

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΔΥΤΙΚΗΣ ΜΑΚΕΔΟΝΙΑΣ  
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ  
Μ.Π.Σ. ΠΡΟΗΓΜΕΝΕΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ  
ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ

**Two Derivative Runge-Kutta μέθοδοι. Εφαρμογή στο  
πρόβλημα Rigid Body.**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

της

ΔΗΜΗΤΡΙΑΔΟΥ ΔΗΜΗΤΡΑΣ

(ΑΕΜ: 65 )

**Επιβλέπων: Καλογηράτου Ζαχαρούλα**  
Καθηγήτρια

Καστοριά, Απρίλιος 2021





ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΔΥΤΙΚΗΣ ΜΑΚΕΔΟΝΙΑΣ  
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ  
Μ.Π.Σ. ΠΡΟΗΓΜΕΝΕΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ  
ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ

**Two Derivative Runge-Kutta μέθοδοι. Εφαρμογή στο  
πρόβλημα Rigid Body.**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

της  
ΔΗΜΗΤΡΙΑΔΟΥ ΔΗΜΗΤΡΑΣ  
(ΑΕΜ: 65 )

**Επιβλέπων: Καλογηράτου Ζαχαρούλα**  
Καθηγήτρια

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 21η Απριλίου 2021.

.....                      .....                      .....  
Ζ. Καλογηράτου    Θ. Μονοβασίλης    Γ. Βασιλειάδης

Copyright © 2021 - Δημητριάδου Δήμητρα

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.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν αποκλειστικά τον συγγραφέα και δεν αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Πανεπιστημίου Δυτικής Μακεδονίας.

## **Ευχαριστίες**

Θα ήθελα να ευχαριστήσω την καθηγήτρια μου κ. Καλογηράτου Ζαχαρούλα για τη στήριξη της και την εμπιστοσύνη που μου έδειξε αλλά και τους ανθρώπους που στάθηκαν δίπλα μου όλο αυτό το διάστημα.



## Περίληψη

Η παρούσα εργασία εκπονήθηκε στα πλαίσια των μεταπτυχιακών σπουδών μου στο Π.Μ.Σ. Προηγμένες τεχνολογίες πληροφορικής. Το θέμα της εργασίας είναι οι μέθοδοι Runge-Kutta με χρήση δεύτερης παραγώγου.

Στο πρώτο κεφάλαιο της εργασίας αναφέρονται βασικές πληροφορίες για τις διαφορικές εξισώσεις αλλά και για τις αριθμητικές μεθόδους που χρησιμοποιούμε για την επίλυση τους.

Στο δεύτερο κεφάλαιο αναφέρονται οι αριθμητικές μέθοδοι Runge-Kutta και οι συνθήκες τάξης των μεθόδων. Οι συνθήκες τάξης υπολογίστηκαν με το ανάπτυγμα Taylor, η διαδικασία αυτή αναφέρεται μόνο για τη δεύτερη τάξη των μεθόδων, αλλά και με την θεωρία των δέντρων. Αναφέρεται επίσης η μέθοδος του Euler που είναι μία από τις παλαιότερες αριθμητικές μεθόδους και είναι μία ειδική περίπτωση μεθόδου Runge-Kutta ενός σταδίου αλλά και η μέθοδος Heun.

Το τρίτο κεφάλαιο αναφέρεται στις μεθόδους Two Derivative Runge-Kutta και στις συνθήκες των μεθόδων αυτών, οι οποίες υπολογίστηκαν χρησιμοποιώντας τη θεωρία των δέντρων. Στο τέταρτο κεφάλαιο της εργασίας γίνεται μία αναφορά στην κατασκευή των μεθόδων Two Derivative Runge-Kutta και δίνονται συγκεκριμένες μέθοδοι Two Derivative Runge-Kutta για κάθε τάξη.

Τέλος, στο πέμπτο κεφάλαιο της εργασίας γίνεται μία αναφορά στο πρόβλημα rigid body το οποίο χρησιμοποιήθηκε και δίνονται τα αριθμητικά αποτελέσματα των προγραμμάτων Two Derivative Runge-Kutta μεθόδων που υλοποιήθηκαν με χρήση MATLAB .

**Λέξεις κλειδιά:** Μέθοδοι Runge-Kutta , Two Derivative Runge-Kutta μέθοδοι, Αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων, Rigid Body.





# Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Εισαγωγή</b>	<b>11</b>
1.1	Εισαγωγή στις διαφορικές εξισώσεις . . . . .	11
1.2	Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης διαφορικών εξισώσεων . . . . .	12
<b>2</b>	<b>Αριθμητικές μέθοδοι Runge-Kutta</b>	<b>19</b>
2.1	Εισαγωγή στις αριθμητικές μεθόδους Runge-Kutta . . . . .	19
2.1.1	Η μέθοδος Euler . . . . .	22
2.1.2	Η μέθοδος Heun . . . . .	23
2.2	Μέθοδος δύο σταδίων Runge Kutta . . . . .	24
2.3	Δέντρα στις μεθόδους Runge Kutta . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Two-Derivative Runge-Kutta μέθοδοι</b>	<b>43</b>
3.1	Εισαγωγή στις μεθόδους Two-Derivative Runge-Kutta . . . . .	43
3.2	Δέντρα στις μεθόδους Two-Derivative Runge-Kutta . . . . .	45
3.3	Άμεση μέθοδος TDRK . . . . .	78
<b>4</b>	<b>Κατασκευή TDRK μεθόδων</b>	<b>87</b>
4.1	Μέθοδοι ενός σταδίου . . . . .	87
4.2	Μέθοδοι δύο σταδίων . . . . .	88
4.3	Μέθοδοι τριών σταδίων . . . . .	89
4.4	Μέθοδοι τεσσάρων σταδίων . . . . .	92
4.5	Μέθοδοι πέντε σταδίων . . . . .	94
<b>5</b>	<b>Εφαρμογή στο πρόβλημα του Rigid Body</b>	<b>97</b>
5.1	Rigid Body . . . . .	97
5.2	Jacobi Elliptic functions . . . . .	98
5.3	Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	100
	<b>Παράρτημα</b>	<b>112</b>



# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή

### 1.1 Εισαγωγή στις διαφορικές εξισώσεις

Διαφορική εξίσωση ονομάζεται μία εξίσωση η οποία εκφράζεται ως συνάρτηση άγνωστων μεταβλητών και των παραγώγων αυτών. Πολλά σημαντικά προβλήματα που παρουσιάζονται σε αρκετούς επιστημονικούς κλάδους μπορούν να περιγραφούν και να επιλυθούν με τη χρήση διαφορικών εξισώσεων. Μερικά τέτοια προβλήματα είναι προβλήματα φυσικής, μηχανικής, χημείας, βιολογίας κ.α. Οι διαφορικές εξισώσεις είναι ίσως το δημοφιλέστερο μέσο μοντελοποίησης προβλημάτων. Στα περισσότερα προβλήματα η εξίσωση που προκύπτει είναι μη γραμμική.

Μία διαφορική εξίσωση της οποίας η άγνωστη συνάρτηση εξαρτάται μόνο από μία ανεξάρτητη μεταβλητή καλείται συνήθως διαφορική εξίσωση. Η μορφή μίας συνήθους διαφορικής εξίσωσης είναι η εξής:

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

όπου  $x$  είναι η ανεξάρτητη μεταβλητή,  $y(x)$  είναι η άγνωστη συνάρτηση και  $g$  είναι η γνωστή συνάρτηση.

Η κανονική μορφή μιας διαφορικής εξίσωσης δίνεται από τον τύπο:

$$y^{(n)}(x) = f(x, y(x), y'(x), y''(x), \dots, y^{(n-1)}(x)), \quad x \in [x_{min}, x_{max}] \quad (1.2)$$

**Ορισμός 1.1.** Τάξη μιας διαφορικής εξίσωσης ονομάζεται η μεγαλύτερη τάξη παραγωγισ της άγνωστης συνάρτησης.

**Ορισμός 1.2.** Βαθμός μιας διαφορικής εξίσωσης είναι η δύναμη στην οποία εμφανίζεται η παράγωγος της μεγαλύτερης τάξης.

Για παράδειγμα  $y'' + 4y = 3x$  είναι μία διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης και πρώτου βαθμού. Ενώ η εξίσωση  $y^{(5)} - 2y^{(3)} + y = 3x + 10$  είναι πέμπτης τάξης με βαθμό 1. Η διαφορική εξίσωση  $3(y''')^5 - y'' - 2y' + 8y = 4x^2 - 3x$  είναι τρίτης τάξης και έχει βαθμό 5.

