακρίβειας $\tilde{p} = p$ με την μέθοδο διόρθωσης. Στην δεύτερη περίπτωση, οι δύο μέθοδοι έχουν ίδιο αριθμό βημάτων, οπότε η τάξη της μεθόδου πρόβλεψης είναι $\tilde{p} = p - 1$. Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται η περιοχή απόλυτης ευστάθειας για τις δύο αυτές περιπτώσεις για το σύστημα πρόβλεψης-διόρθωσης PECE.



Σχήμα 4.1: Περιοχή απόλυτης ευστάθειας για την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης PECE που βασίζεται στις μεθόδους ABM με τάξεις ακρίβειας $\tilde{p} = p$ (γραμμή) και με $\tilde{p} = p - 1$ (διακεκομμένη γραμμή) [4]

4.5 Μεταβλητό μέγεθος βήματος

Γενικά, η αλλαγή του μεγέθους βήματος στις πολυβηματικές μεθόδους είναι δύσκολη, καθώς αυτές υπολογίζουν τις αριθμητικές προσεγγίσεις σε ισαπέχοντα σημεία. Σε πολλές περιπτώσεις, είναι επιθυμητό να χρησιμοποιούνται μεταβλητά μεγέθη βημάτων σε μεθόδους πρόβλεψης-διόρθωσης, όπου το μέγεθος βημάτων προσαρμόζεται με βάση τις εκτιμήσεις τοπικών σφαλμάτων. Αυτό μπορεί να οδηγήσει σε σημαντικές βελτιώσεις στην ακρίβεια και την αποτελεσματικότητα των μεθόδων [11].

Εστω ότι έχουμε μία k -βηματική μέθοδο ABM πρόβλεψης-διόρθωσης για να υπολογίσουμε μία ακολουθία προσεγγίσεων y_n . Θέλουμε να αλλάξουμε το μέγεθος του βήματος από h σε ωh πριν υπολογίσουμε το y_{n+1} . Υπάρχουν διάφορες επιλογές για το πώς μπορεί να γίνει αυτό. Εάν απαιτείται αύξηση του μεγέθους βήματος, τότε τα απαραίτητα δεδομένα ενδέχεται να είναι ήδη διαθέσιμα και δεν χρειάζονται επιπλέον υπολογισμοί. Ωστόσο, η μείωση του μεγέθους βήματος δεν είναι τόσο εύκολη επειδή απαιτούνται δεδομένα που δεν διαθέτουμε [4].

Υπάρχουν δύο κατηγορίες τεχνικών που χρησιμοποιούνται ευρέως για την μεταβολή του μεγέθους βήματος στην μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης ABM. Η πρώτη είναι η τεχνική της παρεμβολής, η οποία χρησιμοποιεί πολυωνυμική παρεμβολή των γνωστών δεδομένων για να προσεγγίσει τα δεδομένα που λείπουν. Στη δεύτερη κατηγορία, οι μέθοδοι ABM αντικαθίστανται από παρόμοιες μεθόδους, οι οποίες υποθέτουν ότι τα δεδομένα είναι άνισα κατανομημένα. Οι τεχνικές αλλαγής βημάτων που βασίζονται σε τέτοιες μεθόδους είναι συνήθως γνωστές ως τεχνικές μεταβλητού βήματος, ενώ όταν μπορούν να αλλάζουν τόσο το μήκος βήματος όσο και την τάξη ονομάζονται τεχνικές μεταβλητού συντελεστή ή μέθοδοι VSVO [5].

Αξίζει να σημειωθεί ότι δεν είναι ξεκάθαρο ποια από τις δύο τεχνικές είναι προτιμότερη. Οι τεχνικές παρεμβολής έχουν μικρότερο υπολογιστικό κόστος, ενώ οι τεχνικές μεταβλητών συντελεστών είναι πιο ευέλικτες στις συχνές αλλαγές του μεγέθους βήματος, αφού χρησιμοποιούν πάντα υπολογισμένα και όχι παρεμβαλλόμενα δεδομένα και επιπλέον, είναι ανεξάρτητες από την διάσταση του προβλήματος αρχικών τιμών [5].

4.5.1 Τεχνική παρεμβολής

Για την τεχνική παρεμβολής, θα προσδιορίσουμε το πολυώνυμο παρεμβολής $I(x)$ βαθμού $k - 1$ που παρεμβάλλει τα πίσω δεδομένα (x_{n-u}, f_{n-u}) , $u = 0, 1, \dots, k - 1$ και τις πρώτες $k - 1$ παραγώγους στο σημείο x_n . Ορίζουμε

$$F(x_n) := [(f_n)^T, (\nabla f_n)^T, \dots, (\nabla^{k-1} f_n)^T]^T.$$

Αφού $\nabla^i I(x_n) = \nabla^i f_n$, $i = 0, \dots, k - 1$ τότε συνεπάγεται

$$F(x_n) = [(I(x_n))^T, (\nabla I(x_n))^T, \dots, (\nabla^{k-1} I(x_n))^T]^T.$$

Για το σφάλμα στην παρεμβολή ισχύει ότι $\nabla^i I(x_n) = O(h^i)$. Άρα, θα ορίσουμε το διάνυσμα Nordsieck $G(x)$, που πήρε το όνομα του από τον Arnold Nordsieck (1962),

$$G(x_n) := [(I(x_n))^T, h(I'(x_n))^T, \dots, h^{k-1}(I^{(k-1)}(x_n))^T]^T.$$

Μπορούμε να γράψουμε το διάνυσμα Nordsieck ως προς το $F(x)$ μέσω ενός γραμμικού μετασχηματισμού

$$G(x_n) = AF(x_n),$$

όπου A είναι πίνακας ανεξάρτητος του h . Για να αλλάξουμε το μέγεθος του βήματος από h σε ωh , θα πολλαπλασιάσουμε κάθε i μπλοκ του διανύσματος $G(x)$ με το ω^{i-1} . Για να πάρουμε το διάνυσμα των διαφορών του $I(x_n)$ που αξιολογείται σε $x_n - u\omega h$, $u = 0, \dots, k-1$ θα αντιστρέψουμε τον γραμμικό μετασχηματισμό. Ορίζουμε

$$F_{(D)}(x_n) = [(I(x_n))^T, (\nabla_{(D)} I(x_n))^T, \dots, (\nabla_{(D)}^{k-1} I(x_n))^T]^T,$$

οπότε

$$F_{(D)}(x_n) = A^{-1} D A F(x_n),$$

όπου $D = \text{diag}(\beta, \beta^2, \dots, \beta^{k-1})$.

Για να υπολογιστεί ο πίνακας A και ο αντίστροφος του, απαιτούνται πολλές πράξεις, κάτι που καθιστά αυτήν την διαδικασία χρονοβόρα. Τη λύση στο πρόβλημα αυτό έδωσε ο Gear (1967), ο οποίος εφάρμοσε την μέθοδο ABM στο $P(EC)^m$ σύστημα χρησιμοποιώντας ένα διάνυσμα Nordsieck. Παρατήρησε ότι το πολυώνυμο παρεμβολής Hermite $P(x)$ είναι ισοδύναμο με την μέθοδο πρόβλεψης Adams-Bashforth στην μέθοδο ABM . Το πολυώνυμο ικανοποιεί τις σχέσεις:

$$P(x_{n+k}) = y_{n+k}^{(0)}, \quad P(x_{n+k-1}) = y_{n+k-1}^{(m)},$$

$$P'(x_{n+j}) = f_{n+j}^{(m-1)}, \quad j = 0, \dots, k-1.$$

Το διάνυσμα με τα πίσω δεδομένα δίνεται:

$$Y_{n+k-1}^{(m)} = [(y_{n+k-1}^{(m)})^T, h(f_{n+k-1}^{(m-1)})^T, \dots, h(f_n^{(m-1)})^T]^T.$$

Οπότε, το διάνυσμα Nordsieck $Z_{n+k-1}^{(m)}$ ορίζεται

$$Z_{n+k-1}^{(m)} = \left[(P(x_{n+k-1}))^T, h(P'(x_{n+k-1}))^T, \dots, \frac{h^k}{k!} (P^{(k)}(x_{n+k-1}))^T \right]^T,$$

και ο γραμμικός μετασχηματισμός είναι

$$Z_{n+k-1}^{(m)} = Q Y_{n+k-1}^{(m)},$$

όπου ο πίνακας Q ανεξάρτητος του h . Επομένως, τα στοιχεία του Q είναι σταθερές που εξαρτώνται μόνο από τους συντελεστές της μεθόδου πρόβλεψης Adams-Bashforth και έχει την μορφή:

$$Q = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & I & 0 & \dots & 0 \\ * & * & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ * & * & * & \dots & * \end{bmatrix}.$$

Η προσέγγιση του Gear είναι να μετατρέψει το σύστημα $P(EC)^m$ της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης ABM τάξης k ώστε να μοιάζει με μονοβηματική μέθοδο και έπειτα να εφαρμόσει τον γραμμικό μετασχηματισμό. Συνεπώς, μετά από πράξεις προκύπτει η μονοβηματική μέθοδος

$$\begin{aligned} P: \quad Z_{n+k}^{(0)} &= Q B Q^{-1} Z_{n+k-1}^{(m)}, \\ C: \quad Z_{n+k}^{(q+1)} &= Z_{n+k}^{(q)} + \tilde{G} F(Z_{n+k}^{(q)}), \end{aligned} \tag{4.22}$$

όπου $\tilde{G} = QG$, $G = [b_k I, I, 0, 0, \dots, 0]^T$. Το γινόμενο QBQ^{-1} είναι ο πίνακας μπλοκ Pascal Π ,

$$P := \begin{bmatrix} I & I & I & I & \dots & I \\ 0 & I & 2I & 3I & \dots & \binom{k}{1}I \\ 0 & 0 & I & 3I & \dots & \binom{k}{2}I \\ 0 & 0 & 0 & I & \dots & \binom{k}{3}I \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & I \end{bmatrix}.$$

Έτσι, για να μεταβάλλουμε το μέγεθος του βήματος από h σε ωh , θα πολλαπλασιάσουμε κάθε i μπλοκ του διανύσματος $Z_{n+k-1}^{(m)}$ με το ω^{i-1} , $i = 1, \dots, k+1$.

