Υπολογιστικά Μαθηματικά

Τμήμα Πληροφορικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων

ΧΕ 2011–2012, Διάρκεια παραδόσεων: Από 17–10–2011 έως 27–1–2012

- 3 ώρες Θεωρία (Τρίτη 9–11, Πέμπτη: 11–12)
- 1 ώρα Ασκήσεις (Πέμπτη: 10–11)
- Εξετάσεις: Με κλειστά βιβλία
- Βιβλίο
- Θα υπάρξουν 2 ή 3 εργαστηριακές ασκήσεις
- Εργαστηριακές ασκήσεις: 1 επί πλέον βαθμός
- Τρεις ενδιάμεσες, απαλλακτικές εξετάσεις (Σάββατο).
  - ⋆ Ύλη πρώτης ΕΕ: Το πρόβλημα αρχικών τιμών και η μέθοδος του Euler.
  - ⋆ Ύλη δεύτερης ΕΕ: Μέθοδοι των Runge–Kutta.
  - ⋆ Ύλη τρίτης ΕΕ: Πολυβηματικές μέθοδοι.

Το περιεχόμενο του μαθήματος εν συντομία

Διαφορική εξίσωση (*Δ.Ε.*) καλείται μια εξίσωση, η οποία περιέχει παραγώγους της άγνωστης συνάρτησης της εξίσωσης.

Οι Δ.Ε. έχουν πολλές εφαρμογές, π.χ. εμφανίζονται πολύ συχνά σε μαθηματικά μοντέλα που περιγράφουν προβλήματα των φυσικών, των τεχνολογικών, των βιοϊατρικών, αλλά και των οικονομικών επιστημών. Κατά κανόνα οι εξισώσεις αυτές δεν είναι δυνατόν να επιλυθούν με αναλυτικές μεθόδους· συνεπώς, η επίλυσή τους με προσεγγιστικές μεθόδους στον υπολογιστή αποτελεί ένα σημαντικό κεφάλαιο της Αριθμητικής Ανάλυσης.

Οι λύσεις των Δ.Ε. δεν ορίζονται γενικά κατά μοναδικό τρόπο, π.χ. η εξίσωση $y'(t) = 0$ έχει ως λύσεις τις $y(t) = c$ με $c \in \mathbb{R}$ τυχαία σταθερά. Για να ορισθεί η λύση μιας Δ.Ε. κατά μοναδικό τρόπο απαιτούνται πρόσθετες συνθήκες, π.χ. αρχικές ή συνοριακές συνθήκες.

Θα ασχοληθούμε με προβλήματα αρχικών τιμών. Θα πούμε λίγα λόγια για τη θεωρία τους, και το μεγαλύτερο μέρος του μαθήματος θα αφιερωθεί σε αριθμητικές μεθόδους για αυτά τα προβλήματα.

1. Προβλήματα αρχικών τιμών

Δεδομένα: $f : [a, b] \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ συνεχής συνάρτηση, με $a, b \in \mathbb{R}, a < b$.
$y_0 \in \mathbb{R}$.

Ζητούμενο: $y : [a, b] \to \mathbb{R}$ συνεχώς παραγωγίσιμη συνάρτηση, τ.ω.

$$\begin{cases} y'(t) = f\big(t, y(t)\big), \quad a \le t \le b, \\ y(a) = y_0. \end{cases}$$

Θέματα: 1. Ύπαρξη λύσης;
2. Μοναδικότητα λύσης;
3. Ευστάθεια; (Συνεχής εξάρτηση της λύσης από τα αρχικά δεδομένα;)
4. Γενίκευση για συστήματα.

2. Η μέθοδος του Euler

Η μέθοδος του Euler είναι η απλούστερη αριθμητική μέθοδος για την επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών. Υποθέτουμε ότι το πρόβλημα αρχικών τιμών έχει ακριβώς μία λύση y.

Έστω $N \in \mathbb{N}$. Θεωρούμε έναν ομοιόμορφο διαμερισμό του διαστήματος $[a, b]$ με βήμα $h := (b - a)/N$. Οι κόμβοι του διαμερισμού είναι $t^n := a + nh, n = 0, \dots, N$.

