σχολήχημικώνμηχανικών
εθνικόμετσόβιοπολυτεχνείο

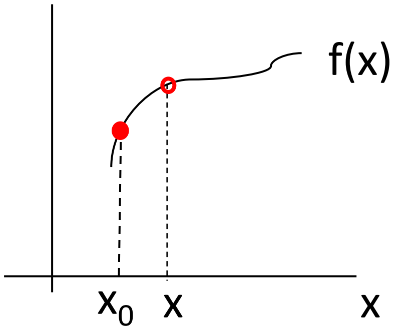
Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις – Πρόβλημα Αρχικών τιμών

http://ecourses.chemeng.ntua.gr/courses/computational_methods_for_engineers/

Σειρές Taylor

Θεωρούμε μια πραγματική συνάρτηση f(x) ορισμένη στο διάστημα [a,b] και απείρως παραγωγίσιμη, και x_0 εσωτερικό σημείο του [α,β]. Η τιμή της συνάρτησης σε κάθε σημείο x, κοντά στο σημείο x_0 μπορεί να προσεγγισθεί από το άθροισμα:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f''(x_0)\frac{(x - x_0)^2}{2!} + f'''(x_0)\frac{(x - x_0)^3}{3!} + \dots$$



$$f(x) = P_n(x) + R_{n+1}(x)$$

Πολυώνυμο Taylor n-βαθμού

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f''(x_0)\frac{(x - x_0)^2}{2!} + f'''(x_0)\frac{(x - x_0)^3}{3!} + \dots + f^{(n)}(x_0)\frac{(x - x_0)^n}{n!}$$

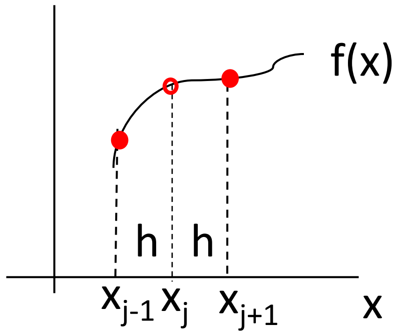
Υπόλοιπο Taylor

$$R_{n+1}(x) = f^{(n+1)}(x_0)\frac{(x - x_0)^{n+1}}{(n+1)!} + f^{(n+2)}(x_0)\frac{(x - x_0)^{n+2}}{(n+2)!} + \dots$$

$O(h^{n+1})$

Αριθμητική παραγώγιση συναρτήσεων

Πεπερασμένες διαφορές για τον υπολογισμό παραγώγων



1) Διαμερισμός:

ισαπέχοντα σημεία x_j; $x_j - x_{j-1} = h$; $x_{j+1} - x_j = h$

2) Σειρές Taylor:

$$f(x_{j+1}) = f(x_j) + f'(x_j)\overbrace{(x_{j+1} - x_j)}^{h} + f''(x_j)\frac{\overbrace{(x_{j+1} - x_j)}^{h}{}^2}{2!} + f'''(x_j)\frac{\overbrace{(x_{j+1} - x_j)}^{h}{}^3}{3!} + \ldots$$

$$f(x_{j-1}) = f(x_j) + f'(x_j)(-h) + f''(x_j)\frac{(-h)^2}{2!} + f'''(x_j)\frac{(-h)^3}{3!} + \ldots$$

3) Αποκοπή όρων:

$$f(x_{j+1}) = f(x_j) + f'(x_j)h + O(h^2)$$

4) Επίλυση ως προς την παράγωγο:

$$f'(x_j)=\frac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{h}-\cancel{\frac{O(h^2)}{h}}^{\,O(h)}$$

$$\boxed{f'(x_j)=\frac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{h}+O(h)\quad \text{Forward Finite Difference}}$$

$$f'(x_j)=\frac{f(x_j)-f(x_{j-1})}{h}+O(h)$$

$$\boxed{f'(x_j)=\frac{f(x_j)-f(x_{j-1})}{h}+O(h)\quad \text{Backward Finite Difference}}$$

5) Συνδυασμός σειρών Taylor για μεγαλύτερη ακρίβεια:

$$f(x_{j+1})=f(x_j)+f'(x_j)h+\ f''(x_j)\frac{h^2}{2!}+f'''(x_j)\frac{h^3}{3!}+\dots$$