Λύση μίας διαφορικής εξίσωσης της μορφής (1.2) θεωρείται κάθε συνάρτηση η οποία είναι της μορφής  $y = g(x)$  που είναι  $n$  φορές παραγωγίσιμη και ικανοποιεί την διαφορική εξίσωση για κάθε  $x \in [x_{min}, x_{max}]$

Η λύση της διαφορικής εξίσωσης δεν είναι μοναδική τις περισσότερες φορές και αυτό γιατί για την ευρεσή της πραγματοποιείται η ολοκλήρωση των μελών της διαφορικής εξίσωσης. Λόγω της ολοκλήρωσης μία αυθαίρετη σταθερά  $c$  εισέρχεται στη λύση.

Επομένως, η γενική λύση της διαφορικής εξίσωσης θα έχει τη μορφή:

$$y = g(x) + c \text{ όπου } c = \sigma\tau\alpha\theta$$

Εφόσον υπάρχουν αρχικές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται τότε η λύση που προκύπτει μπορεί να είναι και μοναδική.

Στις συνήθεις διαφορικές εξισώσεις δύο είναι οι σημαντικές κατηγορίες προβλημάτων:

- Η πρώτη κατηγορία είναι τα προβλήματα αρχικών τιμών, στα οποία το ζητούμενο είναι η άγνωστη συνάρτηση που ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση. Στα προβλήματα αρχικών τιμών είναι γνωστή η τιμή της άγνωστης συνάρτησης και των παραγώγων της στην αρχή του διαστήματος ολοκλήρωσης.
- Η δεύτερη κατηγορία είναι τα προβλήματα συνοριακών τιμών, το ζητούμενο είναι η άγνωστη συνάρτηση που ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση. Στα προβλήματα συνοριακών τιμών είναι γνωστή η τιμή της άγνωστης συνάρτησης και των παραγώγων της στην αρχή και στο τέλος (άκρα) του διαστήματος ολοκλήρωσης.

## 1.2 Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης διαφορικών εξισώσεων

Η αναλυτική επίλυση πολλών διαφορικών εξισώσεων είναι μια δύσκολη και περίπλοκη διαδικασία και ο προσδιορισμός των αναλυτικών λύσεων σε ορισμένες περιπτώσεις είναι αδύνατος. Με την κατασκευή αριθμητικών μεθόδων για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων μπορούμε να παρακάμψουμε αυτή τη δυσκολία.

Η παραγωγή και η ανάπτυξη αριθμητικών μεθόδων επίλυσης διαφορικών εξισώσεων πολλές φορές είναι μία πολύπλοκη διαδικασία. Με τη χρήση όμως των

η/υ μπορούμε να κατασκευάσουμε αριθμητικές μεθόδους με μεγάλη ακρίβεια. Μία αριθμητική μέθοδος δίνει σαν αποτέλεσμα μια προσεγγιστική λύση της πραγματικής λύσης του προβλήματος.

Η τάξη ακρίβειας μιας αριθμητικής μεθόδου εκφράζει το πόσο κοντά στις πραγματικές τιμές της λύσης είναι οι προσεγγιστικές τιμές που δίνει η αριθμητική μέθοδος.

Μία αριθμητική μέθοδος, η οποία κατασκευάστηκε για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων, θεωρείται αποτελεσματική όταν μπορεί να αντιμετωπίσει όσο το δυνατόν περισσότερα προβλήματα με μεγάλη τάξη ακρίβειας επιτυχώς, με το ελάχιστο κόστος και σε μικρό χρονικό διάστημα.

Έστω ότι έχουμε μία διαφορική εξίσωση της μορφής (1.2). Για  $n = 1$  η διαφορική εξίσωση παίρνει τη μορφή:

$$y'(x) = f(x, y), \quad x \in [x_{min}, x_{max}] \quad (1.3)$$

Η διαφορική εξίσωση (1.3) καλείται διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης.

Στα προβλήματα αρχικών τιμών δίνεται η αρχική τιμή του  $y$  στο κάτω όριο του διαστήματος ολοκλήρωσης και εκφράζεται από την εξίσωση:

$$y'(x) = f(x, y) \text{ με } x \in [x_{min}, x_{max}], \quad y(x_{min}) = y_{min} \quad (1.4)$$

Αν  $y$  και  $f$  είναι διανύσματα συναρτήσεων με διάσταση  $k$  τότε προκύπτει ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης που δίνεται από την παρακάτω μορφή:

$$\begin{aligned} y'_1(x) &= f_1(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_k(x)) \\ y'_2(x) &= f_2(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_k(x)) \\ y'_3(x) &= f_3(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_k(x)) \\ &\vdots \\ y'_k(x) &= f_k(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_k(x)) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Το παραπάνω σύστημα εξισώσεων θα μπορούσε να γραφεί και σε μορφή πινάκων με δύο πίνακες  $Y$  και  $F$  σύμφωνα με την παρακάτω μορφή:

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_k \end{pmatrix}$$

και

$$F = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_k \end{pmatrix}$$

Σύμφωνα με τους παραπάνω πίνακες το σύστημα (1.5) μπορεί να πάρει τη μορφή:

$$Y' = F(x, Y) \text{ με } x \in [x_{min}, x_{max}] \quad (1.6)$$

Κάθε διαφορική εξίσωση με τάξη  $n$  θα μπορούσε να γραφεί ως σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης. Έστω ότι έχουμε την διανυσματική συνάρτηση:

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_k \end{pmatrix}$$

για την οποία ισχύει:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= y \\ \Phi_2 &= y' \\ \Phi_3 &= y'' \\ &\vdots \\ \Phi_n &= y^{(n-1)} \end{aligned}$$

Τότε η εξίσωση (1.3) γράφεται:

$$\begin{aligned}
\Phi'_1 &= \Phi_2 \\
\Phi'_2 &= \Phi_3 \\
\Phi'_3 &= \Phi_4 \\
&\vdots \\
\Phi'_n &= y^{(n)} = f(x, \Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_n)
\end{aligned}$$

Επομένως, προκύπτει ο πίνακας:

$$F = \begin{pmatrix} \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \vdots \\ \Phi_n \\ f \end{pmatrix}$$

Σύμφωνα με όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, το σύστημα διαφορικών εξισώσεων στην διανυσματική του μορφή θα είναι:

$$\Phi' = F(x, \Phi) \text{ με } x \in [x_{min}, x_{max}]$$

Η διαδικασία που ακολουθείται για τη δημιουργία αριθμητικών μεθόδων είναι η εξής:

Όταν δίνεται ένα πρόβλημα αρχικών τιμών το διάστημα ολοκλήρωσης θα είναι ένα διάστημα της μορφής  $[x_{min}, x_{max}]$ . Αυτό το διάστημα συνήθως χωρίζεται σε  $N$  ισαπέχοντα σημεία. Επομένως, το διάστημα που δόθηκε παραπάνω, θα χωριστεί στα σημεία:

$$x_{min} = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = x_{max}$$

Δηλαδή, όταν τα σημεία ισαπέχουν, τότε ορίζεται η ακολουθία σημείων από τον τύπο:

$$x_i = x_{min} + i \cdot h \text{ με } i = 1, 2, \dots, N - 1$$

όπου  $h$  είναι το βήμα της μεθόδου και δίνεται από το λόγο της διαφοράς της ελάχιστης τιμής από την μέγιστη προς το πλήθος των σημείων διαμέρισης.

$$h = \frac{x_{max} - x_{min}}{N}$$

Οπότε, το βήμα  $h$  ορίζει την απόσταση δύο διαδοχικών σημείων,  $h = x_{i+1} - x_i$  όπου  $i = 1, 2, \dots, N$ . Το βήμα της μεθόδου μπορεί να είναι είτε σταθερό είτε μεταβλητό.

Σε προβλήματα αρχικών τιμών γνωρίζουμε την τιμή της άγνωστης συνάρτησης στο κάτω άκρο του διαστήματος ολοκλήρωσης,  $y(x_{min}) = y(x_0)$ . Βρίσκουμε μια εκτίμηση της τιμής της συνάρτησης στο επόμενο σημείο  $x_1$ , την  $y_1$ . Στη συνέχεια βρίσκουμε μια εκτίμηση της τιμής της συνάρτησης στο σημείο  $x_2$ , την  $y_2$  κ.ο.κ.