Η μέθοδος του Euler δίνει προσεγγίσεις y^n των τιμών $y(t^n)$ της ακριβούς λύσης y στους κόμβους t^n, οι οποίες ορίζονται αναδρομικά ως εξής

$$\begin{cases} y^{n+1} = y^n + hf(t^n, y^n), \quad n = 0, \dots, N - 1, \\ y^0 = y_0. \end{cases}$$

Θέματα: 1. Πώς οδηγούμαστε στη μέθοδο του Euler;
2. Κόστος της μεθόδου ανά βήμα;
3. Ποιότητα των προσεγγίσεων;
4. Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της μεθόδου;
5. Πότε χρησιμοποιείται αυτή η μέθοδος και πότε καταφεύγουμε σε άλλες μεθόδους;

3. Μέθοδοι των Runge–Kutta

Έστω $q \in \mathbb{N}$. Θεωρούμε έναν πίνακα $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{q,q}$ και δύο διανύσματα $\tau, b \in \mathbb{R}^q$. Συνήθως επιλέγουμε τις συνιστώσες $\tau_1, \dots, \tau_q$ να ανήκουν στο διάστημα $[0,1]$. Γράφουμε αυτά τα δεδομένα σε μορφή μητρώου

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

Θέτουμε $y^0 = y_0$ και ορίζουμε προσεγγίσεις y^m των τιμών $y(t^m)$ της ακριβούς λύσης y στους κόμβους t^m αναδρομικά ως εξής: Ξεκινάμε από την προσέγγιση y^n και, χρησιμοποιώντας τον πίνακα A και το διάνυσμα τ, ορίζουμε πρώτα προσεγγίσεις $y^{n,i}$, $i = 1, \dots, q$, των ενδιάμεσων τιμών $y(t^{n,i}) = y(t^n + \tau_i h)$ τ.ω.

$$y^{n,i} = y^n + h \sum_{j=1}^{q} a_{ij} f(t^{n,j}, y^{n,j}), \quad i = 1, \dots, q.$$

Στη συνέχεια, χρησιμοποιούμε τις προσεγγίσεις $y^{n,1}, \dots, y^{n,q}$ και το διάνυσμα b και ορίζουμε την προσέγγιση y^{n+1} ως

$$y^{n+1} = y^n + h \sum_{i=1}^{q} b_i f(t^{n,i}, y^{n,i}).$$

Θέματα: 1. Ποιες παράμετροι a_{ij}, τ_i, b_i δίνουν ‘καλές’ μεθόδους RK;

2. Κόστος της μεθόδου ανά βήμα;
3. Ποιότητα των προσεγγίσεων;
4. Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της μεθόδου;
5. Πότε χρησιμοποιούνται μέθοδοι αυτής της κλάσης;

4. Πολυβηματικές μέθοδοι

Στις αριθμητικές μεθόδους που είδαμε μέχρι τώρα, για να οδηγηθούμε στην προσέγγιση y^{n+1} χρησιμοποιούσαμε μόνο την προσέγγιση y^n, δηλαδή την προσέγγιση στο αμέσως προηγούμενο χρονικό επίπεδο.

Στις πολυβηματικές μεθόδους χρησιμοποιούμε προσεγγίσεις και σε άλλα προγενέστερα χρονικά επίπεδα.

Έστω $k \in \mathbb{N}$. Θεωρούμε σταθερές $\alpha_0, \dots, \alpha_k, \beta_0, \dots, \beta_k \in \mathbb{R}$. Υποθέτουμε τώρα ότι μας δίνονται προσεγγίσεις $y^0, \dots, y^{k-1}$ (οι οποίες κατά κανόνα υπολογίζονται με κάποια μονοβηματική μέθοδο) και ορίζουμε προσεγγίσεις y^m των τιμών $y(t^m)$ της ακριβούς λύσης y στους κόμβους t^m αναδρομικά ως εξής:

$$\alpha_k y^{n+k} + \alpha_{k-1} y^{n+k-1} + \cdots + \alpha_0 y^n = h\big[\beta_k f(t^{n+k}, y^{n+k}) + \cdots + \beta_0 f(t^n, y^n)\big],$$

$n = 0, \dots, N-k$.

Θέματα: 1. Ποιες παράμετροι α_i, β_i δίνουν ‘καλές’ πολυβηματικές μεθόδους;

2. Κόστος της μεθόδου ανά βήμα;

3. Ποιότητα των προσεγγίσεων;

4. Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της μεθόδου;

5. Πότε χρησιμοποιούνται μέθοδοι αυτής της κλάσης;