ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Αριθμητική Λύση Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων

Οι διαφορικές εξισώσεις παίζουν, από την εποχή του Newton, σημαντικό ρόλο στην περιγραφή της φύσης. Αλλά η διατύπωση μιας διαφορικής εξίσωσης από τη μια και η λύση της από την άλλη είναι δύο τελείως διαφορετικές ασκήσεις. Για πολλά χρόνια δεν είχαμε στη διάθεσή μας παρά μόνο αναλυτικά εργαλεία, γεγονός που περιόριζε σημαντικά το ερευνητικό πεδίο. Η ανακάλυψη των αριθμητικών μεθόδων απελευθέρωσε τη φυσική, τη χημεία, τη βιολογία κλπ., από τον περιορισμό της ανάπτυξης απλοποιημένων μοντέλων (προτύπων) στην προσπάθειά τους να περιγράψουν την πολυπλοκότητα των φυσικών φαινομένων. Σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι η περιγραφή των ευρέως χρησιμοποιουμένων σήμερα μεθόδων για τη λύση συνήθων διαφορικών εξισώσεων που συναντάμε σε εφαρμογές της φυσικής (ή της χημείας ή της βιολογίας, όπου βρίσκουμε τις ίδιες εξισώσεις σ' ένα τελείως διαφορετικό πλαίσιο).

Θα παρουσιάσουμε τις μεθόδους αυτές σ' ένα πλαίσιο γενικό. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε την εξαρτημένη μεταβλητή x και t είναι η ανεξάρτητη μεταβλητή. Ψάχνουμε να βρούμε λύση της εξίσωσης:

$$\frac{dx}{dt} = F(x(t), t) \tag{4.1}$$

με 'αρχικές' συνθήκες $x(0) = x_0$. Αν οι εξισώσεις είναι βαθμού ανώτερου του πρώτου (όπως είναι οι εξισώσεις της κίνησης στη Μηχανική), οδηγούμαστε σε *σύστημα* εξισώσεων, οπότε χρειαζόμαστε τη γραμμική άλγεβρα, κυρίως αν είμαστε σε χώρο με διαστάσεις μεγαλύτερες του 1. Για μία διάσταση δεν έχουμε ανάγκη τέτοιων εργαλείων και απλά γράφουμε

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= \frac{1}{m} f\left(x(t), t\right)\end{aligned} \tag{4.2}$$

με αρχικές συνθήκες $x(0) = x_0$ και $v(0) = v_0$.

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

$$\frac{dx}{dt} \rightarrow \frac{\Delta x}{\Delta t} \equiv \frac{x(t+h) - x(t)}{h} \tag{4.3}$$

4.1 ΟΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΤΟΥ EULER ΚΑΙ ΤΟΥ ΕΝΔΙΑΜΕΣΟΥ ΣΗΜΕΙΟΥ

Η παραπάνω διαδικασία οδηγεί αβίαστα στη *μέθοδο του Euler* που για μεν την Εξ.(**;;**) γράφεται:

$$x(t+h) = x(t) + hF(x(t), t) \tag{4.4}$$

ενώ για τις Εξ.(**;;**) έχει τη μορφή:

$$\begin{aligned}x(t+h) &= x(t) + hv(t) \\ v(t+h) &= v(t) + hf(x(t), t)\end{aligned} \tag{4.5}$$

Παρατηρούμε αμέσως ότι αυτές οι εξισώσεις δεν αντιστοιχούν σε τίποτα άλλο παρά στον πρώτο όρο αναπτύγματος, ως προς το χρόνο, γύρω από το $t = 0$. Δηλαδή η ακρίβεια της μεθόδου είναι $\mathcal{O}(h^2)$. Μπορούμε λοιπόν να ρωτήσουμε πώς είναι δυνατόν να αυξήσουμε την ακρίβεια, ώστε το σφάλμα να είναι $\mathcal{O}(h^3)$ τουλάχιστον.

Αυτό επιτυγχάνεται ως ακολούθως:

$$\begin{aligned}x(t+h) &= x(t) + hv(t) + (h^2/2)f(x(t), t) + (h^3/6)f'(x(t), t) + ... \\ x(t-h) &= x(t) - hv(t) + (h^2/2)f(x(t), t) - (h^3/6)f'(x(t), t) + ...\end{aligned} \tag{4.6}$$

Πολύ εύκολα βλέπουμε ότι

$$x(t+h) = x(t-h) + 2hv(t) + \mathcal{O}(h^3) \tag{4.7}$$

δηλαδή στο $t = 0$ κάνουμε ένα βήμα πίσω για να υπολογίσουμε το $x(-h)$, χρησιμοποιώντας μια από τις άλλες μεθόδους, για παράδειγμα την καθιερωμένη μέθοδο του Euler, και έπειτα υπολογίζουμε τα $x(h)$, $x(3h)$, ... με τη νέα μέθοδο που ονομάζεται *μέθοδος του ενδιάμεσου σημείου*.