4.5.2 Τεχνική μεταβλητού συντελεστή

Η τεχνική μεταβλητού συντελεστή προτάθηκε αρχικά από τον Ceschino(1961) και αργότερα ο Krogh(1974) επέκτεινε τις ιδέες του. Αρχικά, για τα άνισα κατανεμημένα δεδομένα $(x_n, f_n), (x_{n-1}, f_{n-1}), \dots, (x_{n-k+1}, f_{n-k+1})$ χρησιμοποιούμε το πολυώνυμο παρεμβολής διαιρεμένης διαφοράς Newton βαθμού $k-1$ για την μέθοδο πρόβλεψης Adams-Bashforth:

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{k-1}(x) &= f^1[n] + (x - x_n)f^1[n, n-1] \\ &+ \dots + (x - x_n)(x - x_{n-1}) \cdots (x - x_{n-k+2})f^1[n, n-1, \dots, n-k+1], \end{aligned}$$

όπου $f^1[\dots]$ συμβολίζει ότι οι τιμές συνάρτησης που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή των διαιρεμένων διαφορών είναι $f_{n-i}^{(1)}$, $i = 0, 1, \dots, k-1$. Ισχύει ότι

$$F[n] = F_n,$$

και

$$F[n, n-1, \dots, n-i] = \frac{F[n, n-1, \dots, n-i+1] - F[n-1, n-2, \dots, n-i]}{x_n - x_{n-i}}.$$

Με την ολοκλήρωση του πολυωνύμου παρεμβολής $\tilde{I}_{k-1}(x)$, προκύπτει η k -βηματική μέθοδος πρόβλεψης τάξης ακρίβειας k :

$$y_{n+1}^{(0)} - y_n^{(1)} = \sum_{i=0}^{k-1} \tilde{g}_i f^1[n, n-1, \dots, n-i], \quad (4.23)$$

όπου

$$\tilde{g}_i = \begin{cases} \int_{x_n}^{x_{n+1}} dx = x_{n+1} - x_n, & i = 0, \\ \int_{x_n}^{x_{n+1}} (x - x_n)(x - x_{n-1}) \cdots (x - x_{n-i+1}) dx, & i = 1, 2, \dots \end{cases}$$

Ακολουθως, για τα άνισα κατανεμημένα δεδομένα $(x_{n+1}, f_{n+1}), (x_n, f_n), \dots, (x_{n-k+1}, f_{n-k+1})$ θα αναπτύξουμε το πολυώνυμο παρεμβολής διαιρεμένης διαφοράς βαθμού k για την μέθοδο διόρθωσης Adams-Moulton χρησιμοποιώντας το πολυώνυμο για την μέθοδο πρόβλεψης. Οπότε, προκύπτει

$$I_k(x) = \tilde{I}_{k-1}(x) + (x - x_n)(x - x_{n-1}) \cdots (x - x_{n-k+1})f_0^1[n+1, n, \dots, n-k+1],$$

όπου $f_0^1[\dots]$ δείχνει ότι κατά την αξιολόγηση της διαιρεμένης διαφοράς, η τιμή $f_{n+1}^{(1)}$ αντικαθίσταται από την $f_{n+1}^{(0)}$. Επομένως, η μέθοδος διόρθωσης τάξης $k + 1$ μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$y_{n+1}^{(1)} = y_{n+1}^{(0)} + \tilde{g}_k f_0^1 [n + 1, n, \dots, n - k + 1]. \quad (4.24)$$

Συμπερασματικά, οι εξισώσεις (4.23) και (4.24) ορίζουν την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης τάξης k .

Κεφάλαιο 5

Αριθμητικά Παραδείγματα

Τα αριθμητικά πειράματα είναι ένα θεμελιώδες εργαλείο για την αξιολόγηση της απόδοσης των αριθμητικών μεθόδων. Σε αυτό το κεφάλαιο, παρουσιάζουμε μια σειρά από παραδείγματα χρησιμοποιώντας το MATLAB για τη μελέτη της συμπεριφοράς των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Το MATLAB είναι ένα ισχυρό υπολογιστικό εργαλείο που προσφέρει ένα ευρύ φάσμα για την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων. Επιπλέον, αυτό το κεφάλαιο καταδεικνύει τη δύναμη και την ευελιξία των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης μέσω της σύγκρισης με άλλες γνωστές αριθμητικές μεθόδους όπως η μέθοδος Euler και οι μέθοδοι Runge-Kutta. Ακόμη, θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή της μεθόδου στο μοντέλο Lotka-Volterra θηράματος-θηρευτή, που αποτελεί ένα κλασικό παράδειγμα συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων που περιγράφει την αλληλεπίδραση μεταξύ των πληθυσμών θηρευτών και θηραμάτων. Μέχρι το τέλος αυτού του κεφαλαίου, οι αναγνώστες θα έχουν κατανοήσει πλήρως την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης και την πρακτική εφαρμογή της στην προσέγγιση λύσεων και θα εξοικειωθούν με τη δυναμική του μοντέλου Lotka-Volterra, θέτοντας το υπόβαθρο για περαιτέρω εξερεύνηση άλλων μαθηματικών μοντέλων στην οικολογία και όχι μόνο.

5.1 Προβλήματα αρχικών τιμών πρώτης τάξης

Παράδειγμα 4. Δίνεται το γραμμικό πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$\begin{cases} y' = -y + 2\cos(x), \\ y(0) = 1. \end{cases} \quad (5.1)$$

Η αναλυτική λύση του προβλήματος δίνεται:

$$y(x) = \sin(x) + \cos(x),$$

η οποία ταλαντώνεται επ' αόριστον καθώς το x αυξάνεται. Θα επιλύσουμε το πρόβλημα αρχικών τιμών με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης Adams-Bashforth-Adams-Moulton 4ης τάξης (4.6).

Θα χρησιμοποιήσουμε τον κώδικα της μεθόδου ABM4 που βρίσκεται στο παράρτημα Α', ο οποίος αποτελεί μια υλοποίηση της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης στο MATLAB. Τα ορίσματα της συνάρτησης είναι το f που περιέχει την έκφραση $y' = f(x, y)$,

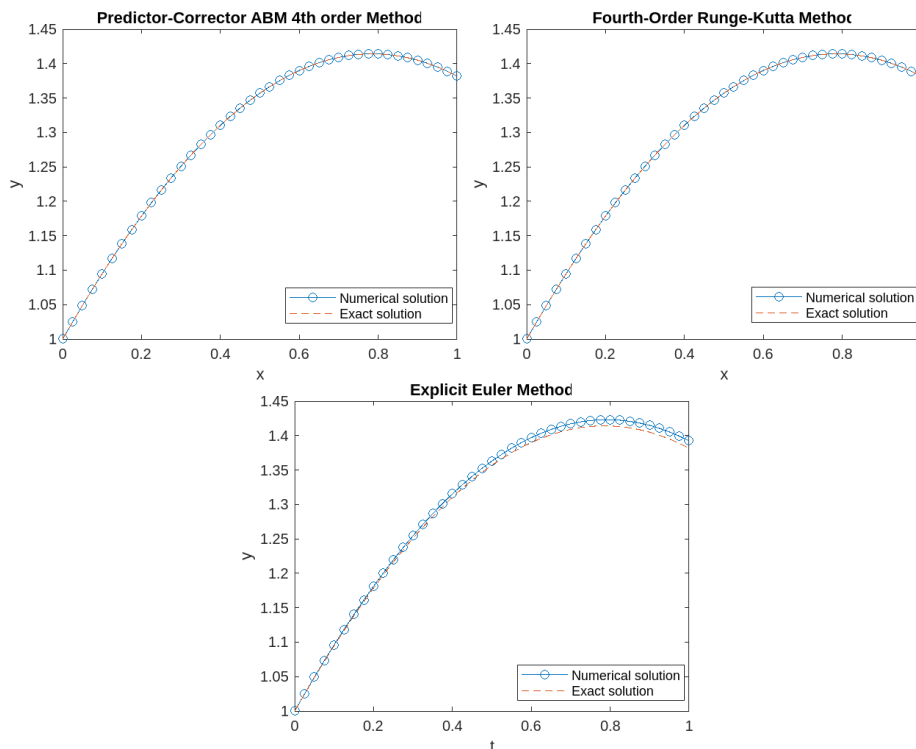
a και b είναι το πρώτο και τελευταίο σημείο του διαστήματος ολοκλήρωσης, το y_0 είναι η αρχική συνθήκη και h το μέγεθος βήματος. Οι έξοδοι της συνάρτησης είναι το διάνυσμα t που περιλαμβάνει τα χρονικά σημεία στα οποία αξιολογείται η συνάρτηση και το διάνυσμα y που περιέχει τις υπολογισμένες τιμές της αριθμητικής μεθόδου στα σημεία t . Η συνάρτηση χρησιμοποιεί την μέθοδο Runge-Kutta 4ης τάξης για να υπολογίσει τις τρεις επιπλέον αρχικές τιμές που απαιτούνται για την εκκίνηση της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης. Στην συνέχεια, χρησιμοποιεί έναν συνδυασμό των βημάτων πρόβλεψης και διόρθωσης για να υπολογίσει τη λύση. Η τρέχουσα τιμή παραγώγου $s(i, :)$ υπολογίζεται σε κάθε χρονικό βήμα. Το βήμα πρόβλεψης εκτιμά τη λύση $y(i + 1, :)$ χρησιμοποιώντας τον τύπο Adams-Bashforth 4ης τάξης, ο οποίος χρησιμοποιεί την τρέχουσα παράγωγο και τις προηγούμενες τιμές παραγώγου. Το βήμα διόρθωσης βελτιώνει περαιτέρω τη λύση $y(i + 1, :)$ χρησιμοποιώντας τον τύπο Adams-Moulton 4ης τάξης, ο οποίος χρησιμοποιεί την παράγωγο στο προβλεπόμενο σημείο και τις προηγούμενες τιμές παραγώγου.