-

$$f(x_{j-1})=f(x_j)+f'(x_j)(-h)+f''(x_j)\frac{(-h)^2}{2!}+f'''(x_j)\frac{(-h)^3}{3!}+\dots$$

$$f(x_{j+1})-f(x_{j-1})=2f'(x_j)h+\ 0+2f'''(x_j)\frac{h^3}{3!}+\dots$$

$$\boxed{f'(x_j)=\frac{f(x_{j+1})-f(x_{j-1})}{2h}+O(h^2)\quad \text{Κεντρική πεπερασμένη διαφορά Central F.D.}}$$

6) Συνδυασμός σειρών Taylor για μεγαλύτερη παράγωγο:

$$f(x_{j+1}) = f(x_j) + f'(x_j)h + f''(x_j)\frac{h^2}{2!} + f'''(x_j)\frac{h^3}{3!} + \dots$$

+

$$f(x_{j-1}) = f(x_j) + f'(x_j)(-h) + f''(x_j)\frac{(-h)^2}{2!} + f'''(x_j)\frac{(-h)^3}{3!} + \dots$$

$$f(x_{j+1}) + f(x_{j-1}) = 2f(x_j) + 0 + 2f''(x_j)\frac{h^2}{2!} + 0 + 2f^{(4)}(x_j)\frac{h^4}{4!} + \dots$$

$$f''(x_j) = \frac{f(x_{j+1}) - 2f(x_j) + f(x_{j-1})}{h^2} + O(h^2)$$

Κεντρική πεπερασμένη διαφορά για την 2^{η} παράγωγο

Επίλυση διαφορικών εξισώσεων

- Συνήθεις – Μερικές Δ.Ε. (μία ανεξάρτητη μεταβλητή ή περισσότερες)
- Γραμμικές – Μη Γραμμικές Δ.Ε. (ως προς την εξαρτημένη μεταβλητή ή τις παραγώγους της)
- $1^{ης}$ Τάξης ή μεγαλύτερης (μέγιστη τάξη παραγώγου)
- Μία Δ.Ε. ή Σύστημα

Α. Επίλυση μίας συνήθους $1^{ης}$ τάξης Δ.Ε. (Πρόβλημα Αρχικών Τιμών)

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \qquad y(x_0)=y_0$$

ή

$$\frac{dy}{dt} = f(t,y) \qquad y(t_0)=y_0$$

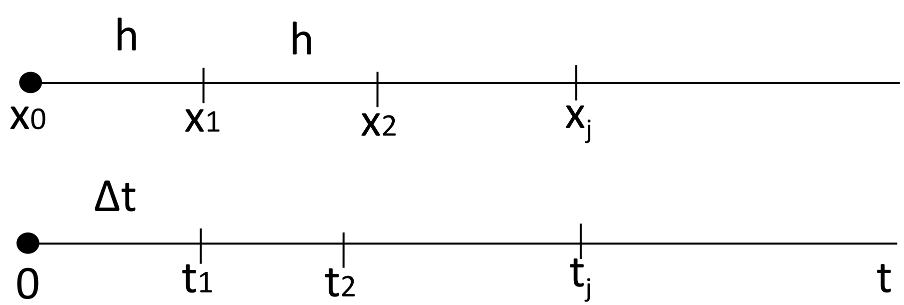
Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών

1. Διαμέριση ανεξάρτητης μεταβλητής

$h = ?$

$x_j = j\,h+x_0$

$t_j = j\,\Delta t$



2. Επιλογή σχήματος πεπερασμένων διαφορών

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_j} = \begin{cases} \dfrac{y(x_{j+1}) - y(x_j)}{h} = \dfrac{y_{j+1} - y_j}{h} \\[2ex] \dfrac{y(x_j) - y(x_{j-1})}{h} = \dfrac{y_j - y_{j-1}}{h} \end{cases}$$

3. Αντικατάσταση στη Δ.Ε.