Επομένως, χρησιμοποιώντας μία αριθμητική μέθοδο για το πρόβλημα αρχικών τιμών βρίσκουμε μία ακολουθία τιμών  $y_1, y_2, \dots, y_N$ . Οι τιμές αυτές προσεγγίζουν κατά πολύ τις πραγματικές τιμές  $y(x_1), y(x_2), \dots, y(x_N)$  των διακεκριμένων σημείων  $x_1, x_2, \dots, x_N$ . Για συντομία με  $f_k$  θα συμβολίζεται η εκτίμηση της τιμής  $f(x, y(x))$  στο σημείο  $x_k$ .

Μία μέθοδος που χρησιμοποιεί μόνο την εκτίμηση  $y_n$  της τιμής της συνάρτησης στο σημείο  $x_n$  για να υπολογίσει την εκτίμηση  $y_{n+1}$  της τιμής στο σημείο  $x_{n+1}$  ονομάζεται αριθμητική μέθοδος απλού βήματος (one step methods). Σε αυτή την κατηγορία ανήκουν οι μέθοδοι Euler, Taylor, Runge-Kutta κ.α.

Ενώ, μία μέθοδος που για να υπολογίσει την εκτίμηση  $y_{n+1}$  της τιμής στο σημείο  $x_{n+1}$  χρησιμοποιεί τιμές για περισσότερα προηγούμενα σημεία καλείται αριθμητική μέθοδος πολλαπλού βήματος ή πολυβηματική μέθοδος (multistep methods). Σε αυτή την κατηγορία ανήκουν οι μέθοδοι Adams-Bashforth, Adams-Moulton, Newton-Cotes κ.α.

Θεωρούμε την διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης (1.3). Αν η εξίσωση αυτή σε ένα διάστημα  $[x_n, x_{n+1}] \subseteq [x_{min}, x_{max}]$  ολοκληρωθεί κατά μέλη θα προκύψει:

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

Αφού υπολογιστεί το ορισμένο ολοκλήρωμα προκύπτει κατά προσέγγιση μια μέθοδος αριθμητικής ολοκλήρωσης με τύπο:



$$y_{n+1} = y_n + h \cdot (k_0 f_{n+1} + k_1 f_n + k_2 f_{n-1} + \dots) \quad (1.7)$$

Σημειώνεται ότι αν  $k_0 = 0$ , η συνάρτηση  $f$  ορίζεται στο σημείο  $x_n$  και σε προηγούμενα από αυτό σημεία. Η μέθοδος που παράγεται ονομάζεται ανοιχτός τύπος. Ενώ, αν  $k_0 \neq 0$ , η συνάρτηση  $f$  ορίζεται στο σημείο  $x_{n+1}$  και σε προηγούμενα από αυτό σημεία. Η μέθοδος που παράγεται ονομάζεται κλειστός τύπος.

Αν  $k_1 = 1$  και  $k_i = 0$  όπου  $i \neq 1$  τότε η μέθοδος που παράγεται ονομάζεται απλού βήματος. Σε διαφορετική περίπτωση η μέθοδος που παράγεται ονομάζεται πολυβηματική.



## Κεφάλαιο 2

# Αριθμητικές μέθοδοι Runge-Kutta

### 2.1 Εισαγωγή στις αριθμητικές μεθόδους Runge-Kutta

Οι αριθμητικές μέθοδοι Runge - Kutta είναι μέθοδοι απλού βήματος. Θεωρούνται από τις πιο πρακτικές και δημοφιλείς μεθόδους όταν έχουμε να επιλύσουμε προβλήματα συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Οι μέθοδοι αυτού του τύπου μπορούν να χρησιμοποιηθούν όταν γνωρίζουμε μόνο τις αρχικές τιμές του προβλήματος.

Η κατασκευή των μεθόδων Runge - Kutta συνήθως είναι μία δύσκολη διαδικασία, καθώς απαιτείται η εύρεση αλλά και η επίλυση κατάλληλων συνθηκών οι οποίες πρέπει να ικανοποιούνται. Οι συνθήκες αυτές ονομάζονται συνθήκες τάξης. Μία τέτοια διαδικασία τις περισσότερες φορές είναι δύσκολη επειδή όσο αυξάνεται η τάξη της μεθόδου αυξάνονται και οι μη γραμμικές συνθήκες που πρέπει να επιλυθούν.

Η γενική μορφή των μεθόδων Runge - Kutta είναι :

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i g_i \quad (2.1)$$

όπου

$$g_1 = f(x_n, y_n)$$

και

$$g_i = f(x_n + c_i h, y_n + \sum_{j=1}^{s-1} a_{ij} g_j) \text{ για } i = 2, \dots, s$$

με  $s$  αναφέρεται το πλήθος των σταδίων της μεθόδου (stages) , δηλαδή περιέχονται  $s$  υπολογισμοί της συνάρτησης  $f(x, y)$  σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης.

Με όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, μία μέθοδος Runge - Kutta μπορεί να γραφεί σε μορφή:

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(x_n + c_j h, Y_j), \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (2.2)$$

και

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(x_n + c_i h, Y_i) \quad (2.3)$$

Οι συντελεστές  $b_i, c_i, a_{i,j}$  προσδιορίζονται με τέτοιο τρόπο ώστε για το πλήθος των σταδίων που έχει η μέθοδος, αυτή να πάρει όσο το δυνατόν μεγαλύτερη τάξη ακρίβειας.

Οι εξισώσεις μπορούν να γραφούν και σε μορφή πινάκων ως εξής:

$$Y = e \otimes y_n + h(A \otimes I_N)F(Y)$$

$$y_{n+1} = y_n + h(b^T \otimes I_N)F(Y)$$

όπου  $e$  είναι μοναδιαίο διάνυσμα που έχει  $s$  στοιχεία. Οι πίνακες  $Y, F(Y)$  είναι της μορφής:

$$Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_s \end{pmatrix}, \quad F(Y) = \begin{pmatrix} f(Y_1) \\ \vdots \\ f(Y_s) \end{pmatrix}$$

Κάθε μέθοδος Runge - Kutta μπορεί να γραφεί και με τη μορφή πίνακα. Ο πίνακας που σχηματίζεται για κάθε μέθοδο ονομάζεται πίνακας Butcher και πήρε το όνομά του από τον μαθηματικό John C. Butcher όπου ασχολήθηκε με τις μεθόδους Runge - Kutta από το 1960 και έπειτα.

Ο πίνακας Butcher μίας μεθόδου  $s$  σταδίων παίρνει την μορφή:

$c_1$	$a_{11}$	$a_{12}$	$\cdots$	$a_{1s-1}$	$a_{1s}$
$c_2$	$a_{21}$	$a_{22}$	$\cdots$	$a_{2s-1}$	$a_{2s}$
$c_3$	$a_{31}$	$a_{32}$	$\cdots$	$a_{3s-1}$	$a_{3s}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$c_s$	$a_{s1}$	$a_{s2}$	$\cdots$	$a_{s,s-1}$	$a_{ss}$
	$b_1$	$b_2$	$\cdots$	$b_{s-1}$	$b_s$

Ένας άλλος τρόπος για να γραφεί ο πίνακας Butcher μιας αριθμητικής μεθόδου  $s$  σταδίων είναι:

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

όπου  $C, b \in \mathbb{R}^s$  και  $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$ . Δηλαδή, τα  $C, b$  είναι διανύσματα διάστασης  $s$  και  $A$  είναι πίνακας διαστάσεων  $s \times s$ .

Στις μεθόδους Runge - Kutta ισχύει η παραδοχή:

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, s$$

Η παραπάνω συνθήκη σε μορφή πινάκων είναι:

$$C = A \cdot e, \quad e = [1, 1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^s$$

Η συνάρτηση ευστάθειας της μεθόδου δίνεται από τη σχέση:

$$R(z) = 1 + zb^T(I - zA)^{-1}e \quad (2.4)$$

Σύμφωνα με τον πίνακα Butcher που αναγράφεται παραπάνω, προκύπτει ότι σε όλα τα στάδια  $g_i$  της μεθόδου εμπλέκονται και όλα τα υπόλοιπα στάδια της. Σε αυτή την περίπτωση είναι δύσκολο να προσδιορίσουμε τα  $g_i$ . Μία τέτοια μέθοδος λέμε ότι έχει πεπλεγμένη μορφή (implicit methods).

Θεωρούμε ότι ο πίνακας  $A$  της μεθόδου είναι αυστηρά κάτω τριγωνικός πίνακας και  $c_1 = 0$ , τότε η μέθοδος ανήκει στην κατηγορία των άμεσων μεθόδων (explicit methods). Με αυτή την παραδοχή διακρίνουμε πως το πρώτο στάδιο  $g_1$  της μεθόδου υπολογίζεται εύκολα. Το δεύτερο στάδιο  $g_2$  για να βρεθεί αρκεί να γνωρίζουμε το πρώτο στάδιο  $g_1$ . Το τρίτο στάδιο  $g_3$  για να βρεθεί χρειάζεται να γνωρίζουμε τα  $g_1, g_2$  κ.ο.κ.