Στον παρακάτω πίνακα εμφανίζονται τα αποτελέσματα που παράχθηκαν εκτελώντας τον κώδικα για την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης Adams-Bashforth-Adams-Moulton 4ης τάξης για το πρόβλημα αρχικών τιμών (5.1), με μέγεθος βήματος $h = 0.05$ στο διάστημα ολοκλήρωσης $[0, 1]$ και με αρχική τιμή $y_0 = 1$.

x	Solution	ABM4
0	1.0000000000000000	1.0000000000000000
0.1	1.094837581924854	1.094837574635138
0.2	1.178735908636303	1.178735907293119
0.3	1.250856695786946	1.250856710042791
0.4	1.310479336311535	1.310479362275267
0.5	1.357008100494576	1.357008134491367
0.6	1.389978088304714	1.389978126904525
0.7	1.409059874522180	1.409059914543065
0.8	1.414062800246688	1.414062838758603
0.9	1.404936877898148	1.404936912226902
1	1.381773290676036	1.381773318407099

Πίνακας 5.1: Αναλυτική λύση και προσεγγιστική λύση του ΠΑΤ (5.1) με χρήση της μεθόδου πρόβλεψης διόρθωσης ABM4 για $h = 0.05$

Παρατηρούμε ότι οι τιμές της αριθμητικής λύσης είναι πολύ κοντά με τις τιμές της αναλυτικής λύσης. Επομένως, ο αλγόριθμος για την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης φαίνεται να λειτουργεί καλά. Έπειτα, θα απεικονίσουμε την αριθμητική και την αναλυτική λύση για μέγεθος βήματος $h = 0.025$ του ΠΑΤ (5.1) με την χρήση των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4, Runge-Kutta 4ης τάξης και άμεση Euler.



Σχήμα 5.1: Αναλυτικές και προσεγγιστικές λύσεις των μεθόδων ABM4, Runge-Kutta, Euler με βήμα $h = 0.025$ για το ΠΑΤ (5.1)

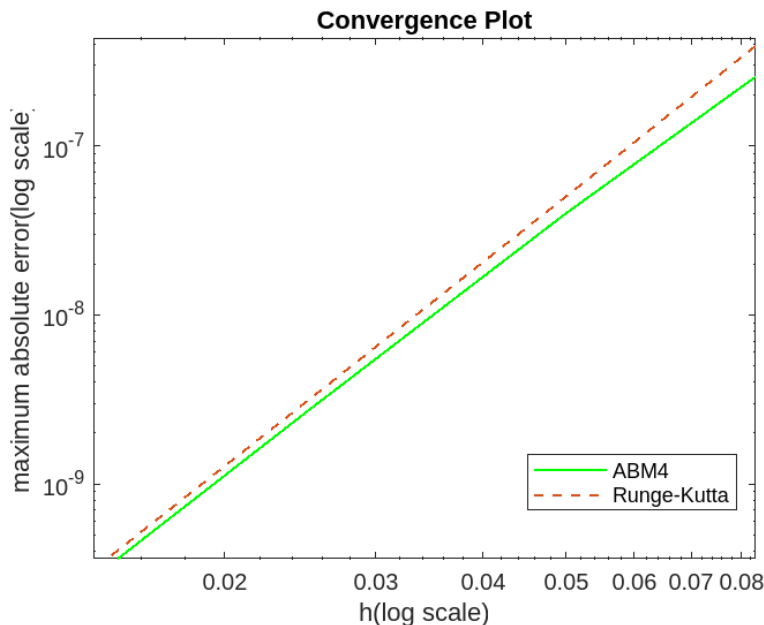
Διακρίνουμε ότι οι μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης και *Runge-Kutta* προσεγγίζουν αρκετά καλά την αναλυτική λύση του ΠΑΤ (5.1), ενώ για την μέθοδο *Euler* διακρίνουμε μια μικρή απόκλιση. Για να τις συγκρίνουμε, θα υπολογίσουμε στο *MATLAB* το μέγιστο απόλυτο σφάλμα της κάθε μεθόδου για διαφορετικές τιμές μεγέθους βήματος. Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του σφάλματος της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης *ABM4*, *Runge-Kutta* 4ης τάξης και άμεση *Euler* για διάφορες τιμές του μεγέθους βήματος h .

h	ABM4	Runge-Kutta	Euler
0.1	$5.0578e - 07$	$8.2574e - 07$	0.0432
0.05	$4.0021e - 08$	$5.0306e - 08$	0.0213
0.025	$2.6990e - 09$	$3.1038e - 09$	0.0106
0.0125	$1.7382e - 10$	$1.9273e - 10$	0.0053
0.00625	$1.1008e - 11$	$1.2007e - 11$	0.0026
0.003125	$6.9234e - 13$	$7.4851e - 13$	0.0013
0.0015625	$4.3299e - 14$	$4.5963e - 14$	$6.5767e - 04$

Πίνακας 5.2: Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων Runge-Kutta, Euler και ABM4 για το ΠΑΤ (5.1)

Συμπεραίνουμε ότι, για το πρόβλημα αρχικών τιμών (5.1) η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης έχει λίγο μικρότερα σφάλματα σε σχέση με την μέθοδο *Runge-Kutta*, οπότε παρέχει καλύτερη ακρίβεια. Αυτό επιβεβαιώνεται και από το σχήμα (5.2) που απεικονίζει το μέγιστο απόλυτο σφάλμα για τις διάφορες τιμές του h σε λογαριθμική κλίμακα. Αντιθέτως, η μέθοδος *Euler* έχει πολύ μεγαλύτερα σφάλματα, το οποίο την

καθιστά ακατάλληλη για την προσέγγιση των λύσεων, παρόλο που είναι απλούστερη και ταχύτερη.



Σχήμα 5.2: Μέγιστο απόλυτο σφάλμα των μεθόδων ABM4, Runge-Kutta για το ΠΑΤ (5.1)

Για να βρεθεί η τάξη ακρίβειας μιας μεθόδου στο *MATLAB*, πρώτα υπολογίζουμε, για μία σειρά μεγεθών βημάτων h , το σφάλμα ως τη μέγιστη απόλυτη διαφορά μεταξύ της αριθμητικής λύσης και της αναλυτικής λύσης. Η τάξη ακρίβειας καθορίζεται παρατηρώντας πως μειώνεται το σφάλμα καθώς μειώνεται το μέγεθος του βήματος. Επιλέγουμε μία ακολουθία μεγεθών βημάτων h_1, h_2, \dots, h_n , όπου $h(i+1) = h(i)/2$, $i = 1, 2, \dots, n-1$ για να αντιπροσωπεύουμε διαφορετικά επίπεδα διακριτοποίησης και το h_1 είναι αρκετά μικρό για να δώσει ακριβή αποτελέσματα. Στην συνέχεια, για τον υπολογισμό της σειράς ακρίβειας, χρησιμοποιούμε την έννοια του ρυθμού σύγκλισης, δηλαδή για κάθε μέγεθος βήματος h υπολογίζουμε την αναλογία σφαλμάτων μεταξύ των διαδοχικών μεγεθών βημάτων:

$$\text{convergence rate} = \log(\text{error}(i)/\text{error}(i+1))/\log(h(i)/h(i+1)).$$

Ο ρυθμός σύγκλισης θα πρέπει να συγκλίνει στη τάξη ακρίβειας της μεθόδου που χρησιμοποιείται. Για τις παραπάνω τιμές μεγέθους βήματος $h = [0.1, 0.05, 0.025, 0.0125, 0.00625, 0.003125, 0.0015625]$ θα υπολογίσουμε τον ρυθμό σύγκλισης της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης.

p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6
3.6597	3.8903	3.9568	3.9810	3.9909	3.9991

Πίνακας 5.3: Ρυθμός σύγκλισης μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για το το ΠΑΤ (5.1)

Πράγματι, παρατηρούμε ότι ο ρυθμός σύγκλισης της μεθόδου, όσο μικραίνει το μέγεθος βήματος h συγκλίνει στο 4. Από την πρόταση (4.3.1) είναι γνωστό ότι η

τάξη ακρίβειας της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης είναι 4 αφού ισούται με την τάξη ακρίβειας της μεθόδου διόρθωσης. Επομένως, αυτό υποδηλώνει ότι ο κώδικας έχει υλοποιηθεί σωστά και ότι η μέθοδος αποδίδει όπως αναμένεται.

Παράδειγμα 5. Έστω το πρόβλημα αρχικών τιμών που αποτελείται από μία μη γραμμική συνήθης διαφορική εξίσωση:

$$\begin{cases} y' = -10y + \frac{1}{1+x^2} + 10\tan^{-1}(x), \\ y(0) = 0. \end{cases} \quad (5.2)$$

Η αναλυτική λύση του προβλήματος δίνεται:

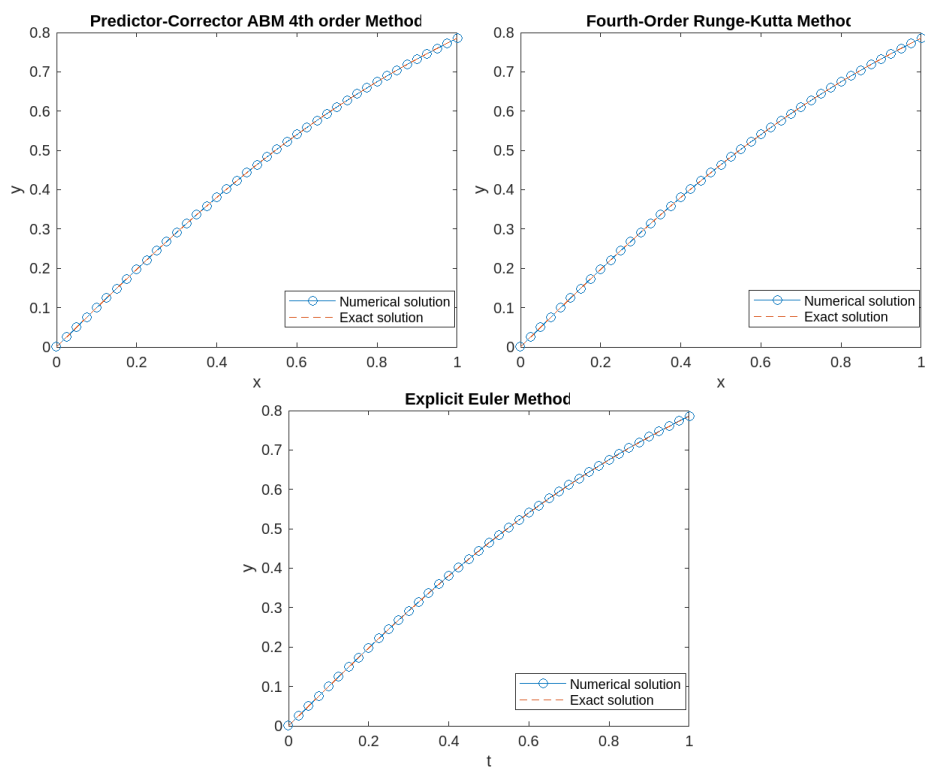
$$y(x) = \tan^{-1}(x).$$

Μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η λύση είναι περιορισμένη καθώς το x πλησιάζει στο άπειρο, οπότε το πρόβλημα αρχικών τιμών είναι ευσταθές. Θέλουμε να προσδιορίσουμε τη λύση του προβλήματος αρχικών τιμών για $h = 0.025$ με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης *ABM4*. Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται οι αριθμητικές προσεγγίσεις καθώς και η αναλυτική λύση του ΠΑΤ (5.2).

