Συνήθεις διαφορικές εξισώσεις – O.D.E.

<u>Παράδειγμα αριθμητικής λύσης φυσικού προβλήματος:</u>

Πολλοί πυρήνες είναι ασταθείς π.χ. U^{235} διασπάται σε δύο πυρήνες εκπέμποντας ακτινοβολία. Η σχάση γίνεται με τυχαίο τρόπο και για αυτό μιλάμε για την πιθανότητα διάσπασης των πυρήνων ή για την μέση ζωή τους, δηλαδή το μέσο χρονικό διάστημα για να διασπαστεί περίπου το 60% της αρχικής ποσότητα του πυρήνα

Αν $N_U(t)$ είναι ο αριθμός των πυρήνων U^{235} τη χρονική στιγμή, t, τότε ο ρυθμός διάσπασης του δίδεται από τη σχέση

$$\tau \frac{dN_U}{dt} = -N_U$$ Η λύση της εξίσωσης αυτής είναι $$N_U(t) = N_U(0)\, e^{-t/\tau}$$

Η σταθερά **τ** είναι μια σταθερά που καθορίζει το μέσο χρόνο ζωής του U^{235}.

Όταν t = τ τότε η ποσότητα που δεν έχει διασπαστεί είναι $e^{-1} \sim 0.37$

- Η παραπάνω εξίσωση της ραδιενεργούς διάσπασης αποτελεί μια Δ.Ε. $1^{ης}$ τάξης
- Η εξίσωση αυτή λύνεται αναλυτικά αλλά θα δοκιμάσουμε μια αριθμητική λύση ώστε να ελέγξουμε αν ο αλγόριθμος που αναπτύσσουμε δίνει τη σωστή απάντηση ώστε να τον χρησιμοποιήσουμε σε προβλήματα που δεν έχουμε αναλυτική λύση

Η Μέθοδος του Euler

- Θα εξετάσουμε το γενικό σύστημα

  $\frac{d\vec{y}}{dt} = \vec{f}\left(\vec{y},t\right)$ όπου $t \geq t_0$ και ισχύει η αρχική συνθήκη: $\vec{y}\left(t_0\right) = \vec{y}_0$

  Υποθέτουμε δηλαδή ότι το πρόβλημα ανάγεται σε πρόβλημα αρχικής τιμής:

  όλα τα y_i ορίζονται σε κάποια αρχικό χρόνο $t=t_0$ και

  θέλουμε να ξέρουμε την εξέλιξή τους σε όλους τους μεταγενέστερους χρόνους t.

  Υπάρχουν ακόμα και προβλήματα συνοριακών συνθηκών όπου τα y_i ορίζονται σε περισσότερα από ένα σημεία. Αυτά τα προβλήματα είναι γενικά περισσότερο δύσκολα.

- Προς το παρόν υποθέτουμε ότι έχουμε την μεταβλητή y και ότι ο χρόνος είναι η ανεξάρτητη μεταβλητή μας. Ας σημειώσουμε ότι αν η εξίσωση είναι ανώτερου βαθμού του πρώτου (όπως οι εξισώσεις της Μηχανικής) τότε οδηγούμαστε σε σύστημα εξισώσεων και χρειαζόμαστε γραμμική άλγεβρα για να το λύσουμε, ειδικά αν είμαστε σε χώρο περισσότερο της μιας διάστασης.

Η Μέθοδος του Euler

- Έστω ότι είμαστε σε μια διάσταση. Μπορούμε να γράψουμε:

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \vec{\upsilon}$$

$$\vec{a} = \frac{d\vec{\upsilon}}{dt} = \frac{\vec{F}(y,t)}{m}$$

Με αρχικές συνθήκες $y(0)=y_0$ και $\upsilon(0)=\upsilon_0$

Η κεντρική ιδέα πίσω από τις αριθμητικές μεθόδους είναι η διακριτοποίηση του χρόνου (της ανεξάρτητης μεταβλητής) και η αντικατάσταση των παραγώγων από πεπερασμένες διαφορές:

$$g(y,t) = \frac{d\vec{y}}{dt} \rightarrow \frac{\Delta y}{\Delta t} = \frac{y(t+\Delta t) - y(t)}{\Delta t}$$

Δηλαδή είναι σα να γράφουμε: $\vec{y}(t) = \vec{y}(t_0) + \int_{t_0}^{t} g[\vec{y}(t'),t']dt' \cong \vec{y}_0 + g[\vec{y}_0,t_0](t-t_0)$

Δεδομένης μιας ακολουθίας χρονικών τιμών: t_0, $t_1=t_0+\Delta t$, $t_2=t_0+2\Delta t$, …, όπου $\Delta t > 0$ είναι το χρονικό βήμα, γράφουμε τη λύση για τη χρονική στιγμή t_n σαν $y(t_n) = y_n$ και επομένως έχουμε:

$$\vec{y}_1 = \vec{y}_0 + g[t_0, \vec{y}_0]\Delta t$$

Και γενικά: $\vec{y}_n = \vec{y}_{n-1} + g[t_{n-1}, \vec{y}_{n-1}]\Delta t$ Αυτή είναι η μέθοδος του Euler