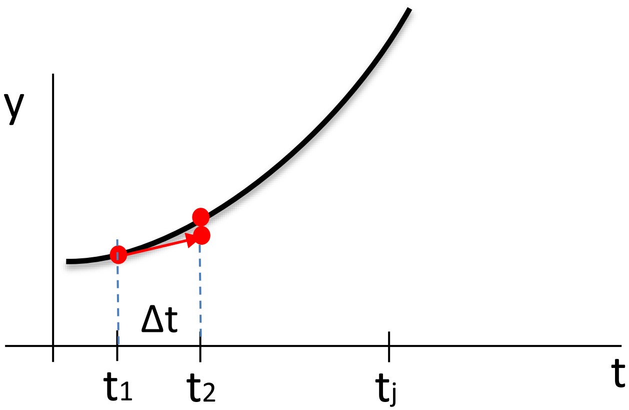
π.χ. $\dfrac{y(x_{j+1}) - y(x_j)}{h} = f(x_j, y_j)$ $\qquad$ j=0,1,2,…,n

4. Επίλυση συστήματος αλγεβρικών εξισώσεων με αναδρομική σχέση

- άμεσες (Forward Finite Difference- Άμεση Euler)
- έμμεσες (Backward Finite Difference- Έμμεση Euler)

I. Άμεση Μέθοδος Euler / Forward Finite Differences / Forward Euler

$\frac{dy}{dt} = -y$ $\quad$ $y(0) = 1$



1. Διαμέριση

$\Delta t = 0.1$

$t_j = j\Delta t$

2. Επιλογή του «προς τα εμπρός πεπερασμένες διαφορές» σχήματος

$$\left.\frac{dy}{dt}\right|_{t_j} = \frac{y(t_{j+1}) - y(t_j)}{\Delta t} = \frac{y_{j+1} - y_j}{\Delta t}$$

3. Αντικατάσταση στη Δ.Ε.

$$\frac{y_{j+1} - y_j}{\Delta t} = -y_j \quad == > y_{j+1} = y_j - \Delta t \; y_j$$

$$\boxed{y_{j+1} = (1-\Delta t)\, y_j \qquad j = 0, 1, \ldots, n \qquad (1)}$$

4. Άμεση λύση του (1) ως προς το y_{j+1}

$y_0 = 1$

$y_1 = (1-\Delta t) y_0 = 0.9 \;\; 1 = 0.9$

$y_2 = (1-\Delta t) y_1 = 0.9 \;\; 0.9 = 0.81$

.

.

.

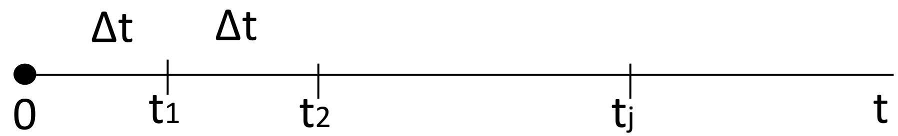
II. Έμμεση Μέθοδος Euler / Backward Finite Differences / Backward Euler