x	Solution	ABM4
0	0	0
0.1	0.099668652491162	0.099668641495476
0.2	0.197395559849881	0.197395585224039
0.3	0.291456794477867	0.291456818619528
0.4	0.380506377112365	0.380506385827607
0.5	0.463647609000806	0.463647601455865
0.6	0.540419500270584	0.540419481929827
0.7	0.610725964389209	0.610725941897708
0.8	0.674740942223553	0.674740920647337
0.9	0.732815101786507	0.732815083882643
1	0.785398163397449	0.785398150023719

Πίνακας 5.4: Αναλυτική και προσεγγίσεις της λύσης του ΠΑΤ (5.2) με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης *ABM4* για $h = 0.025$

Στο σχήμα 5.3 αναπαριστώνται η αριθμητική και η αναλυτική λύση για βήμα $h = 0.025$ του ΠΑΤ (5.2) στο διάστημα ολοκλήρωσης $[0, 1]$ με την χρήση των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης *ABM4*, *Runge-Kutta* 4ης τάξης και άμεση *Euler*.

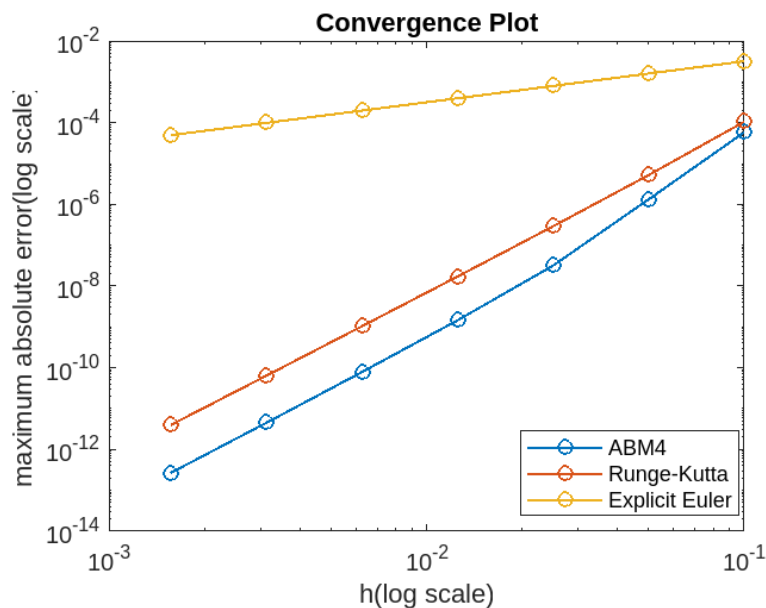


Σχήμα 5.3: Αναλυτικές και προσεγγιστικές λύσεις των μεθόδων ABM4, Runge-Kutta, Euler με βήμα $h = 0.025$ για το ΠΑΤ (5.2)

Για να συγκρίνουμε την ακρίβεια των παραπάνω μεθόδων, θα υπολογίσουμε το μέγιστο απόλυτο σφάλμα για διάφορες τιμές του h .

h	ABM4	Runge-Kutta	Euler
0.1	$5.7891e - 05$	$1.0495e - 04$	0.0032
0.05	$1.3218e - 06$	$5.2106e - 06$	0.0016
0.025	$3.1537e - 08$	$2.8967e - 07$	$7.9629e - 04$
0.0125	$1.4418e - 09$	$1.7041e - 08$	$3.9691e - 04$
0.00625	$7.8104e - 11$	$1.0328e - 09$	$1.9814e - 04$
0.003125	$4.4644e - 12$	$6.3561e - 11$	$9.8991e - 05$
0.0015625	$2.6548e - 13$	$3.9417e - 12$	$4.9476e - 05$

Πίνακας 5.5: Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων ABM4, Runge-Kutta και Euler για το ΠΑΤ (5.2)



Σχήμα 5.4: Σφάλμα των μεθόδων ABM4, Runge-Kutta, Euler για το ΠΑΤ (5.2)

Από τον πίνακα (5.5) και το σχήμα (5.4), διαπιστώνουμε ότι για το συγκεκριμένο πρόβλημα η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης ABM 4ης τάξης έχει πολύ μικρότερα σφάλματα σε σύγκριση με την μέθοδο Runge-Kutta 4ης τάξης και την άμεση Euler. Τα μικρότερα σφάλματα την οδηγούν σε υψηλότερη ακρίβεια, που της επιτρέπει την καλύτερη προσέγγιση της λύσης. Επίσης, η μέθοδος Euler είναι μια απλή μέθοδος πρώτης τάξης, με αποτέλεσμα να έχει μεγαλύτερα σφάλματα σε σύγκριση με μεθόδους υψηλότερης τάξης.

Για τις παραπάνω τιμές μεγέθους βήματος θα υπολογίσουμε τον ρυθμό σύγκλισης της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης που θα πρέπει να συγκλίνει στην τάξη ακρίβειας της. Τα αποτελέσματα φαίνονται στον παρακάτω πίνακα.

p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6
5.4528	5.3893	4.4511	4.2063	4.1289	4.0718

Πίνακας 5.6: Ρυθμός σύγκλισης μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για το το ΠΑΤ (5.2)

Παρατηρούμε ότι, ο αρχικά υψηλότερος ρυθμός σύγκλισης της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 υποδηλώνει ότι προσεγγίζει τη λύση με μεγαλύτερη ακρίβεια στα αρχικά στάδια. Ωστόσο, καθώς το μέγεθος του βήματος μειώνεται, ο ρυθμός σύγκλισης συγκλίνει στην αναμενόμενη τάξη μεγέθους 4, υποδεικνύοντας ότι η μέθοδος επιτυγχάνει την επιθυμητή ακρίβεια. Επομένως, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι, η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης παρέχει ακριβή αποτελέσματα που συνάδουν με τη θεωρητική της τάξη για το συγκεκριμένο πρόβλημα αρχικών τιμών.

5.2 Συστήματα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης

Παράδειγμα 6. Δίνεται το σύστημα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης (βλ. [4], Κεφάλαιο 2, σελ. 60):

$$\begin{cases} y_1' = -16y_1 + 12y_2 + 16\cos(x) - 13\sin(x), \\ y_2' = 12y_1 - 9y_2 - 11\cos(x) + 9\sin(x), \\ y_1(0) = 1, \\ y_2(0) = 0. \end{cases} \quad (5.3)$$

Η αναλυτική λύση του συστήματος είναι:

$$\begin{aligned} y_1 &= \cos(x), \\ y_2 &= \sin(x). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Θέλουμε να επιλύσουμε το παραπάνω πρόβλημα αρχικών τιμών με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης *ABM4*, οπότε θα εφαρμόσουμε στο *MATLAB* τον αλγόριθμο στο παράρτημα *B*. Η συνάρτηση έχει σαν ορίσματα το *f* που περιέχει την έκφραση για την πρώτη διαφορική εξίσωση y_1 , το *g* που περιλαμβάνει την έκφραση για τη δεύτερη διαφορική εξίσωση y_2 , το *a* και το *b* όπου είναι το πρώτο και το τελευταίο σημείο του διαστήματος ολοκλήρωσης, το μέγεθος βήματος *h* και τις αρχικές συνθήκες y_1a και y_2a . Ο αλγόριθμος υπολογίζει τις αναγκαίες αρχικές τιμές μέσω της μεθόδου *Runge-Kutta* 4ης τάξης και στην συνέχεια, χρησιμοποιεί την μέθοδο πρόβλεψης *Adams-Bashforth* 4ης τάξης και την μέθοδο διόρθωσης *Adams-Moulton* 4ης τάξης. Οι έξοδοι της συνάρτησης είναι το διάνυσμα *t* που περιέχει τα χρονικά σημεία στα οποία υπολογίζεται η λύση, το y_1 και το y_2 που περιέχουν τις υπολογισμένες τιμές της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης για το σύστημα.

Στους παρακάτω πίνακες φαίνονται οι προσεγγίσεις της λύσης με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης καθώς και η αναλυτική λύση για τις δύο συνιστώσες y_1, y_2 του ΠΑΤ (5.3).