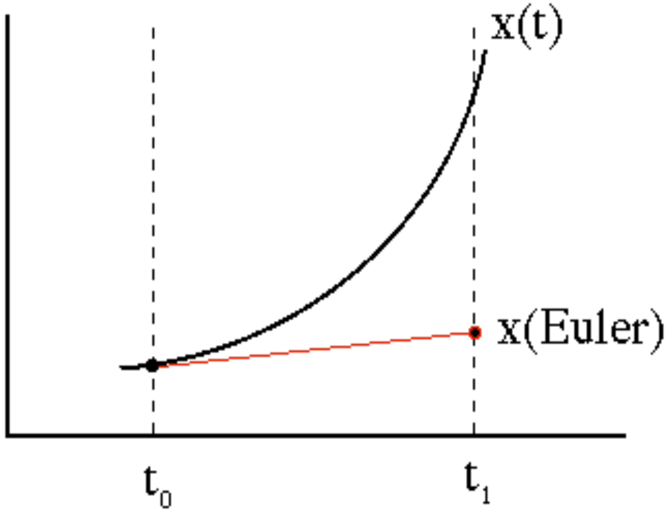
Ο αλγόριθμος του Euler

- Αν εφαρμόσουμε την μέθοδο του Euler στον υπολογιστή, θα πρέπει να αναπτύξουμε τα ακόλουθα τμήματα:
  - Εισάγουμε την αρχική συνθήκη, το μέγεθος και αριθμό των βημάτων (Δt ή Δx) που ορίζονται μέσα στο διάστημα $[x_0,x_n]$ ή $[t_0,t_n]$
  - Υπολογίζουμε τη τιμή της συνάρτησης και της εφαπτομένης στην αρχή κάθε διαστήματος
  - Υπολογίζουμε τη τιμή της συνάρτησης στο τέλος του διαστήματος
  - Επαναλαμβάνουμε n φορές τα βήματα 2 και 3, όσα είναι τα βήματα που έχουμε καθορίσει βάσει του μεγέθους του βήματος και του ολικού διαστήματος

Για να καθορίσουμε την ευστάθεια του αλγόριθμου θα πρέπει να τρέξουμε το πρόγραμμά μας πολλές φορές για διαφορετικές τιμές για το μέγεθος του βήματος (Δx ή Δt) και να δούμε για ποιες τιμές τα αποτελέσματα του αλγορίθμου παραμένουν σταθερά.

Αυτό γιατί ο αλγόριθμος δίνει αποτελέσματα που συμφωνούν με την αναλυτική λύση για μικρές τιμές των διακριτοποιημένων διαστημάτων ενώ για μεγάλες τιμές αποκλίνει του σωστού αποτελέσματος

Γραφική Αναπαράσταση – Μέθοδος Euler



Ουσιαστικά αυτό που κάνουμε με τη μέθοδο του Euler είναι να ακολουθήσουμε την εφαπτομένη της καμπύλης της λύσης για το διάστημα (t_1-t_0)

Κατόπιν υπολογίζουμε και πάλι την κλίση της καμπύλης στο νέο σημείο και προχωρούμε με βάση τη κλίση αυτή στο επόμενο διάστημα

Αν θυμηθούμε, από το ανάπτυγμα Taylor έχουμε:

$$x(t) = x(t_0) + x'(t)\delta t + \frac{1}{2}x''(t)\delta t^2 + \cdots$$

Χρησιμοποιώντας την κλίση σε κάθε διάστημα ουσιαστικά χρησιμοποιούμε τη 1^{η} παράγωγο και αγνοούμε τους ανώτερους όρους τάξης $O(\delta t^2)$

Το σφάλμα επομένως σε κάθε βήμα είναι της τάξης $O(\delta t^2)$ και για N βήματα σε ένα συγκεκριμένο διάστημα αυξάνει σχεδόν γραμμικά.

Επειδή ο αριθμός των βημάτων είναι ανάλογος του διαστήματος $1/\delta t$ ουσιαστικά το σφάλμα είναι γραμμικό με δt

Ανάπτυγμα Taylor

Αν έχουμε μια πολύπλοκη συνάρτηση f(x) συνεχή και η οποία έχει συνεχείς παραγώγους τάξης n σε ένα διάστημα α ≤ x ≤ b. Μπορούμε να εξετάσουμε τις ιδιότητες της συνάρτησης κοντά ή ακριβώς σε ένα σημείο x=α, γράφοντάς τη με τη μορφή ενός πολυωνύμου:

$$f(x)=f(a)\Big|_{x=a}+(x-a)f^{(1)}(x)\Big|_{x=a}+\frac{(x-a)^2}{2!}f^{(2)}(x)\Big|_{x=a}+\frac{(x-a)^3}{3!}f^{(3)}(x)\Big|_{x=a}+\cdots+\frac{(x-a)^n}{n!}f^{(n)}(x)\Big|_{x=a}$$

Πως προκύπτει η σχέση αυτή:

Μπορούμε να ολοκληρώσουμε την n-ιοστή παράγωγο οπότε θα έχουμε:

$$\int_a^x f^{(n)}(x)dx=f^{(n-1)}(x)-f^{(n-1)}(a)$$

Ολοκληρώνοντας και πάλι θα έχουμε:

$$\int_a^x\int_a^x f^{(n)}(x)dx^2=\int_a^x\left[f^{(n-1)}(x)-f^{(n-1)}(a)\right]dx=f^{(n-2)}(x)-f^{(n-2)}(a)-(x-a)f^{(n-1)}(a)$$