$\frac{dy}{dt} = -y^2$ $\qquad$ $y(0) = 1$

1. Διαμέριση

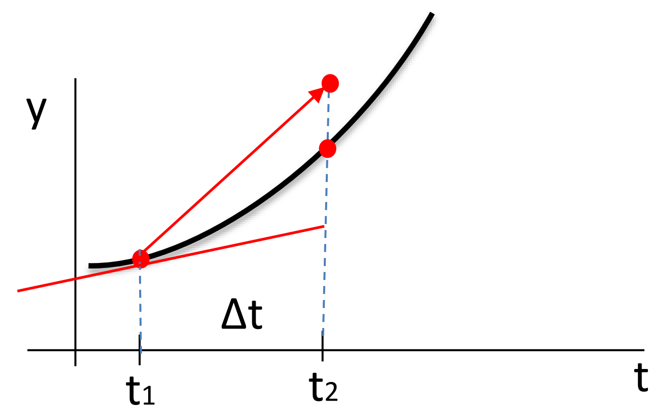
$\Delta t = 0.1$

$t_j = j\Delta t$



2. Επιλογή πεπερασμένων διαφορών

$$\left.\frac{dy}{dt}\right|_{t_j} = \frac{y_j - y_{j-1}}{\Delta t}$$



3. Αντικατάσταση

$$\frac{y_j - y_{j-1}}{\Delta t} = -y_j^{\,2} \qquad j=1,2,\ldots,n$$

4. Έμμεση επίλυση (π.χ. με Newton – Raphson, fzero) @ j=1,2,…,n

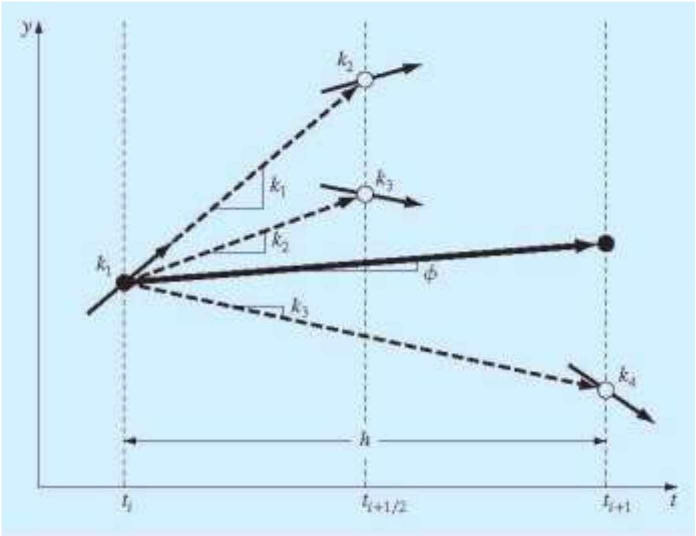
$y_j+\Delta t\, y_j^2-y_{j-1}=0$ $\quad$ [ή $y_{j+1}+\Delta t\, y_{j+1}^2-y_j=0$] (όχι πάντα-κάποιες φορές μπορεί η εξίσωση που βγαίνει να λύνεται άμεσα)

IV. Runge - Kutta

$$y_{j+1}=y_j+[a_1\kappa_1+\alpha_2\kappa_2+\ldots+\alpha_n\kappa_n]\,h$$

4^{th} order RK:

$$\boxed{\begin{aligned} & y_{j+1}=y_j+h\left[\frac{1}{6}\kappa_1+\frac{2}{6}\kappa_2+\frac{2}{6}\kappa_3+\frac{1}{6}\kappa_4\right] \\ & \kappa_1=f(x_j,y_j) \\ & \kappa_2=f\left(x_j+\frac{h}{2},y_j+\kappa_1\frac{h}{2}\right) \\ & \kappa_3=f\left(x_j+\frac{h}{2},y_j+\kappa_2\frac{h}{2}\right) \\ & \kappa_4=f(x_j+h,y_j+\kappa_3 h) \end{aligned}}$$



Steven C. Chapra, Raymond P. Canale, "Numerical Methods for Engineers (6 edition)"

Μέθοδος Runge-Kutta 4th order :

$$\frac{dy}{dx} = x+y \quad y(0) = 1$$

Βήμα 1ο j=0, h=0.1

$$k_1 = f(x_0, y_0) = x_0 + y_0 = 1$$

$$k_2 = f(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + k_1\frac{h}{2}) = x_0 + \frac{h}{2} + y_0 + k_1\frac{h}{2} = 0 + \frac{0.1}{2} + 1 + 1\frac{0.1}{2} = 1.1$$

$$k_3 = f(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + k_2\frac{h}{2}) = x_0 + \frac{h}{2} + y_0 + k_2\frac{h}{2} = 0 + \frac{0.1}{2} + 1 + 1.1\frac{0.1}{2} = 1.105$$

$$k_4 = f(x_0 + h,\ y_0 + k_3 h) = x_0 + h + y_0 + k_3 h = 0 + 0.1 + 1 + 1.105 \quad 0.1 = 1.2105$$

$$y_1 = y(0.1) = 1 + \frac{0.1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) = 1.11034$$

Βήμα 2ο j=1, y_1=1.11034

$$k_1 = f(x_1, y_1) = x_1 + y_1 = 1.21304$$

$$k_2 = f(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + k_1\frac{h}{2}) = x_1 + \frac{h}{2} + y_1 + k_1\frac{h}{2} = 0.1 + \frac{0.1}{2} + 1.1103 + 1.21304\frac{0.1}{2} = 1.3209$$

$$k_3 = f(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + k_2\frac{h}{2}) = x_1 + \frac{h}{2} + y_1 + k_2\frac{h}{2} = 0.1 + \frac{0.1}{2} + 1.1103 + 1.3209\frac{0.1}{2} = 1.3264$$

$$k_4 = f(x_1 + h,\ y_1 + k_3 h) = x_1 + h + y_1 + k_3 h = 0.1 + 0.1 + 1.1103 + 1.3264 \quad 0.1 = 1.4429$$

$$y_2 = y(0.2) = 1.1103 + \frac{0.1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) = 1.2428$$

Β. Επίλυση συστήματος Δ.Ε. 1ης τάξης

$$\frac{dy_1}{dt} = f_1(t, y_1, y_2, \ldots y_n) \qquad y_1(0) = y_{1,0}$$

$$\frac{dy_2}{dt} = f_2(t, y_1, y_2, \ldots y_n) \qquad y_2(0) = y_{2,0}$$

$$\frac{dy_3}{dt} = f_3(t, y_1, y_2, \ldots y_n) \qquad y_3(0) = y_{3,0}$$

.