Παράδειγμα: Για την εξίσωση $x' = -x$ με αρχική συνθήκη $x(0) = 1$ και βήμα $h = 0.01$, στον Πίνακα **;;** μπορούμε να συγκρίνουμε τη μέθοδο του Euler και τη μέθοδο του ενδιάμεσου σημείου. Στην περίπτωσή μας $dx/dt = f(x(t), t) = -x(t)$, οπότε η μέθοδος του Euler δίνει:

$$x(t+h) = x(t) + hf(x(t), t) = x(t) + h(-x(t)) = x(t) - hx(t) = x(t)(1-h)$$

t	Euler	Ενδ.σημ.	Ακριβές αποτ.
1.00000×10^{-2}	0.990000	0.990000	0.990050
2.00000×10^{-2}	0.980100	0.980200	0.980199
3.00000×10^{-2}	0.970299	0.970396	0.970446
4.00000×10^{-2}	0.960596	0.960792	0.960789
5.00000×10^{-2}	0.950990	0.951180	0.951229
6.00000×10^{-2}	0.941480	0.941768	0.941765
7.00000×10^{-2}	0.932065	0.932345	0.932394
8.00000×10^{-2}	0.922745	0.923122	0.923116
9.00000×10^{-2}	0.913517	0.913882	0.913931
1.00000×10^{-1}	0.904382	0.904844	0.904837

Πίνακας 4.1: Σύγκριση της μεθόδου του Euler με αυτή του ενδιαμέσου σημείου

Στην περίπτωση της μεθόδου του ενδιάμεσου σημείου, βάζοντας βήμα h αντί $2h$, η Εξ.(;;) γράφεται για την περίπτωσή μας:

$$\begin{aligned} x(t+h) &= x(t) + hf\left(x(t+h/2), t+h/2\right) \\ &= x(t) + hf\left(x(t) + (h/2)f(x(t),t), t+h/2\right) \\ &= x(t) + hf\left(x(t) + (h/2)(-x(t)), t+h/2\right) \\ &= x(t) + h\left(-x(t) + (h/2)x(t)\right) = x(t)\left(1 - h + h^2/2\right) \end{aligned}$$

όπου στη δεύτερη ισότητα αντικαταστήσαμε το όρισμα $x(t+h/2)$ της f με το ανάπτυγμά του, δηλαδή χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του Euler: $x(t+h/2) = x(t) + (h/2)f(x(t),t)$, ενώ στην τρίτη και τέταρτη ισότητα χρησιμοποιήσαμε ότι $f(x) = -x$ στο συγκεκριμένο παράδειγμά μας.

Υπάρχει όμως και ένας άλλος, περισσότερο διαισθητικός, τρόπος εφαρμογής της μεθόδου του ενδιάμεσου σημείου. Θεωρώντας πάλι το διάστημα $[t, t+h]$, όπως κάναμε στο παραπάνω παράδειγμα, αντί του $[t-h, t+h]$, οι παρακάτω σχέσεις είναι ουσιαστικά ισοδύναμες με την Εξ.(;;):

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x(t), t) \\ k_2 &= hf(x(t) + \frac{k_1}{2},\ t + \frac{h}{2}) \\ x(t+h) &= x(t) + k_2 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Η ιδέα είναι πως η μέθοδος του Euler θεωρεί ότι το βασικό σημείο στο διάστημα $[t, t+h]$ είναι το t: $f(x(t), t)$. Η μέθοδος του ενδιαμέσου σημείου θεωρεί ότι το βασικό σημείο του διαστήματος είναι το ενδιάμεσο: $f(x(t+h/2), t+h/2)$.

4.2 Η Μέθοδος Runge-Kutta

Είναι δυνατό να προχωρήσουμε ακόμα περισσότερο και να φτάσουμε σε σφάλμα της τάξης του $\mathcal{O}(h^5)$. Αυτή είναι η *μέθοδος Runge-Kutta τετάρτης τάξης*, η οποία παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(x(t), t) \\
k_2 &= hf(x(t) + k_1/2, t + h/2) \\
k_3 &= hf(x(t) + k_2/2, t + h/2) \\
k_4 &= hf(x(t) + k_3, t + h) \\
x(t+h) &= x(t) + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\right) + \mathcal{O}(h^5)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Σε προβλήματα μηχανικής, όπου η διαφορική εξίσωση είναι δεύτερου βαθμού, ορίζουμε την ταχύτητα $dx/dt = v$, και η διαφορική εξίσωση γίνεται $dv/dt = f(x(t), t)/m$. Σ' αυτήν την περίπτωση εφαρμόζουμε τις Εξ.(**;;**) δύο φορές, μια για την ταχύτητα και μια για την επιτάχυνση.