Συνεχίζοντας με τον ίδιο τρόπο μετά από n ολοκληρώσεις θα έχουμε:

$$\int_a^x\cdots\int_a^x\int_a^x f^{(n)}(x)dx^n=f(x)-f(a)-(x-a)f^{(1)}(a)-\frac{(x-a)^2}{2!}f^{(2)}(a)\cdots-\frac{(x-a)^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(a)$$

Αυτή η τελευταία σχέση μπορεί να γραφεί επομένως:

$$f(x)=f(a)+(x-a)f^{(1)}(a)+\frac{(x-a)^2}{2!}f^{(2)}(a)+\cdots+\frac{(x-a)^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(a)+\int_a^x\cdots\int_a^x\int_a^x f^{(n)}(x)dx^n$$

Ανάπτυγμα Taylor

Καταλήξαμε στη σχέση:

$$f(x)=f(a)+(x-a)f^{(1)}(a)+\frac{(x-a)^2}{2!}f^{(2)}(a)+\cdots+\frac{(x-a)^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(a)+R_n(x)$$

όπου $R_n(x)=\int_a^x\cdots\int_a^x\int_a^x f^{(n)}(x)dx^n$

Από το θεώρημα μέσης τιμής του ολοκληρωτικού λογισμού έχουμε:

$\int_a^x g(y)dy=(x-a)g(\xi)$ όπου: $a\le\xi\le x$

Εφαρμόζοντας στον όρο $R_n(x)$ και ολοκληρώνοντας n-1 φορές θα πάρουμε:

$R_n(x)=\frac{(x-a)^n}{n!}f^{(n)}(\xi)$ μορφή γνωστή ως μορφή Langrange

Αν η $R_n(x)$ είναι τέτοια ώστε $\lim_{n\to\infty}R_n(x)=0$ καταλήγουμε στην άπειρη σειρά του αναπτύγματος Taylor

$$f(x)=f(a)+(x-a)f^{(1)}(a)+\frac{(x-a)^2}{2!}f^{(2)}(a)+\frac{(x-a)^3}{3!}f^{(3)}(a)+\cdots+\frac{(x-a)^n}{n!}f^{(n)}(a)+\cdots$$

Αν α=0 τότε καταλήγουμε στη λεγόμενη σειρά McLaurin:

$$f(x)=f(0)+xf^{(1)}(0)+\frac{x^2}{2!}f^{(2)}(0)+\frac{x^3}{3!}f^{(3)}(0)+\cdots+\frac{x^n}{n!}f^{(n)}(0)+\cdots$$

Ανάγκη βελτίωσης της μεθόδου του Euler

- Η μέθοδος κάνει γραμμική εξέλιξη ως προς την ανεξάρτητη μεταβλητή και επομένως το σφάλμα ανεβαίνει σαν h^2

  Οι εξισώσεις αντιστοιχούν στο πρώτο όρο του αναπτύγματος γύρω από το σημείο t_0 ή x_0 και επομένως είναι τάξης h^2, $O(h^2)$

  ➡ Η μέθοδος Euler δεν είναι ακριβής.

- Ο φορμαλισμός της μεθόδου του Euler είναι ασύμμετρος. Προχωρά τη λύση μέσω του διαστήματος h αλλά χρησιμοποιεί την πληροφορία σχετικά με την παράγωγο μόνο στην αρχή του διαστήματος

- Αν έχουμε τις εξισώσεις κίνησης ενός σώματος γράφουμε: $\frac{d\vec{\upsilon}}{dt} = \vec{a}\left(\vec{r},\vec{\upsilon}\right); \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{\upsilon}$

- Με τη μέθοδο του Euler θα γράψουμε: $\vec{\upsilon}_{n+1} = \vec{\upsilon}_n + h\vec{a}_n \quad \vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\vec{\upsilon}_n$

- Μια απλή παραλλαγή της μεθόδου είναι η χρησιμοποίηση των εξισώσεων:

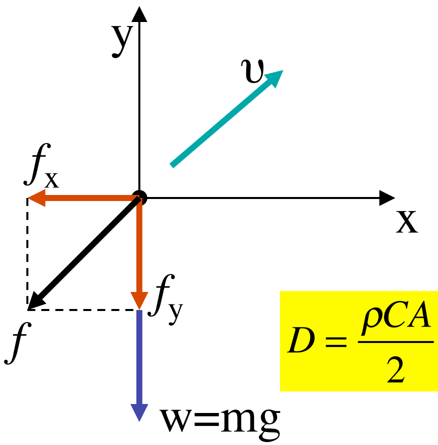
  $\vec{\upsilon}_{n+1} = \vec{\upsilon}_n + h\vec{a}_n \quad \vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\vec{\upsilon}_{n+1}$ ← Euler-Cromer (χρησιμοποίηση της νέας ταχύτητας)

➢ Δεν κερδίζουμε όμως τίποτα σε ακρίβεια. Απλά η μέθοδος αυτή δίνει σωστότερα αποτελέσματα για μια κατηγορία προβλημάτων