Όταν έχουμε μία άμεση μέθοδο Runge - Kutta ο πίνακας Butcher θα έχει την μορφή:

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

Στις άμεσες μεθόδους Runge - Kutta ισχύει η παραδοχή :

$$\begin{aligned} c_2 &= a_{21} \\ c_3 &= a_{31} + a_{32} \\ &\vdots \\ c_s &= a_{s1} + a_{s2} + \dots + a_{s,s-1} \end{aligned}$$

Η γενική μορφή μίας άμεσης μεθόδου είναι :

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1g_1 + b_2g_2 + \dots + b_s g_s)$$

όπου

$$\begin{aligned} g_1 &= f(x_n, y_n) \\ g_2 &= f(x_n + c_2h, y_n + ha_{21}g_1) \\ g_3 &= f(x_n + c_3h, y_n + h(a_{31}g_1 + a_{32}g_2)) \\ &\vdots \\ g_s &= f(x_n + c_s h, y_n + h(a_{s1}g_1 + \dots + a_{s,s-1}g_{s-1})) \end{aligned}$$

### 2.1.1 Η μέθοδος Euler

Η μέθοδος Euler είναι μία αριθμητική μέθοδος απλού βήματος για την επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών.

Έστω έχουμε ένα πρόβλημα αρχικών τιμών  $y' = f(x, y)$  με  $x \in [x_0, x_n]$  και γνωρίζουμε την τιμή της άγνωστης συνάρτησης στο  $x_0$ , δηλαδή  $y(x_0) = y_0$ . Θέλουμε να προσεγγίσουμε τη λύση του προβλήματος αυτού.

Θεωρούμε μία διαμέριση του διαστήματος ολοκλήρωσης  $[x_0, x_n]$  σε  $n$  ισαπέχοντα σημεία.

$$x_i = x_0 + i \cdot h, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

$$\text{όπου } h = \frac{x_n - x_0}{n}.$$

Μας ενδιαφέρει να υπολογίσουμε τις προσεγγιστικές τιμές της λύσης σε κάθε ένα από τα παραπάνω σημεία. Έστω οι λύσεις σε αυτά τα σημεία είναι  $y_0$  η προσέγγιση για την  $y(x_0)$ ,  $y_1$  η προσέγγιση για την  $y(x_1)$  κ.ο.κ.

Οι προσεγγίσεις αυτές που δίνει η μέθοδος του Euler προσδιορίζονται από τον τύπο:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y(x_i))$$

Κάθε αριθμητική μέθοδος δίνει προσεγγιστικές λύσεις και γι'αυτό πολλές φορές μπορεί να έχει κάποιο σφάλμα από την πραγματική λύση. Στη μέθοδο Euler το σφάλμα είναι:

$$e_i = y(x_i) - y_i$$

### 2.1.2 Η μέθοδος Heun

Η μέθοδος Heun είναι μία αριθμητική μέθοδος που επιλύει προβλήματα αρχικών τιμών.

Έστω έχουμε ένα πρόβλημα αρχικών τιμών  $y' = f(x, y)$  με  $x \in [x_0, x_n]$ . Γνωρίζουμε μία αρχική εκτίμηση της τιμής της άγνωστης συνάρτησης στο σημείο  $x_0$  και αυτή είναι  $y(x_0) = y_0$ . Θέλουμε να προσεγγίσουμε τη λύση του προβλήματος αυτού.

Θεωρούμε μία διαμέριση του διαστήματος ολοκλήρωσης  $[x_0, x_n]$  σε  $n$  σημεία που ισαπέχουν μεταξύ τους. Τότε τα ενδιάμεσα σημεία δίνονται από τον τύπο:

$$x_i = x_0 + i \cdot h, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

όπου  $h = \frac{x_n - x_0}{n}$ .

Όπως και στη μέθοδο Euler έτσι και στην μέθοδο Heun μας ενδιαφέρει να υπολογίσουμε τις προσεγγιστικές τιμές της λύσης σε κάθε ένα από τα παραπάνω σημεία. Έστω οι λύσεις σε αυτά τα σημεία είναι  $y_0$  η προσέγγιση για την  $y(x_0)$ ,  $y_1$  η προσέγγιση για την  $y(x_1)$  κ.ο.κ.

Οι προσεγγίσεις αυτές που δίνει η μέθοδος του Heun προσδιορίζονται από τον τύπο:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]$$

όπου

$$y_{i+1} = y_n + h f(x_i, y_i)$$

Επομένως, από τις παραπάνω σχέσεις προκύπτει:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_n + hf(x_i, y_i))]$$

Παρατηρούμε λοιπόν πως η μέθοδος Heun χρησιμοποιεί τη μέθοδο Euler για την εύρεση της προσεγγιστικής λύσης που αναζητάμε. Σύμφωνα με τα παραπάνω, η μέθοδος Heun απαιτεί δύο υπολογισμούς της συνάρτησης  $f(x, y)$  σε κάθε βήμα. Γι'αυτό η μέθοδος αυτή ονομάζεται και δύο σταδίων. Μπορεί να γραφεί και στην μορφή:

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

## 2.2 Μέθοδος δύο σταδίων Runge Kutta

Έστω μία μέθοδος Runge - Kutta δύο σταδίων. Η μέθοδος αυτή γράφεται:

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1g_1 + b_2g_2)$$

όπου

$$\begin{aligned} g_1 &= f(x_n, y_n) \\ g_2 &= f(x_n + c_2h, y_n + ha_{21}g_1) \end{aligned}$$

Ο πίνακας Butcher της μεθόδου είναι:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ c_2 & a_{21} & \\ \hline & b_1 & b_2 \end{array}$$

Σε αυτό το σημείο θα προσδιορίσουμε τους συντελεστές της μεθόδου Runge Kutta με δύο στάδια, δηλαδή τις τιμές των  $c_2, a_{21}, b_1, b_2$ .

Παίρνουμε το ανάπτυγμα Taylor για την  $y(x)$  στο  $x_n$  :



$$y(x) = y(x_n) + \frac{(x - x_n)}{1!}y'(x_n) + \frac{(x - x_n)^2}{2!}y''(x_n) + \frac{(x - x_n)^3}{3!}y'''(x_n) + \dots \quad (2.5)$$

Αν στο ανάπτυγμα Taylor αντικαταστήσουμε όπου  $x$  το  $x_n + h$  τότε θα προκύψει:

$$y(x_n + h) = y(x_n) + \frac{h}{1!}y'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_n) + \dots \quad (2.6)$$

Όμως, από τη γενική μορφή της διαφορικής εξίσωσης πρώτης τάξης  $y'(x) = f(x, y(x))$  μπορούμε στην (2.6) να αντικαταστήσουμε το  $y'(x)$  με  $f(x_n, y_n)$ , όπου θα αναφέρεται ως  $f$ .

Ενώ, για την δεύτερη παράγωγο:

$$y''(x) = \frac{\partial}{\partial x}f(x, y(x)) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x} = f_x + f_y \cdot f$$

Για την τρίτη παράγωγο:

$$y'''(x) = (y''(x))' = \frac{\partial}{\partial x}(f_x + f_y f) = \frac{\partial f_x}{\partial x} + \frac{\partial f_y}{\partial x} \cdot f + f_y \cdot \frac{\partial f}{\partial x}$$

Μετά από πράξεις καταλήγουμε σε:

$$y'''(x) = f_{xx} + f_{xy}f + f_{yx}f + f_{yy}f^2 + f_y f_x + f_y^2 f$$

Οπότε, η (2.6) γράφεται:

$$\begin{aligned} y(x_n + h) &= y(x_n) + h \cdot f + \frac{h^2}{2} \cdot (f_x + f_y f) + \\ &+ \frac{h^3}{6} \cdot (f_{xx} + f_{xy}f + f_{yx}f + f_{yy}f^2 + f_y f_x + f_y^2 f) + \dots \end{aligned} \quad (2.7)$$

Τα  $f_x, f_x f_y, f_{xx}, \dots$  ονομάζονται στοιχειώδη διαφορικά.