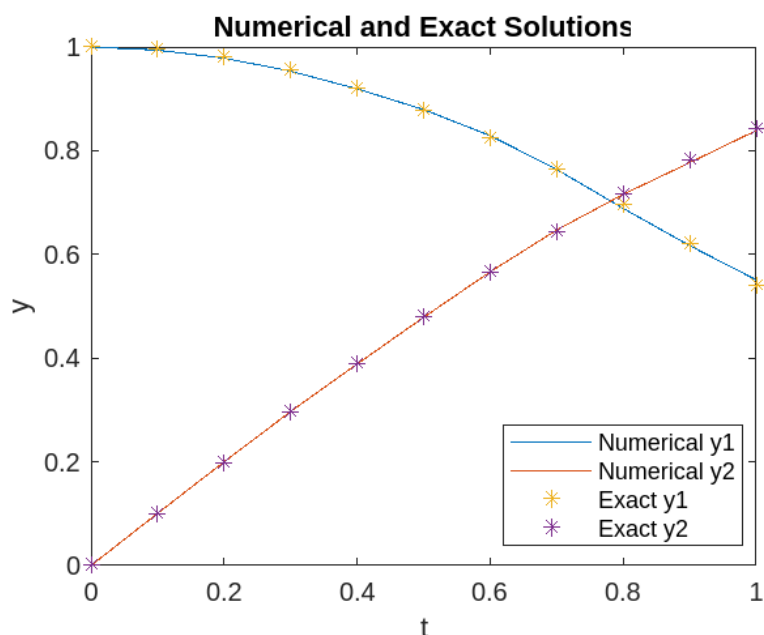
<i>x</i>	y_1	ABM4
0	1.0000000000000000	1.0000000000000000
0.1	0.995004165278026	0.994963611825340
0.2	0.980066577841242	0.980050179074830
0.3	0.955336489125606	0.955331498904996
0.4	0.921060994002885	0.921062693424046
0.5	0.877582561890373	0.877577190779965
0.6	0.825335614909678	0.825337814765202
0.7	0.764842187284488	0.764837574147860
0.8	0.696706709347165	0.696707468143147
0.9	0.621609968270664	0.621606743871363
1	0.540302305868140	0.540301703067199

Πίνακας 5.7: Αναλυτική και προσεγγίσεις της λύσης της y_1 συνιστώσας του ΠΑΤ (5.3) με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης *ABM4* για $h = 0.05$

x	y_2	ABM4
0	0	0
0.1	0.099833416646828	0.099863831944880
0.2	0.198669330795061	0.198674565711717
0.3	0.295520206661340	0.295523983764040
0.4	0.389418342308650	0.389412923761231
0.5	0.479425538604203	0.479426072148743
0.6	0.564642473395035	0.564638833927359
0.7	0.644217687237691	0.644216754433067
0.8	0.717356090899523	0.717353548864833
0.9	0.783326909627484	0.783325087136825
1	0.841470984807897	0.841468883526687

Πίνακας 5.8: Αναλυτική και προσεγγίσεις της λύσης της y_2 συνιστώσας του ΠΑΤ (5.3) με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για $h = 0.05$

Στο σχήμα (5.5) απεικονίζονται οι προσεγγιστικές λύσεις της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για τις δύο συνιστώσες καθώς και οι αναλυτικές λύσεις.



Σχήμα 5.5: Αναλυτική και προσεγγιστικές λύσεις της μεθόδου ABM4 με βήμα $h = 0.1$ για το ΠΑΤ (5.3)

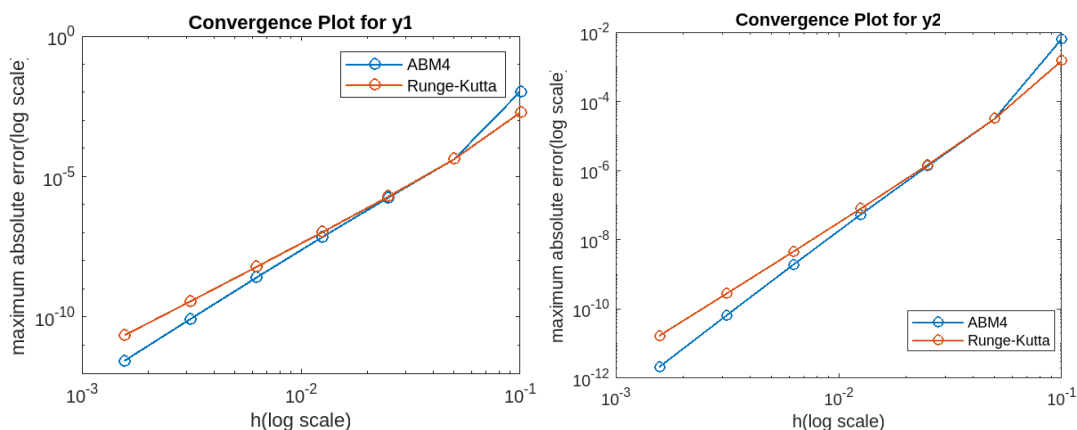
Γίνεται αντιληπτό ότι η αριθμητική μέθοδος που επιλέξαμε για την προσέγγιση της λύσης δίνει πολύ καλά αποτελέσματα και για τις δύο συνιστώσες του συστήματος του προβλήματος αρχικών τιμών (5.3). Κατόπιν, θα εκτιμήσουμε στο MATLAB το μέγιστο απόλυτο σφάλμα των μεθόδων ABM4 και Runge-Kutta 4ης τάξης για διάφορες τιμές βήματος h για τις δύο συνιστώσες για να δούμε ποια από τις δύο μεθόδους έχει καλύτερη ακρίβεια στο συγκεκριμένο πρόβλημα.

h	Runge-Kutta	ABM4
0.1	0.0019	0.0106
0.05	$4.1809e - 05$	$4.1809e - 05$
0.025	$1.9366e - 06$	$1.7788e - 06$
0.0125	$1.0436e - 07$	$7.0366e - 08$
0.00625	$6.0368e - 09$	$2.5278e - 09$
0.003125	$3.6275e - 10$	$8.5170e - 11$
0.0015625	$2.2227e - 11$	$2.7676e - 12$

Πίνακας 5.9: Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων Runge-Kutta 4ης τάξης και ABM4 για την συνιστώσα y_1 του ΠΑΤ (5.3)

h	Runge-Kutta	ABM4
0.1	0.0015	0.0064
0.05	$3.1357e - 05$	$3.1357e - 05$
0.025	$1.4525e - 06$	$1.3341e - 06$
0.0125	$7.8268e - 08$	$5.2775e - 08$
0.00625	$4.5277e - 09$	$1.8959e - 09$
0.003125	$2.7206e - 10$	$6.3878e - 11$
0.0015625	$1.6671e - 11$	$2.0757e - 12$

Πίνακας 5.10: Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων Runge-Kutta 4ης τάξης και ABM4 για την συνιστώσα y_2 του ΠΑΤ (5.3)



Σχήμα 5.6: Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων ABM4 και Runge-Kutta για τις συνιστώσες y_1, y_2 του ΠΑΤ (5.3)

Παρατηρούμε ότι, μόνο για $h = 0.1$ η μέθοδος Runge-Kutta έχει μικρότερα σφάλματα από την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4. Όσο το μέγεθος του βήματος ελαττώνεται, η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 πετυχαίνει καλύτερη ακρίβεια για το σύστημα (5.3).

5.3 Μοντέλο Lotka–Volterra

Παράδειγμα 7. Το μοντέλο Lotka–Volterra θηράματος-θηρευτή (prey–predator) είναι ένα σύστημα μη γραμμικών συνήθων διαφορικών εξισώσεων το οποίο περιγράφει πώς αλλάζουν οι πληθυσμοί δύο ειδών με την πάροδο του χρόνου, το ένα ως θηρευτής (όπως η αλεπού) και το άλλο ως θήραμα (όπως το κουνέλι). Για το μοντέλο ισχύουν οι υποθέσεις:

- Ο πληθυσμός των θηραμάτων αυξάνεται εκθετικά απουσία θηρευτών, με ρυθμό ανάλογο με το τρέχον μέγεθος του πληθυσμού.
- Ο πληθυσμός των θηρευτών μειώνεται εκθετικά απουσία θηράματος, με ρυθμό ανάλογο με το τρέχον μέγεθος του πληθυσμού.
- Ο πληθυσμός των θηρευτών αυξάνεται αναλογικά με τον ρυθμό με τον οποίο συναντά το θήραμα και ο πληθυσμός των θηραμάτων μειώνεται αναλογικά με τον ρυθμό με τον οποίο συναντά θηρευτές.

Το χαρακτηριστικό αυτού του μοντέλου είναι ότι οι πληθυσμοί του θηρευτή και του θηράματος αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Συμβολίζουμε τον πληθυσμό του θηράματος με $x(t)$ και τον πληθυσμό του θηρευτή με $y(t)$. Οπότε, έχουμε το σύστημα εξισώσεων:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= ax - \beta xy, \\ \frac{dy}{dt} &= \delta xy - \gamma y,\end{aligned}\tag{5.5}$$

όπου τα a, β, γ και δ είναι θετικές σταθερές που αντιπροσωπεύουν τον ρυθμό ανάπτυξης του θηράματος, την επίδραση της παρουσίας θηρευτών στον ρυθμό ανάπτυξης του θηράματος, το ποσοστό θνησιμότητας του θηρευτή και την επίδραση της παρουσίας θηράματος στον ρυθμό ανάπτυξης του θηρευτή αντίστοιχα.

Για την επίλυση αυτού του συστήματος με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης πρέπει να μετατρέψουμε το σύστημα σε σύστημα πρώτης τάξης εισάγοντας δύο μεταβλητές:

$$\begin{aligned}y_1 &= x, \\ y_2 &= y.\end{aligned}\tag{5.6}$$

Οπότε το σύστημα γράφεται:

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dt} &= ay_1 - \beta y_1 y_2, \\ \frac{dy_2}{dt} &= \delta y_1 y_2 - \gamma y_2,\end{aligned}\tag{5.7}$$

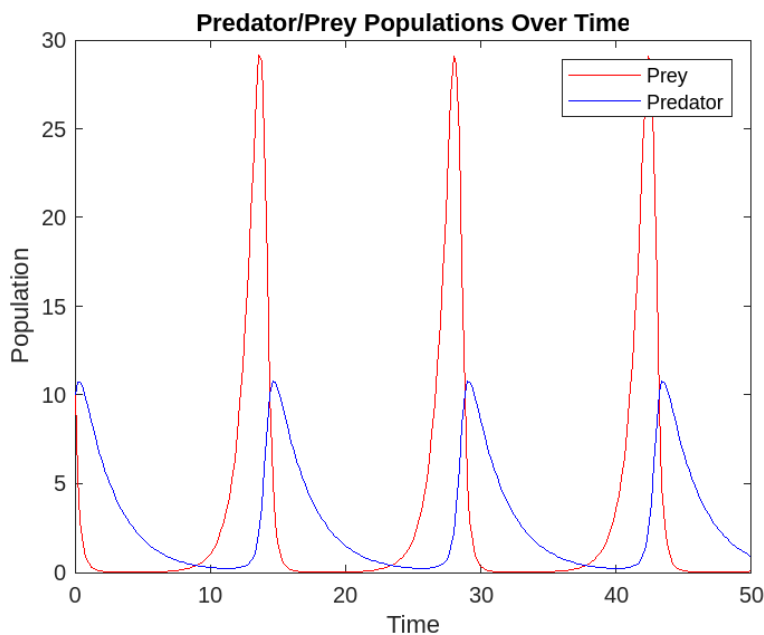
με αρχικές συνθήκες

$$\begin{aligned}y_1(t_0) &= y_{10}, \\ y_2(t_0) &= y_{20}.\end{aligned}\tag{5.8}$$

Έστω ότι οι αρχικοί πληθυσμοί είναι 10 κουνέλια (θήραμα) και 10 αλεπούδες (θηρευτής), ενώ οι συντελεστές είναι $a = 1.1, \beta = 0.4, \gamma = 0.4, \delta = 0.1$. Η επιλογή του χρονικού διαστήματος είναι αυθαίρετη. Μπορούμε να εφαρμόσουμε την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης, όπου η μέθοδος πρόβλεψης είναι η Adams–Bashforth 4ης τάξης και η μέθοδος διόρθωσης είναι η Adams–Moulton 4ης τάξης (4.6).