Κίνηση σώματος σε 2 διαστάσεις με αντίσταση ρευστού

- Ας υποθέσουμε ότι έχουμε κίνηση ενός βλήματος με αρχική ταχύτητα υ και ότι η δύναμη drag είναι ανάλογη του τετραγώνου της ταχύτητας ***f = Du²***
- Η διεύθυνση της *f* είναι αντίθετη αυτής της υ και το μέτρο της θα είναι:

$$f_x = -D\upsilon\upsilon_x \qquad f_y = -D\upsilon\upsilon_y \qquad f = \sqrt{f_x^2 + f_y^2}, \;\; \kappa\alpha\iota \;\; \upsilon = \sqrt{\upsilon_x^2 + \upsilon_y^2}$$



Επομένως μπορούμε να γράψουμε:

$$\sum F_x = -D\upsilon\upsilon_x = ma_x, \;\; \sum F_y = -\left(mg + D\upsilon\upsilon_y\right) = ma_y$$

$$a_x = -\left(D/m\right)\upsilon\upsilon_x, \;\; a_y = -g - \left(D/m\right)\upsilon\upsilon_y$$

$$D = \frac{\rho CA}{2}$$

Η σταθερά D εξαρτάται από την πυκνότητα του αέρα, ρ, το σχήμα A του σώματος και από μια αδιάσταση σταθερά C που ονομάζεται σταθερά αντίστασης

- Για ένα αρκετά μικρό χρονικό διάστημα Δt μπορούμε να τη θεωρήσουμε σταθερή
- Στο χρονικό διάστημα Δt η μέση x(y)-συνιστώσα της επιτάχυνσης είναι $\alpha_x = \Delta\upsilon_x/\Delta t$, $\alpha_y = \Delta\upsilon_y/\Delta t$, ενώ η ταχύτητα αλλάζει κατά $\Delta\upsilon_x = \alpha_x\Delta t$ και $\Delta\upsilon_y = \alpha_y\Delta t$
- Επομένως στο τέλος του διαστήματος Δt η ταχύτητα έχει τιμή

$$\upsilon_x + \Delta\upsilon_x = \upsilon_x + a_x\Delta t, \quad \upsilon_y + \Delta\upsilon_y = \upsilon_y + a_y\Delta t$$

- Ανάλογα αλλάζουν οι συντεταγμένες του σώματος (χρησιμοποιούμε τη μέση αλλαγή της ταχύτητας στο Δt)

$$\Delta x = \left(\upsilon_x + \frac{\Delta\upsilon_x}{2}\right)\Delta t = \upsilon_x\Delta t + \frac{\Delta\upsilon_x}{2}\Delta t = \upsilon_x\Delta t + \frac{1}{2}a_x\left(\Delta t\right)^2 \qquad x + \Delta x = x + \upsilon_x\Delta t + \frac{1}{2}a_x\left(\Delta t\right)^2$$

Παράδειγμα: Αρμονικός ταλαντωτής

- Οριζόντιο ελατήριο με μάζα m στο ένα άκρο του. Η εξίσωση της κίνησης είναι:

$$m\frac{d^2x}{dt^2}=-kx$$ όπου x η απομάκρυνση από τη θέση ισορροπίας

- Θέτουμε τις αρχικές συνθήκες x(0) και υ(0) και μετατρέπουμε την αρχική εξίσωση σε σύστημα δύο εξισώσεων πρώτου βαθμού

$$\upsilon=\frac{dx}{dt} \qquad \frac{d\upsilon}{dt}=-\frac{k}{m}x$$

- Η πρακτική ερώτηση που παρουσιάζεται τώρα είναι πως μπορούμε να ελέγξουμε τις διάφορες μεθόδους αν δίνουν τα σωστά αποτελέσματα. Μια πολύ ισχυρή μέθοδος είναι αυτή των νόμων διατήρησης. Στη μηχανική όταν δεν έχουμε τριβές η ολική ενέργεια διατηρείται και μπορούμε να θέσουμε το ερώτημα κατά πόσο οι προσεγγιστικές μέθοδοι ικανοποιούν αυτή τη διατήρηση.
- Οι παραπάνω εξισώσεις κίνησης της μάζας εξαρτώμενης από ελατήριο δίνουν ενέργεια $E = m\upsilon^2/2+kx^2/2$. Από τη μέθοδο του Euler οι εξισώσεις είναι

$$\left.\begin{aligned} x_{n+1}&=x_n+\upsilon_n h\\ \upsilon_{n+1}&=\upsilon_n+\left[\left(-k/m\right)x_n\right]h \end{aligned}\right\} \Rightarrow E_{n+1}=\frac{m\upsilon_{n+1}^2}{2}+\frac{kx_{n+1}^2}{2}=(1+\delta)E_n \quad \delta=h^2\frac{k}{m}$$

Άρα $$\boxed{E_{n+1}=\left(1+\delta\right)^n E_0=\left(1+n\delta+O\left(n^2\delta^2\right)\right)E_0 \quad \text{Η μέθοδος Euler δεν διατηρεί τη ενέργεια}}$$

Σφάλμα – μη διατήρηση ενέργειας

- Μπορεί όμως να υποθέσουμε ότι η διαφορά για κάθε βήμα είναι μικρή αφού είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με το σφάλμα της μεθόδου $O(h^2)$
- Το σφάλμα όμως είναι προσθετικό και μετά από n βήματα γίνεται nδ δηλαδή πρώτης τάξης στο δ. Αν το nδ γίνει συγκρίσιμο με τη μονάδα, η προσεγγιστική μέθοδος δεν έχει έννοια.
- Το σφάλμα, όντας προσθετικό, θέτει όρια για τον αριθμό των βημάτων που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε στη μέθοδο του Euler.