Στη μέθοδο δύο σταδίων εφαρμόζουμε το ανάπτυγμα Taylor για συναρτήσεις δύο μεταβλητών (βλ. παράρτημα 1) στη  $g_2$ .

$$\begin{aligned} g_1 &= f(x_n, y_n) = f \\ g_2 &= f(x_n + c_2 h, y_n + h a_{21} g_1) \\ &= f + h(c_2 f_x + a_{21} g_1 f_y) + \frac{h^2}{2}(c_2^2 f_{xx} + 2c_2 a_{21} g_1 f_{xy} + a_{21}^2 g_1^2 f_{yy}) + O(h^3) \end{aligned}$$

Επομένως, αν αντικαταστήσουμε τα  $g_1, g_2$  στον τύπο προκύπτει:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h[b_1 f + b_2(f + h(c_2 f_x + a_{21} f f_y)) + \\ &\quad + \frac{h^2}{2}(c_2^2 f_{xx} + 2c_2 a_{21} f f_{xy} + a_{21}^2 f^2 f_{yy}) + O(h^3)] \end{aligned} \quad (2.8)$$

Από τη σύγκριση των (2.7) και (2.8) προκύπτουν τα εξής:

$$\begin{aligned} f : \quad h &= h b_1 + h b_2 \\ b_1 + b_2 &= 1 \\ f_x : \quad h^2 b_2 c_2 &= \frac{h^2}{2} \\ b_2 c_2 &= \frac{1}{2} \\ f_y f : \quad h^2 b_2 a_{21} &= \frac{h^2}{2} \\ b_2 a_{21} &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι τα δύο αναπτύγματα συμφωνούν μέχρι και τους όρους έως  $h^2$ .

Γενικά, μία μέθοδος Runge - Kutta θεωρούμε ότι είναι  $\rho$  τάξεως ως προς την ακρίβεια όταν το ανάπτυγμα Taylor της συνάρτησης  $y(x)$  συμφωνεί με το ανάπτυγμα Taylor της μεθόδου στο  $x$  στους όρους έως  $h^\rho$ . Οι συνθήκες που προέκυψαν

και δίνονται παραπάνω είναι οι συνθήκες δεύτερης τάξης.

Λόγω της παραδοχής  $c_2 = a_{21}$  μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η τρίτη συνθήκη με τη δεύτερη συμπίπτουν. Επομένως, για μία μέθοδο δεύτερης τάξης θα πρέπει να ισχύουν οι δύο συνθήκες:

$$\begin{aligned}b_1 + b_2 &= 1 \\b_2 c_2 &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Θα λύσουμε τη δεύτερη εξίσωση ως προς  $b_2$ :

$$\begin{aligned}b_2 c_2 &= \frac{1}{2} \\b_2 &= \frac{1}{2c_2}\end{aligned}$$

Στη συνέχεια, θα αντικαταστήσουμε το  $b_2$  στην πρώτη εξίσωση και θα πάρουμε αποτέλεσμα:

$$\begin{aligned}b_1 + b_2 &= 1 \\b_1 &= 1 - b_2 \\b_1 &= 1 - \frac{1}{2c_2}\end{aligned}$$

Τελικά, ο πίνακας Butcher της μεθόδου παίρνει τη μορφή:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ c_2 & c_2 \\ \hline & 1 - \frac{1}{2c_2} \quad \frac{1}{2c_2} \end{array}$$

Από όσα αναφέρθηκαν παραπάνω προκύπτει πως αν γνωρίζουμε το  $c_2$  και γνωρίζοντας τις συνθήκες αυτές μπορούμε να βρούμε αριθμητικές μεθόδους δεύτερης

τάξης.

Για παράδειγμα, αν  $c_2 = \frac{1}{2}$  τότε:

$$a_{21} = c_2 = \frac{1}{2}$$

$$b_1 = 1 - \frac{1}{2 \cdot \frac{1}{2}} = 1 - 1 = 0$$

$$b_2 = \frac{1}{2 \cdot \frac{1}{2}} = \frac{1}{1} = 1$$

Ο πίνακας Butcher της μεθόδου θα είναι:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 0 \quad 1 \end{array}$$

Η μέθοδος που προκύπτει από τον πίνακα αυτό είναι:

$$g_1 = f(x_n, y_n)$$

$$g_2 = f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hg_1\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + h(g_1 + g_2)$$

Το ερώτημα που θα μπορούσε να προκύψει είναι αν θα μπορούσε να κατασκευαστεί μέθοδος τρίτης τάξης με δύο στάδια. Οπότε, από τα αναπτύγματα που ήδη έχουμε θα εξισώσουμε τους όρους που έχουν  $h^3$ .

Θα παρατηρήσουμε όμως πως δεν υπάρχουν όλοι οι όροι και στα δύο αναπτύγματα καθώς λείπουν στην (2.8) οι στοιχειώδεις διαφορές  $f_x f_y, f_y^2 f$ . Επομένως, δεν μπορεί να κατασκευαστεί μέθοδος τρίτης τάξης με δύο στάδια.

Με ανάλογο τρόπο χρησιμοποιώντας τα αναπτύγματα Taylor θα μπορούσαμε να βρούμε τις συνθήκες και για μεθόδους μεγαλύτερης τάξης, καθώς και τις αριθμητικές μεθόδους. Την διαδικασία για τις μεθόδους τρίτης τάξης μπορείτε να τη βρείτε στην πτυχιακή μου εργασία με τίτλο: Αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων με μεθόδους Runge-Kutta και Runge-Kutta Nystrom.

## 2.3 Δέντρα στις μεθόδους Runge Kutta

Στις μεθόδους Runge Kutta οι συνθήκες τάξης μπορούν να γραφούν και με τη χρήση πινάκων. Σε γενική μορφή ο πίνακας Butcher μίας μεθόδου Runge Kutta είναι:

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

Με βάση τον πίνακα Butcher μπορούμε να γράψουμε τη γενική μορφή των πινάκων  $A, b, C$ .

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & c_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & c_s \end{pmatrix}$$

και

$$b = (b_1, b_2, b_3, \cdots, b_s), \quad e = (1, 1, 1, \cdots, 1)$$

όπου  $e$  είναι διάνυσμα διάστασης  $s$ , δηλαδή είναι το διάνυσμα που δηλώνει το πλήθος των σταδίων που έχει η μέθοδος.

Έστω μία μέθοδος Runge Kutta με δύο στάδια, τότε ο πίνακας Butcher της μεθόδου είναι:

$$\begin{array}{c|cc} c_1 & & \\ c_2 & a_{21} & \\ \hline & b_1 & b_2 \end{array}$$

Με βάση τον πίνακα Butcher μπορούμε να βγάλουμε τους εξής πίνακες:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}, \quad b = (b_1, b_2), \quad C = \begin{pmatrix} c_1 & 0 \\ 0 & c_2 \end{pmatrix}, \quad e = (1, 1)$$

Το διάνυσμα  $e$  έχει δύο στοιχεία γιατί η μέθοδος έχει δύο στάδια. Με όμοιο τρόπο μπορούν να γραφούν οι πίνακες και για μεθόδους μεγαλύτερης τάξης.

Οι συνθήκες δεύτερης τάξης με τη βοήθεια των πινάκων θα πάρουν τη μορφή:

$$b \cdot e = 1$$

$$b \cdot C \cdot e = \frac{1}{2}$$

Με τη χρήση των δέντρων γίνεται πιο εύκολη η εύρεση των συνθηκών τάξης για μία μέθοδο. Ουσιαστικά, είναι ένας τρόπος κατασκευής μεθόδων Runge Kutta. Οι συνθήκες τάξης βρίσκονται ανάλογα με τα στάδια που θα έχει η μέθοδος που θα κατασκευαστεί.

**Ορισμός 2.1.** Ένα γράφημα  $t$  λέγεται δέντρο με ρίζα (rooted tree) αν και μόνο αν υπάρχει μία κορυφή του, η οποία αποκαλείται ρίζα και έχει τις εξής ιδιότητες:

1. Οι κορυφές χωρίζονται σε επίπεδα  $0, 1, 2, \dots, H$  όπου  $H$  είναι το ύψος του δέντρου.
2. Στο μηδενικό επίπεδο υπάρχει μόνο η ρίζα (root) του δέντρου.
3. Σε κάθε επίπεδο εκτός του μηδενικού βρίσκονται τα παιδιά των κορυφών του προηγούμενου επιπέδου.
4. Κάθε κορυφή (vertex) εκτός από τη ρίζα έχει γονέα.

Σημειώνεται πως η ρίζα δεν έχει κανένα γονέα ενώ από τον γονέα προς κάθε παιδί ορίζονται τα κλαδιά που ενώνουν τις κορυφές.