Θα χρησιμοποιήσουμε τον αλγόριθμο της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης στο παράρτημα Β' για ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης. Η συνάρτηση έχει σαν ορίσματα το f που περιέχει την έκφραση για την πρώτη διαφορική εξίσωση στο μοντέλο Lotka-Volterra που περιγράφει τον πληθυσμό των θηραμάτων, το g που περιλαμβάνει την έκφρασή για τη δεύτερη διαφορική εξίσωση που περιγράφει τον πληθυσμό των θηρευτών, το a και το b όπου είναι ο αρχικός και ο τελικός χρόνος, το μέγεθος βήματος h και τις αρχικές συνθήκες των πληθυσμών των θηραμάτων $y1a$ και των πληθυσμών των θηρευτών $y2a$.

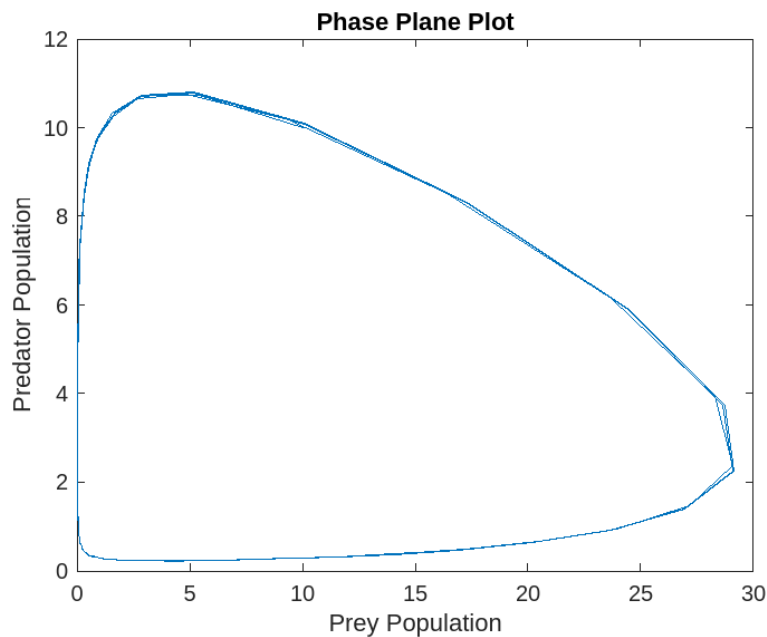
Το παρακάτω γράφημα δείχνει την εξέλιξη των πληθυσμών των θηραμάτων και των θηρευτών με την πάροδο του χρόνου.



Σχήμα 5.7: Διάγραμμα πληθυσμών για το πρόβλημα θηράματος-θηρευτή(5.7) με συνετελεστές $a = 1.1, \beta = 0.4, \gamma = 0.4, \delta = 0.1$ συναρτήσει του χρόνου

Εξετάζοντας τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, παρατηρούμε ότι οι λύσεις παρουσιάζουν περιοδικότητα. Για τις επιλεγμένες παραμέτρους και για ίδιες αρχικές συνθήκες των πληθυσμών, στην διάρκεια μιας περιόδου, ο πληθυσμός των θηραμάτων αρχίζει να μειώνεται ενώ ο αριθμός των θηρευτών αυξάνεται μέχρι το σημείο στο οποίο οι θηρευτές σκοτώνουν τα θηράματα πιο γρήγορα από ό,τι μπορούν να αναπαραχθούν. Συνεπώς, υπάρχει έλλειψη τροφής για τους θηρευτές, άρα αρχίζει να μειώνεται ο πληθυσμός τους και να αυξάνεται ο πληθυσμός των θηραμάτων, λόγω της απουσίας κυνηγιού. Οπότε, το σύστημα θα επιστρέψει στην αρχική του κατάσταση.

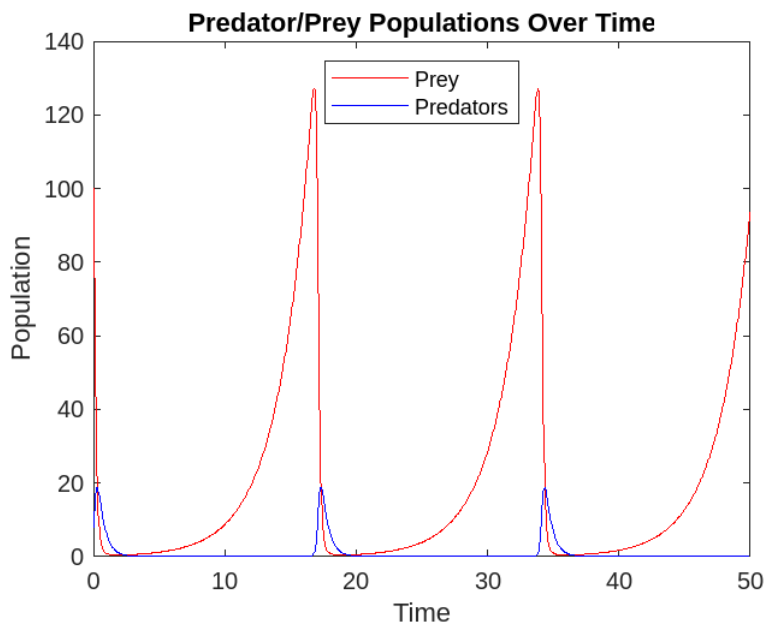
Έπειτα, δίνεται το διάγραμμα των λύσεων στον χώρο φάσης, όπου ο ένας άξονας αντιπροσωπεύει τον αριθμό των θηραμάτων και ο άλλος άξονας αντιπροσωπεύει τον πληθυσμό των θηρευτών, χωρίς να αναπαριστάται ο χρόνος.



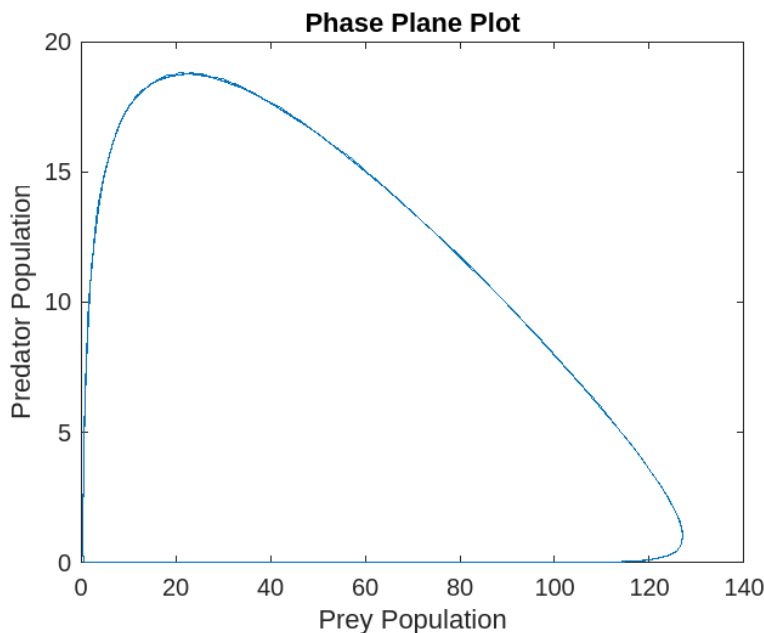
Σχήμα 5.8: Διάγραμμα χώρου φάσης για το πρόβλημα θηράματος-θηρευτή(5.7) με συντελεστές $a = 1.1, \beta = 0.4, \gamma = 0.4, \delta = 0.1$

Οι τροχιές στην γραφική παράσταση δείχνουν πώς οι μεταβλητές αλλάζουν και αλληλεπιδρούν μεταξύ τους καθώς το σύστημα εξελίσσεται. Παρατηρούμε ότι οι τροχιές διαγράφονται κατά την αριστερόστροφη φορά. Κάθε τροχιά στο πρώτο τεταρτημόριο είναι μια κλειστή καμπύλη. Όποια κι αν είναι η αρχική κατάσταση, είναι φανερό ότι η καμπύλη λύσης περιστρέφεται και επιστρέφει στο σημείο εκκίνησης. Γενικά, δεν είναι ξεκάθαρο εάν οι τροχιές που προβλέπονται από το μοντέλο Lotka-Volterra παρατηρούνται στη φύση. Υπάρχουν είδη, όπως οι λύγκες και οι λαγοί στον Καναδά, που περνούν από πληθυσμιακούς κύκλους, αλλά η προσαρμογή μεταξύ των δεδομένων και των εξισώσεων δεν είναι πολύ καλή και μπορεί να υπάρχουν παράγοντες που περιπλέκουν, όπως η ασθένεια [15].