Για $n_{max}\delta \approx 1$ $\quad n_{\max} = \dfrac{1}{\delta} = \dfrac{m}{kh^2}$

Βλέπουμε ότι ο μέγιστος αριθμός των βημάτων είναι ανάλογος της μάζας και αντιστρόφως ανάλογος της σταθεράς του ελατηρίου και του βήματος. Βλέπουμε επίσης ότι η ποσότητα $n_{max}h$ έχει διαστάσεις χρόνου και επειδή η περίοδος είναι ανάλογη με το $\sqrt{m/k}$ μας ενδιαφέρει $n_{max}h$ να είναι τουλάχιστον όσο η περίοδος.

Πόσο μικρό είναι το βήμα

Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor βρήκαμε:

$$y(t+\Delta t)-y(t)=\Delta t y'(t)+\frac{(\Delta t)^2}{2}y''(t)+\cdots \Rightarrow \frac{y(t+\Delta t)-y(t)}{\Delta t}=\frac{dy(t)}{dt}+\frac{\Delta t}{2}y''(t)+\cdots$$

Ο πρωτεύων όρος του σφάλματος εξαφανίζεται με Δt άρα είναι τάξης O(Δt)

Στη ραδιενεργό διάσπαση, η διαφορική εξίσωση γράφτηκε: $\frac{y(t+\Delta t)-y(t)}{\Delta t}=-\lambda y(t)+\cdots$

Με προσεγγιστική λύση: $y(t+\Delta t)=y(t)-\lambda y(t)\Delta t=(1-\lambda\Delta t)y(t)$

Είδαμε ακόμα ότι όσο το βήμα μεγαλώνει, η λύση γίνεται ασταθής

Με περίπου την ίδια ακρίβεια μπορούμε να γράψουμε τη λύση με τη μορφή:

$y(t+\Delta t)=y(t)-\lambda y(t+\Delta t)\Delta t$ με λύση $y(t+\Delta t)=\frac{y(t)}{1+\lambda\Delta t}$

$\varepsilon_m = 1.1920929\text{x}10^{-7}$

Τα σφάλματα στην παράγωγο είναι περίπου: $e=E\left[\frac{y(t+\Delta t)-y(t)}{\Delta t}\right]=\frac{y}{\Delta t}\varepsilon_m+\frac{y''\Delta t}{2}$

Το σχετικό σφάλμα είναι: $\frac{e}{y}=\frac{\varepsilon_m}{\Delta t}+\frac{y''\Delta t}{2y}\Rightarrow \boxed{\Delta t_\beta \approx \frac{\sqrt{2}}{\lambda}\sqrt{\varepsilon_m}}$

Βέλτιστη τιμή βήματος

Στρογγυλοποίηση αυξάνει για $\Delta t<\Delta t_\beta$

Παραγώγιση ως προς Δt

Η μέθοδος του ενδιάμεσου σημείου

- Θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο του μέσου σημείου όπου οι εξισώσεις που χρησιμοποιούνται τώρα είναι

$$\vec{\upsilon}_{n+1} = \vec{\upsilon}_n + h\vec{a}_n \qquad \vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\frac{\vec{\upsilon}_{n+1} + \vec{\upsilon}_n}{2}$$

- Στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιούμε το μέσο όρο των δύο ταχυτήτων. Αντικαθιστώντας την έκφραση της ταχύτητας από την πρώτη εξίσωση στη δεύτερη θα έχουμε:

$$\vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\vec{\upsilon}_n + \frac{1}{2}\vec{a}_n h^2$$

- Η μορφή αυτή είναι ενδιαφέρουσα. Το σφάλμα αποκοπής είναι ακόμα τάξης h^2 στην εξίσωση της ταχύτητας αλλά για την εξίσωση θέσης, το σφάλμα αποκοπής είναι τώρα h^3. Στην πραγματικότητα, η μέθοδος αυτή δίνει πολύ πιο σωστά αποτελέσματα από τις δύο προηγούμενες για προβλήματα που εμπλέκουν κίνηση βλημάτων αλλά και πάλι για άλλη κατηγορία προβλημάτων δεν δίνει σωστά αποτελέσματα

- Πως μπορούμε ωστόσο να αυξήσουμε την ακρίβεια της μεθόδου ώστε το σφάλμα να είναι $O(h^3)$ τουλάχιστο