Παράδειγμα: Αρμονικός ταλαντωτής. Θα ασχοληθούμε με συντομία με ένα κλασικό παράδειγμα: ένα οριζόντιο ελατήριο με μιά μάζα m στο ένα άκρο του. Η εξίσωση της κίνησης είναι:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \tag{4.10}$$

όπου x η απομάκρυνση από το σημείο ισορροπίας. Θέτουμε τις αρχικές συνθήκες $x(0)$ και $v(0) \equiv \frac{dx}{dt}|_{t=0}$ και μετατρέπουμε τη δεύτερου βαθμού εξίσωση σε σύστημα δύο εξισώσεων πρώτου βαθμού:

$$\begin{aligned}
v &= \frac{dx}{dt} \\
-\frac{k}{m}x &= \frac{dv}{dt}
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Η πρακτική ερώτηση που παρουσιάζεται τώρα είναι πώς μπορούμε να ελέγξουμε τις μεθόδους του Euler, του ενδιάμεσου σημείου ή Runge-Kutta σε συγκεκριμένα παραδείγματα. Μια πολύ ισχυρή μέθοδος είναι αυτή των νόμων διατήρησης. Με άλλα λόγια, στη μηχανική, όταν δεν έχουμε τριβές, η ολική ενέργεια διατηρείται. Μπορούμε λοιπόν να θέσουμε την ερώτηση κατά πόσον αυτές οι προσεγγιστικές μέθοδοι ικανοποιούν αυτήν τη διατήρηση. Ας το δούμε σε ένα παράδειγμα.

Παράδειγμα: Έστω η μάζα m, η οποία βρίσκεται στην άκρη ενός ελατηρίου σταθεράς k. Η εξισώσεις της κίνησης, όπως είπαμε και παραπάνω, είναι:

$$\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= v \\
\frac{dv}{dt} &= -\frac{k}{m}x
\end{aligned} \tag{4.12}$$

οι οποίες και διατηρούν την ολική ενέργεια $E = mv^2/2 + kx^2/2$. Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του Euler, οι εξισώσεις γράφονται:

$$\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + v_n h \\
v_{n+1} &= v_n + \left(-(k/m)x_n\right)h
\end{aligned} \tag{4.13}$$

και η ολική ενέργεια γράφεται αμέσως:

$$E_{n+1} = mv_{n+1}^2/2 + kx_{n+1}^2/2 = (1+\delta)E_n$$

όπου $\delta = h^2 k/m$. Μπορούμε εύκολα να γράψουμε την E_{n+1} συναρτήσει της E_0:

$$E_{n+1} = (1+\delta)^n E_0 = \left(1 + n\delta + \mathcal{O}(n^2\delta^2)\right) E_0$$

Βλέπουμε λοιπόν ότι η μέθοδος του Euler δεν διατηρεί την ενέργεια, αλλά η διαφορά για κάθε βήμα μπορεί να θεωρηθεί «μικρή» αφού είναι της ίδιας τάξης με το σφάλμα της μεθόδου, $\mathcal{O}(h^2)$. Όμως, το σφάλμα είναι προσθετικό, και μετά από n βήματα γίνεται $n\delta$, δηλαδή πρώτης τάξης στο δ. Αν το $n\delta$ γίνει συγκρίσιμο με τη μονάδα, η προσεγγιστική μέθοδός μας δεν έχει πια έννοια. Συμπέρασμα: το σφάλμα, όντας προσθετικό, θέτει όριο στον αριθμό των βημάτων που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε στη μέθοδο του Euler:

$$n_{max} = 1/\delta = \frac{m}{h^2 k}$$

Βλέπουμε ότι ο μέγιστος αριθμός των βημάτων είναι ανάλογος της μάζας και αντιστρόφως ανάλογος της σταθεράς του ελατηρίου και του βήματος. Παρατηρούμε επίσης ότι η ποσότητα $n_{max}h$ έχει διαστάσεις χρόνου και επειδή η περίοδος είναι ανάλογη με το $\sqrt{m/k}$, μας ενδιαφέρει το $n_{max}h$ να είναι τουλάχιστον όσο η περίοδος. Οι συνθήκες αυτές θέτουν κάθε άλλο παρά τετριμμένους περιορισμούς στην εκλογή του h, με δεδομένες τις σταθερές του προβλήματος m και k.

Συμπέρασμα

Παραπάνω παρουσιάσαμε τα κυριότερα και άμεσης χρήσης σημεία της αριθμητικής επίλυσης συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Ένα πολύ σοβαρό πρακτικό πρόβλημα είναι η εκλογή του βέλτιστου βήματος h και της μεταβολής του: πιο συγκεκριμένα, στις περισσότερες εφαρμογές πρέπει να μεταβάλλουμε το βήμα το οποίο θα πρέπει να είναι μικρό όταν, για παράδειγμα, οι δυνάμεις μεταβάλλονται γρήγορα με το χρόνο και μεγαλύτερο όταν η μεταβολή τους είναι αργή. Μπορούμε επίσης να «συντονίσουμε» την εκλογή του βήματος με την ταχύτητα. Παρόλα αυτά, με τις τεχνικές που παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο αυτό μπορούμε να λύσουμε όλα τα προβλήματα κλασικής μηχανικής με ένα βαθμό ελευθερίας και αυτό δεν είναι λίγο.