Θα επαναλάβουμε την διαδικασία επίλυσης του προβλήματος θηράματος-θηρευτή με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για διαφορετικούς συντελεστές και για διαφορετικές αρχικές συνθήκες. Έστω ότι οι αρχικοί πληθυσμοί είναι 100 κουνέλια(θήραμα) και 8 αλεπούδες(θηρευτής), ενώ οι συντελεστές είναι $a = 0.4, \beta = 0.4, \gamma = 2$ και $\delta = 0.09$ [16]. Τότε, εφαρμόζοντας τον αλγόριθμό στο MATLAB για τα νέα δεδομένα, προκύπτουν τα διαγράμματα για την εξέλιξη των πληθυσμών για το πρόβλημα (5.7) .



Σχήμα 5.9: Διάγραμμα πληθυσμών για το πρόβλημα θηράματος-θηρευτή(5.7) με συντελεστές $a = 0.4, \beta = 0.4, \gamma = 2, \delta = 0.09$ συναρτήσει του χρόνου



Σχήμα 5.10: Διάγραμμα χώρου φάσης για το πρόβλημα θηράματος-θηρευτή(5.7) με συντελεστές $a = 0.4, \beta = 0.4, \gamma = 2, \delta = 0.09$

Μπορούμε να δούμε ξανά ότι καθώς ο αριθμός των θηραμάτων αρχίζει να μειώνεται, αυξάνεται ο αριθμός των θηρευτών, μέχρι το σημείο που οι θηρευτές σκοτώνουν τα θηράματα πιο γρήγορα από ό,τι μπορούν να αναπαραχθούν. Το αποτέλεσμα είναι οι θηρευτές να στερούνται τροφή και ο αριθμός τους να μειωθεί. Η λύση και σε αυτή την προσομοίωση είναι κυκλική, που σημαίνει ότι ο κύκλος συνεχίζεται επ' άοριστον καθώς ο πληθυσμός έχει διακυμάνσεις [16].

Εφόσον οι εξισώσεις Lotka-Volterra είναι ένα απλοποιημένο παράδειγμα του μοντέλου Kolmogorov, μπορεί να προκύψουν ορισμένα προβλήματα. Το βασικότερο πρόβλη-

μα είναι η ικανότητα ενός πληθυσμού θηραμάτων να ανακάμπτει ακόμη και όταν μειώνεται σε εξαιρετικά χαμηλούς πληθυσμούς. Αυτό δεν παρατηρείται συχνά στην πραγματική ζωή, αφού υπάρχει πιθανότητα ο πληθυσμός των θηραμάτων να εξαφανιστεί, κάτι που έπειτα θα προκαλούσε την εξαφάνιση του πληθυσμού των θηρευτών. Αυτό το πρόβλημα δεν περιορίζεται μόνο στο μοντέλο Lotka-Volterra, αλλά σε πολλά άλλα απλουστευμένα βιολογικά μοντέλα και έχει ονομαστεί «πρόβλημα atto-fox» [16]. Για περισσότερες πληροφορίες για το «πρόβλημα atto-fox» μπορείτε να ανατρέξετε στο [17].

Κεφάλαιο 6

Επίλογος

Συνοψίζοντας, διερευνήθηκε η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης ως μια ισχυρή αριθμητική τεχνική για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Μέσω εκτεταμένης ανάλυσης και εφαρμογής της μεθόδου Adams-Bashforth-Moulton 4ης τάξης, προέκυψαν κάποια συμπεράσματα.

Αρχικά, η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης επιδεικνύει εξαιρετικές ιδιότητες ακρίβειας και ευστάθειας, καθιστώντας την αξιόπιστη επιλογή για ένα ευρύ φάσμα συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Η ανάλυση του ρυθμού σύγκλισης έδειξε ότι η μέθοδος παρουσιάζει τάξη σύγκλισης 4, η οποία ευθυγραμμίζεται με τις θεωρητικές προσδοχίες. Αυτή η υψηλή τάξη ακρίβειας διασφαλίζει ότι η μέθοδος μπορεί να παρέχει ακριβείς λύσεις.

Επιπλέον, η σύγκριση με τη δημοφιλή μέθοδο Runge-Kutta υπογράμμισε τα πλεονεκτήματα της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης, αφού παρουσίασε σταθερά μικρότερα σφάλματα και υψηλότερη αποδοτικότητα. Συνεπώς, αυτό δείχνει την πρακτική σημασία και την ανταγωνιστικότητα της μεθόδου στην επίλυση πολύπλοκων προβλημάτων.

Ακόμη, αποδεικνύεται πολύτιμο εργαλείο για την προσέγγιση των λύσεων του μοντέλου Lotka-Volterra και την κατανόηση της δυναμικής των σχέσεων θηρευτή-θηράματος. Η μέθοδος απέδειξε την ικανότητά της να αποτυπώνει την κυκλική συμπεριφορά και τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ειδών θηρευτή και θηράματος, παρέχοντας πληροφορίες για το οικολογικό σύστημα.

Παρόλο που η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης αποδείχθηκε αποτελεσματική και αξιόπιστη, υπάρχουν ακόμη τομείς για μελλοντική έρευνα και ανάπτυξη. Ένας δρόμος προς διερεύνηση είναι η εφαρμογή της μεθόδου σε δύσκαμπτες διαφορικές εξισώσεις. Τα δύσκαμπτα συστήματα δημιουργούν υπολογιστικές προκλήσεις, λόγω της παρουσίας διαφορετικών χρονικών κλιμάκων, και η διερεύνηση του τρόπου με τον οποίο η μέθοδος μπορεί να χειριστεί τέτοια συστήματα θα ενίσχυε την ευελιξία της και θα διέυρνε την εφαρμογή της.

Επιπρόσθετα, περαιτέρω έρευνες μπορούν να επικεντρωθούν στη βελτιστοποίηση της υπολογιστικής απόδοσης της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης. Η διερεύνηση προσαρμοστικών στρατηγικών μεγέθους βήματος και προσαρμοστικών τεχνικών επιλογής τάξης θα μπορούσε να βελτιώσει την απόδοση της μεθόδου και να μειώσει τους υπολογιστικούς πόρους χωρίς συμβιβασμούς στην ακρίβεια. Τέτοιες εξελίξεις θα ήταν ανεκτίμητες για την αντιμετώπιση προβλημάτων μεγάλης κλίμακας και προσομοιώσεων σε πραγματικό χρόνο.

Τέλος, η μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης μπορεί να επεκταθεί για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων συνδυάζοντάς την με τεχνικές χωρικής διακριτοποίησης, όπως οι μέθοδοι πεπερασμένων διαφορών ή πεπερασμένων στοιχείων.

Παράρτημα Α'

Παράρτημα

Ο κώδικας της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης Adams-Bashforth-Adams-Moulton 4ης τάξης.

```
function [t,y]=abm4(f,a,b,y0,h)
n = (b - a)/h;
y(1,:) = y0; t(1) = a;
m = min(3,n);
for i = 1 : m
    t(i+1) = t(i) + h;
    s(i,:) = f(t(i), y(i,:));
    s2 = f(t(i) + h/2, y(i,:) + s(i,:) * h/2);
    s3 = f(t(i) + h/2, y(i,:) + s2 * h/2);
    s4 = f(t(i+1), y(i,:) + s3 * h);
    y(i+1,:) = y(i,:) + (s(i,:) + 2*s2 + 2*s3 + s4) *h/6;
end
for i = m + 1 : n
    s(i,:) = f(t(i), y(i,:));
    y(i+1,:) = y(i,:) + (55 * s(i,:) - 59 * s(i-1,:) + 37
        * s(i-2,:) - 9 * s(i-3,:)) * h/24;
    t(i+1) = t(i) + h;
    y(i+1,:) = y(i,:) + (9 * f(t(i+1), y(i+1,:)) + 19 * s
        (i,:) - 5 * s(i-1,:) + s(i-2,:)) * h/24;
end
```

Ο κώδικας της μεθόδου Runge-Kutta 4ης τάξης.

```
function [x,y] = RK4th(f,a,b,y0,h)
x = a:h:b;
y = zeros(length(x), 1);
y(1) = y0;
for i = 1:length(x)-1
    k1 = f(x(i), y(i));
    k2 = f(x(i) + h/2, y(i) + h/2*k1);
    k3 = f(x(i) + h/2, y(i) + h/2*k2);
    k4 = f(x(i) + h, y(i) + h*k3);
    y(i+1) = y(i) + h/6*(k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4);
end
```

Ο κώδικας της άμεσης μεθόδου Euler.

```
function [t,y] = euler_explicit(f, y0, t0, tf, h)
t = t0:h:tf;
y = zeros(size(t));
y(1) = y0;

for i = 1:length(t)-1
    y(i+1) = y(i) + h*f(t(i), y(i));
end
```

Παράρτημα Β'

Παράρτημα

Ο κώδικας της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για σύστημα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης.

```
function [t,y1,y2] = abm4_sys(f,g,a,b,y1a,y2a,h)
n = (b - a)/h;
y1(1,:) = y1a; y2(1,:) = y2a;
t(1) = a;
m = min(3,n);
for i = 1 : m
    t(i+1) = t(i) + h;
    s(i,:) = f(t(i), y1(i,:),y2(i,:));
    l(i,:) = g(t(i), y1(i,:),y2(i,:));
    s2 = f(t(i)+h/2, y1(i,:)+s(i,:)*h/2, y2(i,:)+l(i,:)*h/2);
    l2 = g(t(i)+h/2, y1(i,:)+s(i,:)*h/2, y2(i,:)+l(i,:)*h/2);
    s3 = f(t(i)+h/2, y1(i,:)+s2*h/2, y2(i,:)+l2*h/2);
    l3 = g(t(i)+h/2, y1(i,:)+s2*h/2, y2(i,:)+l2*h/2);
    s4 = f(t(i+1), y1(i,:) + s3 * h, y2(i,:) + l3 * h);
    l4 = g(t(i+1), y1(i,:) + s3 * h, y2(i,:) + l3 * h);
    y1(i+1,:) = y1(i,:) + (s(i,:) + 2*s2 + 2*s3 + s4)*h/6;
    y2(i+1,:) = y2(i,:) + (l(i,:) + 2*l2 + 2*l3 + l4)*h/6;
end
for i = m + 1 : n
    s(i,:) = f(t(i), y1(i,:),y2(i,:));
    l(i,:) = g(t(i), y1(i,:),y2(i,:));
    y1(i+1,:) = y1(i,:) + (55 * s(i,:) - 59 * s(i-1,:) +
        37 * s(i-2,:) - 9 * s(i-3,:)) * h/24;
    y2(i+1,:) = y2(i,:) + (55 * l(i,:) - 59 * l(i-1,:) +
        37 * l(i-2,:) - 9 * l(i-3,:)) * h/24;
    t(i+1) = t(i) + h;
    y1(i+1,:) = y1(i,:) + (9 * f(t(i+1), y1(i+1,:),y2(i+1,:)) +
        19 * s(i,:) - 5 * s(i-1,:) + s(i-2,:)) * h/24;
    y2(i+1,:) = y2(i,:) + (9 * g(t(i+1), y1(i+1,:),y2(i+1,:)) +
        19 * l(i,:) - 5 * l(i-1,:) + l(i-2,:)) *
```

```

        h/24;
end