**Ορισμός 2.2.** Υποδέντρα ονομάζονται τα δέντρα που προκύπτουν αν αφαιρέσουμε την ρίζα μαζί με τα κλαδιά που ξεκινούν από αυτή.

Κάθε δέντρο αντιστοιχεί σε μία μοναδική συνθήκη τάξης. Η αντιστοίχιση της συνθήκης προκύπτει μετά από την ανάλυση του δέντρου, αν δηλαδή αποκόψουμε τη ρίζα με τα κλαδιά της από το υπόλοιπο δέντρο.

Το κάθε δέντρο συμβολίζεται με  $t_{ij}$ , όπου  $i$  δηλώνει την τάξη του δέντρου και το  $j$  προκύπτει από την αρίθμηση των δέντρων που υπάρχουν σε κάθε τάξη. Η τάξη του δέντρου όπου συμβολίζεται με  $r(t)$  καθορίζεται από τον αριθμό των κορυφών που έχει το κάθε δέντρο.

Ένα ακόμα στοιχείο που είναι χρήσιμο για την κατασκευή των συνθηκών είναι η πυκνότητα του δέντρου, η οποία δίνεται από τη συνάρτηση  $\gamma(t)$ . Η συνάρτηση πυκνότητας ενός δέντρου ισούται με την πυκνότητα των δέντρων που προκύπτουν όταν αποκοπεί η ρίζα του επί την τάξη του δέντρου. Η πυκνότητα του δέντρου πρώτης τάξης είναι ίση με ένα.

Η ρίζα του δέντρου αντιστοιχεί στο διάνυσμα  $b$ , η τελευταία κορυφή αντιστοιχεί στο διάνυσμα  $C$  και οι ενδιάμεσες κορυφές στον πίνακα  $A$ .

Σε κάθε δέντρο  $t$  αντιστοιχεί ένα πολυώνυμο ως προς τους συντελεστές της μεθόδου:

$$\Phi(t) = \sum_i b_i \Phi_i(t)$$

όπου  $\Phi_i(t) = \sum_{j,k,l,\dots} a_{ij} a_{jk} a_{kl} \dots$ .

Η συνθήκη για κάθε δέντρο δίνεται από τον τύπο:  $\Phi(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$ .

Παρακάτω δίνονται αναλυτικά τα δέντρα με την αντίστοιχη συνθήκη τάξης:

1. Για την πρώτη τάξη προκύπτει μόνο ένα δέντρο που αποτελείται μόνο από μία κορυφή, την ρίζα. Το δέντρο αυτό θα συμβολίζεται  $(t_{11})$ .

•

Το δέντρο πρώτης τάξης έχει πυκνότητα:  $\gamma(t_{11}) = 1$ .

Έτσι, η συνθήκη που αντιστοιχεί στην πρώτη τάξη είναι:

$$b \cdot e = 1$$

2. Για την δεύτερη τάξη προκύπτει επίσης μόνο ένα δέντρο  $(t_{21})$ , το οποίο έχει δύο κορυφές, τη ρίζα και το παιδί.



Σε αυτή την περίπτωση το δέντρο που προκύπτει έχει πυκνότητα ίση με  $\gamma(t_{21}) = r(t_{21})\gamma(t_{21}) = 2 \cdot 1 = 2$ .

Η συνθήκη που αντιστοιχεί στο δέντρο της δεύτερης τάξης είναι:

$$b \cdot C \cdot e = \frac{1}{2}$$

3. Για την τρίτη τάξη προκύπτουν δύο δέντρα που έχουν τρεις κορυφές. Διακρίνονται στις εξής περιπτώσεις:

Στην πρώτη περίπτωση περιέχεται το δέντρο που έχει τη ρίζα και εκείνη έχει δύο παιδιά και συμβολίζεται  $(t_{31})$ .



Το δέντρο  $(t_{31})$  έχει πυκνότητα ίση με  $\gamma(t_{31}) = r(t_{31})\gamma(t_{11})\gamma(t_{11}) = 3 \cdot 1 \cdot 1 = 3$ .

Η συνθήκη που αντιστοιχεί στο δέντρο είναι:

$$b \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{3}$$

Στη δεύτερη περίπτωση περιέχεται το δέντρο  $(t_{32})$  που αποτελείται από τη ρίζα η οποία έχει ένα παιδί και αυτό έχει ένα ακόμα.



Το δέντρο  $(t_{32})$  έχει πυκνότητα που ισούται με  $\gamma(t_{32}) = r(t_{32})\gamma(t_{21}) = 3 \cdot 2 = 6$ .

Η συνθήκη που αντιστοιχεί σε αυτό το δέντρο είναι:

$$b \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{6}$$



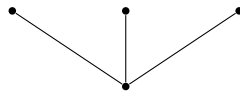
Από την απλοποιητική παραδοχή  $C = A \cdot e$  προκύπτει ότι

$$b \cdot A \cdot C \cdot e = b \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{3}$$

Επομένως, μετά την εφαρμογή της απλοποιητικής παραδοχής οι δύο συνθήκες συμπίπτουν και τελικά μένει μόνο η συνθήκη που αντιστοιχεί στο δέντρο  $(t_{31})$ .

4. Για την τέταρτη τάξη προκύπτουν τέσσερα δέντρα. Διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

Το πρώτο δέντρο  $(t_{41})$  είναι εκείνο που έχει τη ρίζα η οποία έχει τρία παιδιά.

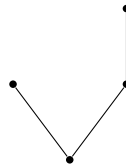


Το δέντρο  $(t_{41})$  έχει πυκνότητα που ίση με  $\gamma(t_{41}) = r(t_{41})\gamma(t_{11})\gamma(t_{11})\gamma(t_{11}) = 4 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 = 4$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot C^3 \cdot e = \frac{1}{4}$$

Το δεύτερο δέντρο  $(t_{42})$  είναι εκείνο που έχει τη ρίζα η οποία έχει δύο παιδιά και από αυτά το ένα έχει ένα δικό του παιδί.

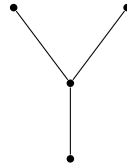


Το δέντρο  $(t_{42})$  έχει πυκνότητα που ισούται με  $\gamma(t_{42}) = r(t_{42})\gamma(t_{11})\gamma(t_{21}) = 4 \cdot 1 \cdot 2 = 8$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot C \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{8}$$

Το τρίτο δέντρο ( $t_{43}$ ) είναι εκείνο που αποτελείται από τη ρίζα η οποία έχει ένα παιδί και αυτό το παιδί έχει δύο δικά του παιδιά.



Το δέντρο ( $t_{43}$ ) έχει πυκνότητα που ισούται με  $\gamma(t_{43}) = r(t_{43})\gamma(t_{31}) = 4 \cdot 3 = 12$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot A \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{12}$$

Τέλος, το τέταρτο δέντρο ( $t_{44}$ ), είναι το δέντρο που η ρίζα έχει ένα παιδί, αυτό έχει ένα δικό του παιδί και αυτό έχει ακόμη ένα παιδί.



Το δέντρο ( $t_{44}$ ) έχει πυκνότητα που ισούται με  $\gamma(t_{44}) = r(t_{44})\gamma(t_{32}) = 4 \cdot 6 = 24$ .

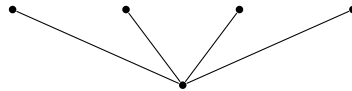
Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot A \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{24}$$

Από την απλοποιητική παραδοχή  $C = A \cdot e$  η συνθήκη του πρώτου δέντρου θα πάρει τη μορφή  $b \cdot C^3 \cdot e = b \cdot C \cdot A \cdot C \cdot e$ . Προκύπτει ότι η συνθήκη αυτή ισούται με τη συνθήκη του δεύτερου δέντρου. Αντίστοιχα, για τη συνθήκη του τρίτου δέντρου  $b \cdot A \cdot C^2 \cdot e = b \cdot A \cdot A \cdot C \cdot e$ . Προκύπτει ότι η συνθήκη ισούται με τη συνθήκη του τέταρτου δέντρου. Μετά τις απλοποιήσεις τα δέντρα που μένουν για την τέταρτη τάξη είναι τα ( $t_{41}$ ) και ( $t_{43}$ ).

5. Για την πέμπτη τάξη προκύπτουν 9 δέντρα που διακρίνονται στις εξής περιπτώσεις:

Στην πρώτη περίπτωση περιέχεται το δέντρο  $(t_{51})$  που έχει τη ρίζα και εκείνη έχει τέσσερα παιδιά.