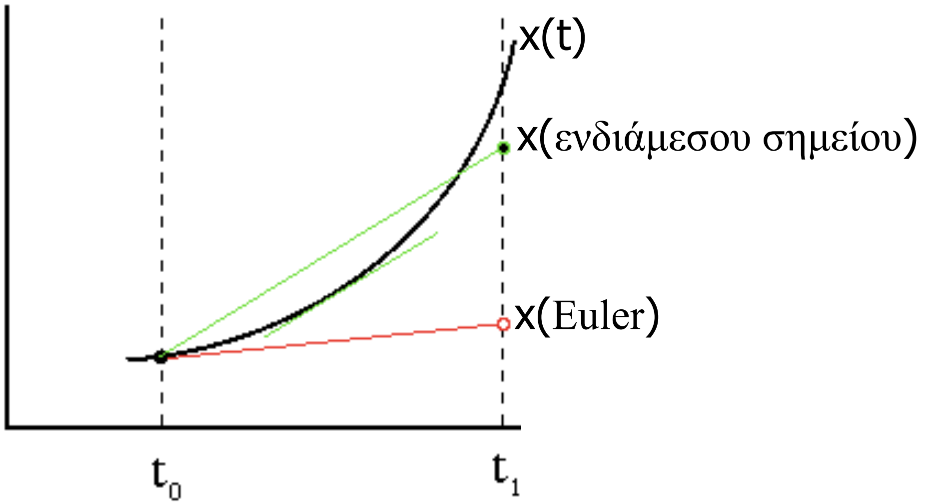
Η μέθοδος του ενδιάμεσου σημείου

- Ο λόγος για τον οποίο η μέθοδος είναι ενδιαφέρουσα φαίνεται από το γεγονός ότι αν εφαρμόσουμε την μέθοδο του Euler χρησιμοποιώντας τη παράγωγο στο ενδιάμεσο σημείο θα έχουμε:

$$x(t) + f\left(t + \frac{1}{2}\delta t\right)\delta t = x(t) + \left[f(t) + \frac{1}{2}f'(t)\delta t\right]\delta t + O\left(\delta t^3\right)$$

- Αυτή είναι η σωστή έκφραση δεύτερης τάξης. Έχουμε κερδίσει μια τάξη μεγέθους στο σφάλμα με το να υπολογίζουμε την παράγωγο σε κάποια άλλη χρονική στιγμή

- Γεωμετρικά αυτό σημαίνει το εξής:



Πως βρίσκουμε την παράγωγο στο ενδιάμεσο σημείο?

Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του Euler:

$$\delta x = f(x_i, t_i)\delta t$$

$$x_{i+1} = x_i + f\left(x_i + \frac{1}{2}\delta x, t_i + \frac{1}{2}\delta t\right)\delta t$$

Η μέθοδος του Verlet - εισαγωγικά

- Η μέθοδος του Euler στηρίζεται στον ορισμό της δεξιάς παραγώγου. Ένας ισοδύναμος ορισμός είναι

$$f'(t) = \lim_{h \to 0} \frac{f(t+h) - f(t-h)}{2h}$$

- Αυτή η εξίσωση λέμε ότι είναι ζυγισμένη ως προς t. Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor μπορούμε να γράψουμε

$$f(t+h) = f(t) + hf'(t) + \frac{1}{2!}h^2 f''(t) + \frac{1}{3!}h^3 f'''(\zeta_+)$$

$$f(t-h) = f(t) - hf'(t) + \frac{1}{2!}h^2 f''(t) - \frac{1}{3!}h^3 f'''(\zeta_-)$$

όπου $\zeta_\pm$ είναι μεταξύ t και t±h

- Επομένως αφαιρώντας γράφουμε:

σφάλμα αποκοπής τάξης h^2

$$f'(t) = \frac{f(t+h) - f(t-h)}{2h} - \frac{1}{3!}h^2 f'''(\zeta) \quad \text{οπου } t - h \le \zeta \le t + h$$

- Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor για *f*(t+h) και *f*(t-h) μπορούμε να γράψουμε τη δεύτερη παράγωγο της *f* με τη μορφή

$$f''(t) = \frac{f(t+h) + f(t-h) - 2f(t)}{h^2} - \frac{1}{4!}h^2 f^{(4)}(\zeta) \quad \text{οπου } t - h \le \zeta \le t + h$$

Η Μέθοδος Verlet

- Παίρνοντας τις εξισώσεις κίνησης $\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{\upsilon}(t); \quad \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{a}(\vec{r})$
  και χρησιμοποιώντας τις σχέσεις
  για την πρώτη και δεύτερη παράγωγο που δείξαμε πριν θα έχουμε

$$\frac{\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_{n-1}}{2h} + O(h^2) = \vec{\upsilon}_n \qquad \frac{\vec{r}_{n+1} + \vec{r}_{n-1} - 2\vec{r}_n}{h^2} + O(h^2) = \vec{a}_n \quad \text{οπου} \ \ \vec{a}_n = \vec{a}(\vec{r}_n)$$

- Από τις εξισώσεις αυτές παίρνουμε:

$$\vec{\upsilon}_n = \frac{\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_{n-1}}{2h} + O(h^2)$$

$$\vec{r}_{n+1} = 2\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1} + h^2\vec{a}_n + O(h^4)$$

- Γνωρίζοντας r_0 και r_1 μπορούμε να υπολογίσουμε r_2.
  Γνωρίζοντας r_2 και r_1 μπορούμε να υπολογίσουμε r_3 και άρα να πάρουμε υ_2

- Το πρόβλημα της μεθόδου είναι ότι δεν είναι εύκολο να την ξεκινήσουμε.
  Οι αρχικές συνθήκες που μας δίνονται συνήθως είναι $r_1 = r(t = 0)$ και $\upsilon_1 = \upsilon(t = 0)$ αλλά όχι $r_0 = r(t = -h)$

- Επιπλέον προβλήματα στρογγυλοποίησης στον τύπο της ταχύτητας λόγω αφαίρεσης σχεδόν ίσων και μεγάλων μεγεθών