```

Ο κώδικας της μεθόδου Runge-Kutta για σύστημα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης.

```

function [t,y1,y2]=RK4_sys(f,g,a,b,y1a,y2a,h)
n = (b - a) / h;
y1(1,:) = y1a; y2(1,:) = y2a; t(1) = a;
for i=1:n
    t(i+1) = t(i) + h;
    s(i,:) = f(t(i), y1(i,:),y2(i,:));
    l(i,:) = g(t(i), y1(i,:),y2(i,:));
    s2 = f(t(i)+h/2, y1(i,:)+s(i,:)*h/2, y2(i,:)+l(i,:)*h
        /2);
    l2 = g(t(i)+h/2, y1(i,:)+s(i,:)*h/2, y2(i,:)+l(i,:)*h
        /2);
    s3 = f(t(i)+h/2, y1(i,:)+s2*h/2, y2(i,:)+l2*h/2);
    l3 = g(t(i)+h/2, y1(i,:)+s2*h/2, y2(i,:)+l2*h/2);
    s4 = f(t(i+1), y1(i,:) + s3 * h, y2(i,:) + l3 * h);
    l4 = g(t(i+1), y1(i,:) + s3 * h, y2(i,:) + l3 * h);
    y1(i+1,:) = y1(i,:) + (s(i,:) + 2*s2 + 2*s3 + s4)*h
        /6;
    y2(i+1,:) = y2(i,:)+(l(i,:) + 2*l2 + 2*l3 + l4)*h/6;
end

```

Κατάλογος Σχημάτων

2.1	Περιοχή απόλυτης ευστάθειας για την άμεση μέθοδο Euler (FE), την έμμεση μέθοδο Euler (BE) και την μέθοδο του Heun(H). Η περιοχή απόλυτης ευστάθειας της έμμεσης μεθόδου Euler βρίσκεται έξω από το γραμμοσκιασμένο χωρίο [9]	17
2.2	Περιοχή απόλυτης ευστάθειας στο μιγαδικό επίπεδο για άμεσες μεθόδους Runge-Kutta τάξης p [4]	24
3.1	Περιοχή απόλυτης ευστάθειας στο μιγαδικό επίπεδο των μεθόδων Adams-Bashforth 2ης,3ης, 4ης τάξης (αριστερά) και των μεθόδων Adams-Moulton 3ης,4ης,5ης τάξης (δεξιά) [9]	39
4.1	Περιοχή απόλυτης ευστάθειας για την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης PECE που βασίζεται στις μεθόδους ABM με τάξεις ακρίβειας $\tilde{p} = p$ (γραμμική) και με $\tilde{p} = p - 1$ (διακεκομμένη γραμμική) [4]	48
5.1	Αναλυτικές και προσεγγιστικές λύσεις των μεθόδων ABM4, Runge-Kutta, Euler με βήμα $h = 0.025$ για το ΠΑΤ (5.1)	55
5.2	Μέγιστο απόλυτο σφάλμα των μεθόδων ABM4, Runge-Kutta για το ΠΑΤ (5.1)	56
5.3	Αναλυτικές και προσεγγιστικές λύσεις των μεθόδων ABM4, Runge-Kutta,Euler με βήμα $h = 0.025$ για το ΠΑΤ (5.2)	58
5.4	Σφάλμα των μεθόδων ABM4, Runge-Kutta,Euler για το ΠΑΤ (5.2)	59
5.5	Αναλυτική και προσεγγιστικές λύσεις της μεθόδου ABM4 με βήμα $h = 0.1$ για το ΠΑΤ (5.3)	61
5.6	Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων ABM4 και Runge-Kutta για τις συνιστώσες y_1, y_2 του ΠΑΤ (5.3)	62
5.7	Διάγραμμα πληθυσμών για το πρόβλημα θηράματος-θηρευτή(5.7) με συντελεστές $a = 1.1, \beta = 0.4, \gamma = 0.4, \delta = 0.1$ συναρτήσει του χρόνου	64
5.8	Διάγραμμα χώρου φάσης για το πρόβλημα θηράματος-θηρευτή(5.7) με συντελεστές $a = 1.1, \beta = 0.4, \gamma = 0.4, \delta = 0.1$	65
5.9	Διάγραμμα πληθυσμών για το πρόβλημα θηράματος-θηρευτή(5.7) με συντελεστές $a = 0.4, \beta = 0.4, \gamma = 2, \delta = 0.09$ συναρτήσει του χρόνου	66
5.10	Διάγραμμα χώρου φάσης για το πρόβλημα θηράματος-θηρευτή(5.7) με συντελεστές $a = 0.4, \beta = 0.4, \gamma = 2, \delta = 0.09$	66

Κατάλογος Πινάκων

3.1	Τύποι Adams-Bashforth και τοπικό σφάλμα αποκοπής [2]	38
3.2	Τύποι Adams-Moulton και τοπικό σφάλμα αποκοπής [2]	39
5.1	Αναλυτική λύση και προσεγγιστική λύση του ΠΑΤ (5.1) με χρήση της μεθόδου πρόβλεψης διόρθωσης ABM4 για $h = 0.05$	54
5.2	Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων Runge-Kutta, Euler και ABM4 για το ΠΑΤ (5.1)	55
5.3	Ρυθμός σύγκλισης μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για το ΠΑΤ (5.1)	56
5.4	Αναλυτική και προσεγγίσεις της λύσης του ΠΑΤ (5.2) με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για $h = 0.025$	57
5.5	Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων ABM4, Runge-Kutta και Euler για το ΠΑΤ (5.2)	58
5.6	Ρυθμός σύγκλισης μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για το ΠΑΤ (5.2)	59
5.7	Αναλυτική και προσεγγίσεις της λύσης της y_1 συνιστώσας του ΠΑΤ (5.3) με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για $h = 0.05$	60
5.8	Αναλυτική και προσεγγίσεις της λύσης της y_2 συνιστώσας του ΠΑΤ (5.3) με την μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης ABM4 για $h = 0.05$	61
5.9	Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων Runge-Kutta 4ης τάξης και ABM4 για την συνιστώσα y_1 του ΠΑΤ (5.3)	62
5.10	Μέγιστο απόλυτο σφάλμα μεθόδων Runge-Kutta 4ης τάξης και ABM4 για την συνιστώσα y_2 του ΠΑΤ (5.3)	62

Βιβλιογραφία

- [1] W. E. Boyce and R. C. DiPrima. *Στοιχειώδεις Διαφορικές Εξισώσεις και Προβλήματα Συνοριακών Τιμών*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Ε.Μ.Π., 2015. (μτφρ. Θ. Γραμμένος και Ι. Καραφύλλης και Φ. Μεργούπης).
- [2] Π. Ιωσηφίδου. *Αριθμητική επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων με πολυβηματικές μεθόδους και εφαρμογές στην εκπαίδευση*. Μεταπτυχιακή Εργασία, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας & Πανεπιστήμιο Πειραιά, 2020.
- [3] Γ. Δ. Ακρίβης και Β. Α. Δουγαλής. *Αριθμητικές μέθοδοι για συνήθεις διαφορικές εξισώσεις*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 2018. 2η έκδοση.
- [4] J.C. Butcher. *Numerical methods for ordinary differential equations*. John Wiley & Sons, 2 edition, 2008.
- [5] J.D Lambert. *Numerical methods for ordinary differential systems*, volume 146. Wiley New York, 1991.
- [6] Γ. Παπαγεωργίου. Σύντομες Σημειώσεις στην Αριθμητική Ανάλυση των Διαφορικών Εξισώσεων, 2001-2002. http://users.ntua.gr/papag/na2_0de.pdf.
- [7] K. Atkinson and W. Han and D. Stewart. *Numerical solution of ordinary differential equations*. John Wiley & Sons, 2011.
- [8] C. B. Moler. *Αριθμητικές Μέθοδοι με το MATLAB*. Εκδόσεις Κλειδάριθμος, Αθήνα, 2010. (μτφρ. Β. Μεταφτσής).
- [9] A. Quarteroni and R. Sacco and F. Saleri. *Numerical mathematics*. Springer Science & Business Media, 2 edition, 2010.
- [10] Α. Μπακόπουλος και Ι. Χρυσοβέργης. *Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση*. Εκδόσεις Συμεών, Αθήνα, 2009.
- [11] E. Hairer and S.P. Nørsett and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. 1, Nonstiff problems*. Springer-Vlg, 2 edition, 1993.
- [12] G. Wanner. Dahlquist's classical papers on stability theory. *BIT Numerical Mathematics*, 46:671–683, 2006.
- [13] G. Wanner and E. Hairer. *Solving ordinary differential equations II, Stiff and Differential-Algebraic Problems*. Springer Berlin Heidelberg New York, 2 edition, 1996.

- [14] K. Diethelm and N.J. Ford and A.D. Freed. A predictor-corrector approach for the numerical solution of fractional differential equations. *Nonlinear Dynamics*, 29:3–22, 2002.
- [15] F. Brauer and C. Castillo-Chavez. *Mathematical models in population biology and epidemiology*, volume 2. Springer, 2012.
- [16] T. Blaszak and Dr W. Hu. Lotka-volterra models of predator-prey relationships. *web. mst. edu, Retrieved*, pages 09–30, 2019.
- [17] Mollison, Denis. Dependence of epidemic and population velocities on basic parameters. *Mathematical biosciences*, 107(2):255–287, 1991.