.

.

$$\frac{dy_n}{dt} = f_n(t, y_1, y_2, \ldots y_n) \qquad y_n(0) = y_{n,0}$$

- **n** Δ.Ε. με **n** αρχικές συνθήκες.
- επίλυση χρησιμοποιώντας τις ίδιες μεθόδους (πεπερασμένες διαφορές) για κάθε μία εξίσωση.
- ταυτόχρονη επίλυση σε κάθε βήμα όλων των μεταβλητών $y_1, y_2, \ldots y_n$.

παράδειγμα: Lotka-Volterra equations (Predator-Pray model)

$$\frac{dx}{dt} = a\,x - b\,x\,y$$

$$\frac{dy}{dt} = -c\,y + d\,x\,y$$

x: pray
y: predator
a,c: growth/decay rates
b,d: growth/decay rates due to interaction

x(0)=2, y(0)=1
a= 1.2; b=0.6; c=0.8; d=0.3

I. Άμεση Μέθοδος Euler / Forward Finite Differences / Forward Euler

1. Διαμέριση

$\Delta t = 0.1$

$t_j = j\Delta t$

2. Επιλογή σχήματος Π.Δ.

$$\left.\frac{dx}{dt}\right|_{t_j} = \frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t}$$

$$\left.\frac{dy}{dt}\right|_{t_j} = \frac{y_{j+1} - y_j}{\Delta t}$$

3. Αντικατάσταση στις Δ.Ε.

$$\frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t} = a x_j - b x_j y_j$$

$$\frac{y_{j+1} - y_j}{\Delta t} = -c y_j + d x_j y_j$$

4. Άμεση ταυτόχρονη επίλυση του ως προς το x_{j+1} και y_{j+1}

$$x_{j+1} = x_j + \Delta t\left(ax_j - bx_j y_j\right)$$
$$y_{j+1} = y_j + \Delta t\left(-cy_j + dx_j y_j\right)$$

j=0,1,…,n

x(0)=2, y(0)=1
a= 1.2; b=0.6; c=0.8; d=0.3

Βήμα 1ο j=0, Δt=0.1

$$x_1 = x_0 + \Delta t\left(ax_0 - bx_0 y_0\right) = 2 + 0.1(1.2\times 2 - 0.6\times 2\times 1) = 2.12$$

$$y_1 = y_0 + \Delta t\left(-cy_0 + dx_0 y_0\right) = 1 + 0.1(-0.8\times 1 + 0.3\times 2\times 1) = 0.98$$

Βήμα 2ο j=1, Δt=0.1

$$x_2 = x_1 + \Delta t\left(ax_1 - bx_1 y_1\right) = 2.12 + 0.1(1.2\times 2.12 - 0.6\times 2.12\times 0.98) = 2.2497$$
$$y_2 = y_1 + \Delta t\left(-cy_1 + dx_1 y_1\right) = 0.98 + 0.1(-0.8\times 0.98 + 0.3\times 2.12\times 0.98) = 0.9639$$

Βήμα 3ο j=2, Δt=0.1

$$x_3 = x_2 + \Delta t\left(ax_2 - bx_2 y_2\right) = 2.2497 + 0.1(1.2\times 2.2497 - 0.6\times 2.2497\times 0.9639) = 2.3895$$
$$y_3 = y_2 + \Delta t\left(-cy_2 + dx_2 y_2\right) = .9639 + 0.1(-0.8\times .9639 + 0.3\times 2.2497\times .9639) = .9519$$

II Μέθοδος Runge-Kutta 4th order :