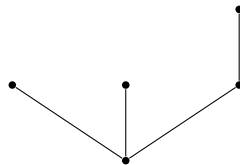


Το δέντρο  $(t_{51})$  έχει πυκνότητα  $\gamma(t_{51}) = r(t_{51})\gamma(t_{11})\gamma(t_{11})\gamma(t_{11})\gamma(t_{11}) = 5 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 = 5$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot C^4 \cdot e = \frac{1}{5}$$

Το δεύτερο δέντρο  $(t_{52})$  που προκύπτει είναι εκείνο που έχει τη ρίζα, η ρίζα έχει τρία παιδιά και από αυτά το ένα έχει ένα δικό του παιδί.

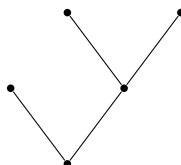


Το δέντρο  $(t_{52})$  έχει πυκνότητα που ισούται με  $\gamma(t_{52}) = r(t_{52})\gamma(t_{11})\gamma(t_{11})\gamma(t_{21}) = 5 \cdot 1 \cdot 2 = 10$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot C^2 \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{10}$$

Στην τρίτη περίπτωση περιέχεται το δέντρο  $(t_{53})$  που έχει τη ρίζα η οποία έχει δύο παιδιά και από αυτά το ένα έχει δύο παιδιά.

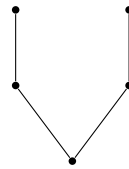


Το δέντρο  $(t_{53})$  έχει πυκνότητα που ισούται με  $\gamma(t_{53}) = r(t_{53})\gamma(t_{11})\gamma(t_{31}) = 5 \cdot 1 \cdot 3 = 15$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot C \cdot A \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{15}$$

Στην τέταρτη περίπτωση περιέχεται το δέντρο  $(t_{54})$  που έχει τη ρίζα η οποία έχει δύο παιδιά. Τα δύο αυτά παιδιά έχουν από ένα παιδί το καθένα.

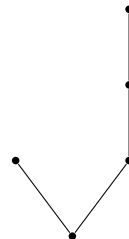


Το δέντρο  $(t_{54})$  έχει πυκνότητα που είναι ίση με  $\gamma(t_{54}) = r(t_{54})\gamma(t_{21})\gamma(t_{21}) = 5 \cdot 2 \cdot 2 = 20$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot [(A \cdot C \cdot e) * (A \cdot C \cdot e)] = \frac{1}{20}$$

Στην πέμπτη περίπτωση περιέχεται το δέντρο  $(t_{55})$  που έχει τη ρίζα η οποία έχει δύο παιδιά. Από αυτά το ένα έχει ένα δικό του παιδί και αυτό έχει ένα ακόμα.

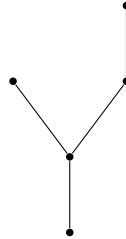


Το δέντρο  $(t_{55})$  έχει πυκνότητα που είναι ίση με  $\gamma(t_{55}) = r(t_{55})\gamma(t_{11})\gamma(t_{32}) = 5 \cdot 1 \cdot 6 = 30$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot C \cdot A^2 \cdot C \cdot e = \frac{1}{30}$$

Το έκτο δέντρο ( $t_{56}$ ) που προκύπτει είναι αυτό που έχει τη ρίζα η οποία έχει ένα παιδί. Αυτό το παιδί έχει δύο δικά του από τα οποία το ένα έχει ένα παιδί.

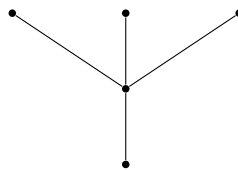


Το δέντρο ( $t_{56}$ ) έχει πυκνότητα που είναι ίση με  $\gamma(t_{56}) = r(t_{56})\gamma(t_{42}) = 5 \cdot 8 = 40$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο είναι:

$$b \cdot A \cdot C \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{40}$$

Το έβδομο δέντρο ( $t_{57}$ ) είναι αυτό που έχει τη ρίζα η οποία έχει ένα παιδί. Το παιδί αυτό έχει τρία δικά του παιδιά.

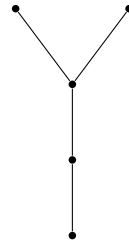


Το δέντρο ( $t_{57}$ ) έχει πυκνότητα που είναι ίση με  $\gamma(t_{57}) = r(t_{57})\gamma(t_{41}) = 5 \cdot 4 = 20$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot A \cdot C^3 \cdot e = \frac{1}{20}$$

Το επόμενο δέντρο ( $t_{58}$ ) που προκύπτει είναι εκείνο που έχει τη ρίζα, η οποία έχει ένα παιδί. Αυτό το παιδί έχει ένα δικό του και αυτό έχει δύο παιδιά.



Το δέντρο  $(t_{58})$  έχει πυκνότητα που είναι ίση με  $\gamma(t_{58}) = r(t_{58})\gamma(t_{43}) = 5 \cdot 12 = 60$ .

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot A^2 \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{60}$$

Τέλος, το ένατο δέντρο  $(t_{59})$  είναι εκείνο που έχει τη ρίζα και η ρίζα έχει ένα παιδί. Αυτό το παιδί έχει ένα δικό του, αυτό έχει ένα ακόμα παιδί και αυτό το παιδί έχει ένα ακόμα.



Το δέντρο  $(t_{59})$  έχει πυκνότητα που είναι ίση με  $\gamma(t_{59}) = r(t_{59})\gamma(t_{44}) = 5 \cdot 24 = 120$ .







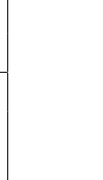

Η συνθήκη τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο αυτό είναι:

$$b \cdot A^3 \cdot C \cdot e = \frac{1}{120}$$

Από την απλοποιητική παραδοχή  $A \cdot e = C$  προκύπτουν οι συνθήκες τάξης  $t_{51}, t_{53}, t_{5,4}, t_{57}, t_{58}$ .

Όσα αναφέρονται παραπάνω δίνονται συγκεντρωτικά στους επόμενους πίνακες. Στον πρώτο πίνακα αναφέρονται οι συνθήκες μέχρι και τέταρτης τάξης και στον

δεύτερο οι συνθήκες της πέμπτης τάξης. Στην πρώτη στήλη των δύο αυτών πινάκων αναγράφεται η τάξη της μεθόδου, στη δεύτερη στήλη το δέντρο και στην τρίτη η συνθήκη σε μορφή αθροίσματος που αντιστοιχεί στο κάθε δέντρο. Στον τρίτο πίνακα που δίνεται αναγράφονται οι συνθήκες τάξης μέχρι και πέμπτης τάξης με χρήση πινάκων.

$r(t)$	$t$	$\Phi(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$
1		$\sum_{i=1}^s b_i = 1$
2		$\sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2}$
3		$\sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3}$
		$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}$
4		$\sum_{i=1}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{4}$
		$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8}$
		$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}$
		$\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}$

Πίνακας 1 : Συνθήκες τάξης και δέντρα μέχρι και τέταρτης τάξης

$r(t)$	$t$	$\Phi(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$
5		$\sum_{i=1}^s b_i c_i^4 = \frac{1}{5}$
		$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i^2 a_{ij} c_j = \frac{1}{10}$
		$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15}$
		$\sum_{i=1}^s b_i (\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j)^2 = \frac{1}{20}$
		$\sum_{i,j,k=1}^s b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{30}$
		$\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k = \frac{1}{40}$
		$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20}$
		$\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60}$
		$\sum_{i,j,k,l=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} a_{kl} c_l = \frac{1}{120}$

Πίνακας 2 : Συνθήκες τάξης και δέντρα πέμπτης τάξης



$r(t)$	$\Phi(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$
1	$b \cdot e = 1$
2	$b \cdot C \cdot e = \frac{1}{2}$
3	$b_i \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{3}$ $b \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{6}$
4	$b \cdot C^3 \cdot e = \frac{1}{4}$ $b \cdot C \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{8}$ $b \cdot A \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{12}$ $b \cdot A \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{24}$
5	$b \cdot C^4 \cdot e = \frac{1}{5}$ $b \cdot C^2 \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{10}$ $b \cdot C \cdot A \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{15}$ $b \cdot [(A \cdot C \cdot e) * (A \cdot C \cdot e)] = \frac{1}{20}$ $b \cdot C \cdot A^2 \cdot C \cdot e = \frac{1}{30}$ $b \cdot A \cdot C \cdot A \cdot C \cdot e = \frac{1}{40}$ $b \cdot A \cdot C^3 \cdot e = \frac{1}{20}$ $b \cdot A^2 \cdot C^2 \cdot e = \frac{1}{60}$ $b \cdot A^3 \cdot C \cdot e = \frac{1}{120}$

Πίνακας 3 : Συνθήκες τάξης με χρήση πινάκων



## Κεφάλαιο 3

# Two-Derivative Runge-Kutta μέθοδοι

### 3.1 Εισαγωγή στις μεθόδους Two-Derivative Runge-Kutta

Οι μέθοδοι two-derivative Runge-Kutta είναι μία γενίκευση των μεθόδων Runge-Kutta. Είναι επαναληπτικές μέθοδοι και για τον υπολογισμό της εκτίμησης  $y_{n+1}$  της τιμής στο σημείο  $x_{n+1}$  χρησιμοποιούνται τόσο οι υπολογισμοί της συνάρτησης  $f(x, y(x))$  όσο και οι υπολογισμοί της παραγώγου της  $f(x, y(x))$  ως προς το  $x$ .