Η Μέθοδος Verlet – ταχύτητας

Από τις σχέσεις: $\vec{\upsilon}_n = \dfrac{\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_{n-1}}{2h} + O(h^2)$ (1) $\quad \vec{r}_{n+1} = 2\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1} + h^2\vec{a}_n + O(h^4)$ (2)

Λύνοντας την (1) ως προς r_{n-1} έχουμε: $\vec{r}_{n-1} = \vec{r}_{n+1} - 2h\vec{\upsilon}_n$ (3)

Αντικαθιστώντας στην (2): $\vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\vec{\upsilon}_n + \dfrac{h^2}{2}\vec{a}_n$ (4)

Από την (1) έχουμε ακόμα: $\vec{\upsilon}_{n+1} = \dfrac{\vec{r}_{n+2} - \vec{r}_n}{2h}$ (5)

Αλλά σύμφωνα με την (2), r_{n+2} δίνεται από: $\vec{r}_{n+2} = 2\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_n + h^2\vec{a}_{n+1}$ (6)

Αντικατάσταση της (6) στη (5) δίνει: $\vec{\upsilon}_{n+1} = \dfrac{\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_n}{h} + \dfrac{h}{2}\vec{a}_{n+1}$ (7)

Χρησιμοποιώντας την (4) για αντικατάσταση του r_{n+1} - r_n στην (7) έχουμε:

$$\vec{\upsilon}_{n+1} = \frac{h\vec{\upsilon}_n + \frac{h^2}{2}\vec{a}_n}{h} + \frac{h}{2}\vec{a}_{n+1} \Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \vec{\upsilon}_{n+1} &= \vec{\upsilon}_n + \frac{h}{2}\left(\vec{a}_n + \vec{a}_{n+1}\right) \\ \vec{r}_{n+1} &= \vec{r}_n + h\vec{\upsilon}_n + \frac{h^2}{2}\vec{a}_n \end{aligned}}$$

Μέθοδος Verlet ταχύτητας

- Η μέθοδος αυτή είναι μαθηματικά ισοδύναμη με την γενική μορφή του Verlet αλλά δεν παρουσιάζει προβλήματα σφαλμάτων στογγυλοποίησης και επίσης ξεκινά εύκολα από τις αρχικές συνθήκες και μόνο.

Η Μέθοδος Verlet – ταχύτητας

Σχηματικά η μέθοδος ταχύτητας Verlet μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως εξής:

Δεδομένων των αρχικών συνθηκών x_k και υ_k και της συνάρτησης της δύναμης ή επιτάχυνσης ενός σώματος F(x):

Βήμα 1: Υπολογίζουμε $\upsilon_{k+1/2} = \upsilon_k + \frac{h}{2} F(x_k)$

Βήμα 2: Υπολογίζουμε $x_{k+1} = x_k + \upsilon_{k+1/2} h$

Βήμα 3: Υπολογίζουμε $\upsilon_{k+1} = \upsilon_{k+1/2} + \frac{h}{2m} F(x_{k+1})$

Περιγραφή της Μεθόδου *Runge-Kutta*:

Η μέθοδος χρειάζεται την διαφορική εξίσωση της μορφής:

$$y'' = f(x,y,y')$$
$$\frac{d^2y}{dx^2} = f\left(x,y,\frac{dy}{dx}\right)$$

Από τη στιγμή που η ανεξάρτητη μεταβλητή στο πρόβλημά μας είναι *t*, θα έχουμε:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{b}{m}\frac{dx}{dt} = f_x\left(t,x,\frac{dx}{dt}\right) \Rightarrow \ddot{x} = f_x(t,x,\dot{x}) \Rightarrow f_x(t,x,\dot{x}) = -\frac{b}{m}\dot{x}$$

και αντίστοιχα στη y-διεύθυνση:

$$\frac{d^2y}{dt^2} = -g - \frac{b}{m}\frac{dy}{dt} = f_y\left(t,y,\frac{dy}{dt}\right) \Rightarrow \ddot{y} = f_y(t,y,\dot{y}) \Rightarrow f_y(t,y,\dot{y}) = -g - \frac{b}{m}\dot{y}$$

Ο αλγόριθμος *Runge-Kutta* $2^{ης}$ τάξης πρώτα είναι:

$$\frac{dy}{dt} = f(t,y) \qquad [1]$$

$$y(t) = \int f(t,y)\,dt \qquad [2]$$

$$y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t,y)\,dt \qquad [3]$$

Έστω ότι πέρνουμε το ανάπτυγμα Taylor της $f(t,y)$ ως προς το κέντρο του διαστήματος ολοκλήρωσης t_i και t_{i+1}, δηλαδή $t_i + h/2$, όπου h είναι το χρονικό βήμα. Χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο του ενδιάμεσου σημείου για να κάνουμε την ολοκλήρωση και ορίζοντας $y(t_i + h/2) = y_{i+1/2}$ και $t_i + h/2 = t_{i+1/2}$, έχουμε:

$$\int_{t_i}^{t_i+1} f(t,y) \approx hf\left(t_{i+1/2}, y_{i+1/2}\right) + O\left(h^3\right) \qquad [4]$$

Αυτό σημαίνει ότι θα έχουμε:

$$y_{i+1} = y_i + hf\left(t_{i+1/2}, y_{i+1/2}\right) + O\left(h^3\right) \qquad [5]$$