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

Βήμα 1ο j=0, Δt=0.1

$$k_{1,x} = f_1(t_0, x_0, y_0) = ax_0 - bx_0y_0 = 1.2$$

$$k_{1,y} = f_2(t_0, x_0, y_0) = -cy_0 + dx_0y_0 = -0.2$$

$$k_{2,x} = f_1(t_0 + \frac{h}{2}, x_0 + k_{1,x}\frac{h}{2}, y_0 + k_{1,y}\frac{h}{2}) = a(x_0 + 1.2\frac{0.1}{2}) - b(x_0 + 1.2\frac{0.1}{2})(y_0 - 0.2\frac{0.1}{2}) = 1.2484$$

$$k_{2,y} = f_1(t_0 + \frac{h}{2}, x_0 + k_{1,x}\frac{h}{2}, y_0 + k_{1,y}\frac{h}{2}) = -c(y_0 - 0.2\frac{0.1}{2}) + d(x_0 + 1.2\frac{0.1}{2})(y_0 - 0.2\frac{0.1}{2}) = -0.18$$

$$k_{3,x} = f_1(t_0 + \frac{h}{2}, x_0 + k_{2,x}\frac{h}{2}, y_0 + k_{2,y}\frac{h}{2}) = a(x_0 + 1.2484\frac{0.1}{2}) - b(x_0 + 1.2484\frac{0.1}{2})(y_0 - 0.18\frac{0.1}{2}) = 1.2486$$

$$k_{3,y} = f_2(t_0 + \frac{h}{2}, x_0 + k_{2,x}\frac{h}{2}, y_0 + k_{2,y}\frac{h}{2}) = -c(y_0 - 0.18\frac{0.1}{2}) + d(x_0 + 1.2484\frac{0.1}{2})(y_0 - 0.18\frac{0.1}{2}) = -0.179$$

$$k_{4,x} = f_1(t_0 + h,\ x_0 + k_{3,x}h, y_0 + k_{3,y}h) = a(x_0 + 1.2486 \times 0.1) - b(x_0 + 1.2486 \times 0.1)(y_0 - .18 \times 0.1) = 1.2978$$

$$k_{4,y} = f_2(t_0 + h,\ x_0 + k_{3,x}h, y_0 + k_{3,y}h) = -c(y_0 - .179 \times 0.1) + d(x_0 + 1.2486 \times .1)(y_0 - .18 \times .1) = -0.1596$$

$$x_1 = x_0 + \frac{0.1}{6}(k_{1,x} + 2k_{2,x} + 2k_{3,x} + k_{4,x}) = 2.124862$$

$$y_1 = y_0 + \frac{0.1}{6}(k_{1,y} + 2k_{2,y} + 2k_{3,y} + k_{4,y}) = 0.9820$$

Βήμα 2ο   j=1, Δt=0.1, x_1=2.1248, y_1=0.9820

$$k_{1,x} = f_1(t_1, x_1, y_1) = 1.29785$$

$$k_{1,y} = f_2(t_1, x_1, y_1) = -0.15962$$

$$k_{2,x} = f_1(t_1 + \frac{h}{2}, x_1 + k_{1,x}\frac{h}{2}, y_1 + k_{1,y}\frac{h}{2}) = 1.347972$$

$$k_{2,y} = f_2(t_1 + \frac{h}{2}, x1 + k_{1,x}\frac{h}{2}, y_1 + k_{1,y}\frac{h}{2}) = -0.13936$$

$$k_{3,x} = f_1(t_1 + \frac{h}{2}, x_1 + k_{2,x}\frac{h}{2}, y_1 + k_{2,y}\frac{h}{2}) = 1.348182$$

$$k_{3,y} = f_2(t_1 + \frac{h}{2}, x_1 + k_{2,x}\frac{h}{2}, y_1 + k_{2,y}\frac{h}{2}) = -0.13877$$

$$k_{4,x} = f_1(t_1 + h,\ x_1 + k_{3,x}h, y_0 + k_{3,y}h) = 1.399011$$

$$k_{4,y} = f_2(t_1 + h,\ x_1 + k_{3,x}h, y_1 + k_{3,y}h) = -0.11821$$

$$x_2 = x_1 + \frac{0.1}{6}(k_{1,x} + 2k_{2,x} + 2k_{3,x} + k_{4,x}) = 2.259682$$

$$y_2 = y_1 + \frac{0.1}{6}(k_{1,y} + 2k_{2,y} + 2k_{3,y} + k_{4,y}) = 0.968111$$