Μέθοδος Runge-Kutta 2ης τάξης

Ωστόσο δεν γνωρίζουμε την τιμή $y_{i+1/2}$. Εδώ εφαρμόζουμε την επόμενη προσέγγιση, χρησιμοποιούμε τη μέθοδο *Euler* για να βρούμε προσεγγιστικά το $y_{i+1/2}$. Επομένως, θα έχουμε:

$$y_{i+1/2} = y_i + \frac{h}{2}\frac{dy}{dt} = y(t_i) + \frac{h}{2} f(t_i, y_i) \qquad \textbf{[6]}$$

Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να ορίσουμε τον ακόλουθο αλγόριθμο για τη μέθοδο *Runge-Kutta* 2ης τάξης:

$$k_1 = hf(t_i, y_i) \qquad \textbf{[7]}$$

$$k_2 = hf\left(t_{i+h/2}, y_i + k_1/2\right) \qquad \textbf{[8]}$$

και τελικά:

$$y_{i+1} \approx y_i + k_2 + O\left(h^3\right) \qquad \textbf{[9]}$$

Η διαφορά με τις προηγούμενες μεθόδου ενός βήματος είναι ότι χρειαζόμαστε ένα ενδιάμεσο βήμα στους υπολογισμούς μας, το βήμα $t_i + h/2 = t_{i+1/2}$ όπου υπολογίζουμε την παράγωγο *f*.

Μέθοδος Runge-Kutta 4ης τάξης

Η μέθοδος *Runge-Kutta* 4ης τάξης ή *RK*4 ξεκινά και πάλι με την εξίσωση:

$$y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t,y)\,dt$$

αλλά αντί να προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα με τη μέθοδο του ενδιάμεσου σημείου χρησιμοποιούμε την μέθοδο ολοκλήρωσης του *Simpson* στο $t_i + h/2$. Η μέθοδος *Simpson* ολοκλήρωσης, ορίζοντας $y(t_i + h/2) = y_{i+1/2}$ και $t_i + h/2 = t_{i+1/2}$ έχουμε:

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t,y)\,dt \approx \frac{h}{6}\Big[f(t_i,y_i) + 4f\big(t_{i+1/2},y_{i+1/2}\big) + f(t_{i+1},y_{i+1})\Big] + O(h^5) \qquad \textbf{[10]}$$

Αυτό σημαίνει ότι θα πρέπει να γνωρίζουμε τις τιμές των $y_{i+1/2}$ και y_{i+1}. Η μέθοδος *Runge-Kutta* 4ου βαθμού χωρίζει τους υπολογισμούς του ενδιάμεσου σημείου σε δυο βήματα:

$$y_{i+1} \approx y_i + \frac{h}{6}\Big[f(t_i,y_i) + 2f\big(t_{i+1/2},y_{i+1/2}\big) + 2f\big(t_{i+1/2},y_{i+1/2}\big) + f(t_{i+1},y_{i+1})\Big] \qquad \textbf{[11]}$$

αφού θέλουμε να προσεγγίσουμε τη κλίση στο $y_{i+1/2}$ σε δυο βήματα. Οι δυό πρώτοι υπολογισμοί της συναρτήσης είναι όπως και στη μέθοδο *RK*2. Ο αλγόριθμος είναι ο ακόλουθος:

Μέθοδος Runge-Kutta 4ης τάξης

(i) Πρώτα υπολογίζουμε: $k_1 = hf\left(t_i, y_i\right)$ **[12]**

που δεν είναι τίποτα άλλο από τη κλίση στο t_i. Αν σταματούσαμε εδώ θα είχαμε τη μέθοδο του *Euler*.

(ii) Υπολογίζουμε κατόπιν τη κλίση στο ενδιάμεσο σημείο χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του *Euler* για να προβλέψουμε το $y_{i+1/2}$ όπως και στη μέθοδο *RK*2. Αυτό οδηγεί στον υπολογισμό:

$$k_2 = hf\left(t_i + h/2, y_i + k_1/2\right) \qquad \textbf{[13]}$$

(iii) Η καλύτερη προσέγγιση της κλίσης στο ενδιάμεσο σημείο χρησιμοποιείται για να υπολογιστεί καλύτερα η κλίση στο $y_{i+1/2}$:

$$k_3 = hf\left(t_i + h/2, y_i + k_2/2\right) \qquad \textbf{[14]}$$

(iv) Χρησιμοποιώντας αυτή τη τελευταία κλίση μπορούμε να υπολογίσουμε τη τιμή y_{i+1} με βάση τον υπολογισμό:

$$k_4 = hf\left(t_i + h, y_i + k_3\right) \qquad \textbf{[15]}$$

(v) Το τελευταίο στάδιο του υπολογισμού είναι:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right) \qquad \textbf{[16]}$$

Μέθοδος Runge-Kutta 4ης τάξης

Επομένως ο αλγόριθμος αποτελείται από τα ακόλουθα 4 στάδια. Πρώτα υπολογισμός του k_1, κατόπιν αύξηση της ανεξάρτητης μεταβλητής κατά μισό βήμα $h/2$ και υπολογισμός του k_2 και k_3 και τέλος υπολογισμός του k_4. Χρειάζεται δηλαδή να γράψουμε 4 συναρτήσεις που κάνουν ακριβώς αυτούς τους υπολογισμούς.
Η ακρίβεια της μεθόδου είναι h^5 και η συνολική ακρίβεια h^4.