Οι μαθηματικοί Chan και Tsai (2010) μελέτησαν τις μεθόδους two-derivative Runge-Kutta (TDRK) και πιο συγκεκριμένα μία ειδική κατηγορία των μεθόδων TDRK στις οποίες εμπλέκεται μόνο η πρώτη παράγωγος ή η δεύτερη παράγωγος της  $f$ . Οι συνθήκες τάξης των μεθόδων είναι βασισμένες στη θεωρία δέντρων του Butcher.

Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$y' = f(y), y(x_0) = y_0 \quad (3.1)$$

όπου η συνάρτηση  $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$

Γνωρίζουμε την  $f$  και μπορούμε να υπολογίσουμε την παράγωγο της συνάρτησης  $f$ , δηλαδή την  $g$  :

$$y'' = \frac{d}{dx} f(y) = \frac{df}{dy} \cdot \frac{dy}{dx} = f'(y) \cdot f(y)$$

Επομένως,

$$y'' = g(y) := f'(y)f(y) \quad (3.2)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις (3.1) και (3.2) για την κατασκευή μίας μεθόδου. Η μέθοδος που θα δοθεί είναι μία τροποποιημένη μέθοδος Runge-Kutta με  $s$  στάδια, η οποία εφαρμόζεται με βήμα  $h$  και καλείται two-derivative Runge-Kutta. Μία μέθοδος TDRK ορίζεται ως εξής:

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(x_n + c_j h, Y_j) + h^2 \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} g(x_n + c_j h, Y_j), \quad (3.3)$$

όπου  $i = 1, 2, \dots, s$

και

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(x_n + c_i h, Y_i) + h^2 \sum_{i=1}^s \hat{b}_i g(x_n + c_i h, Y_i) \quad (3.4)$$

Παρατηρούμε ότι σε αυτές τις μεθόδους εκτός από τους υπολογισμούς των τιμών της  $f$  στα σημεία  $x_i$  όπου  $i = 1, 2, \dots, s$  περιλαμβάνονται και υπολογισμοί των τιμών της  $g$ .

Επομένως, η μέθοδος αυτή είναι πρακτική όταν το κόστος που προκύπτει κατά την εκτίμηση του  $g$  είναι συγκρίσιμο με την εκτίμηση της  $f$ . Η μέθοδος αυτή μπορεί να είναι πιο αποτελεσματική από μία τυπική μέθοδο Runge-Kutta αν ο αριθμός των υπολογισμών της συνάρτησης είναι μικρότερος.

Οι εξισώσεις μπορούν να γραφούν και σε μορφή πινάκων ως εξής:

$$\begin{aligned} Y &= e \otimes y_n + h(A \otimes I_N)F(Y) + h^2(\hat{A} \otimes I_N)C(Y) \\ y_{n+1} &= y_n + h(b^T \otimes I_N)F(Y) + h^2(\hat{b}^T \otimes I_N)G(Y) \end{aligned}$$

όπου  $e$  είναι μοναδιαίο διάνυσμα που έχει  $s$  στοιχεία. Οι πίνακες  $Y, F(Y), G(Y)$  είναι της μορφής:

$$Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_s \end{pmatrix}, \quad F(Y) = \begin{pmatrix} f(Y_1) \\ \vdots \\ f(Y_s) \end{pmatrix}, \quad G(Y) = \begin{pmatrix} g(Y_1) \\ \vdots \\ g(Y_s) \end{pmatrix}$$

Οι συντελεστές της μεθόδου μπορούν να γραφούν σε έναν εκτεταμένο πίνακα Butcher :

$$\frac{c \mid A \parallel \hat{A}}{\mid b^T \parallel \hat{b}^T}$$

όπου  $A, \hat{A}$  είναι  $s \times s$  πίνακες και  $b, \hat{b}, c$  είναι διανύσματα  $s \times 1$ .

Αν  $\hat{A} = 0$  και  $\hat{b}^T$  τότε προκύπτει ο πίνακας της μεθόδου Runge-Kutta :

$$\frac{c \mid A}{\mid b}$$

Η συνάρτηση ευστάθειας της μεθόδου δίνεται από τη σχέση :

$$R(z) = 1 + zb^T(I_s - zA - z^2\hat{A})^{-1}e + z^2\hat{b}^T(I_s - zA - z^2\hat{A})^{-1}e \quad (3.5)$$

## 3.2 Δέντρα στις μεθόδους Two-Derivative Runge-Kutta

Όπως και στις μεθόδους Runge - Kutta έτσι και στις μεθόδους TDRK οι συνθήκες τάξης μπορούν να βρεθούν με τη θεωρία των δέντρων.

Η σειρά Taylor της λύσης  $y(x_n + h)$  αν θέσουμε  $y_n = y(x_n)$  δίνεται από την σχέση :

$$y(x_n + h) = y_n + \sum_{t \in T} \frac{h^{r(t)}}{\sigma(t)} \frac{1}{\gamma(t)} \Phi(t)(y_n) \quad (3.6)$$

όπου  $r(t)$  είναι η τάξη,  $\sigma(t)$  είναι η συμμετρία,  $\gamma(t)$  είναι η πυκνότητα και  $\Phi(t)(y_n)$  είναι οι στοιχειώδεις διαφορές.

Σε αυτό το σημείο ορίζεται η συνάρτηση  $E : T \rightarrow \mathfrak{R}$  με τύπο  $E(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$  η οποία ερμηνεύεται ως η συνάρτηση που αντιστοιχεί την προσεγγιστική λύση  $y_n$  στην  $y(x_n + h)$ .

Ορίζεται επιπλέον η συνάρτηση  $\alpha : T \rightarrow \mathfrak{R}$  ως η συνάρτηση στοιχειώδους βάρους. Η συνάρτηση αυτή αντιστοιχεί στο  $y_{n+1}$  την αριθμητική λύση που λαμβάνεται με βήμα  $h$ .

Η σειρά  $y_{n+1}$  δίνεται από τον τύπο:

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{t \in T} \frac{h^{r(t)}}{\sigma(t)} \alpha(t) \Phi(t)(y_n) \quad (3.7)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις μπορούμε να συμπεράνουμε πως μια μία μέθοδος έχει τάξη  $\rho$  αν  $\alpha(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$  για όλα τα  $t \in T$  για τα οποία ισχύει  $r(t) \leq \rho$ .

Μπορούμε να προσδιορίσουμε το στοιχειώδες βάρος  $\alpha(t)$  σε σχέση με τους συνελεστές της μεθόδου. Θεωρούμε συνάρτηση  $\eta(t) : T^* \rightarrow \mathfrak{R}^s$ , η οποία δηλώνει το διάνυσμα στοιχειώδους βάρους για τα εσωτερικά στάδια και δίνεται από τον τύπο:

$$\eta(t) = A\eta(t|\bullet) + \hat{A}\eta(t|\dot{\bullet}) \quad (3.8)$$

Ο τύπος αυτός μπορεί να χρησιμοποιηθεί όταν  $r(t) > 1$ . Όταν  $t = \emptyset$  τότε  $\eta(t) = e$  ενώ όταν  $t = \bullet$  τότε  $\eta(t) = c$

Υποθέτουμε ότι ισχύουν οι σχέσεις:  $c = Ae$  και  $\hat{c} = \hat{A}e$ .

Παρακάτω δίνονται οι συνθήκες που προκύπτουν από την (3.8), τα δέντρα δίνονται με τη σειρά που αναφέρθηκαν στην ενότητα 2.3:

1. Από όσα αναφέρθηκαν προκύπτει πως όταν  $t = \emptyset$ , τότε ισχύει η συνθήκη:

$$\eta(t) = e$$

2. Για την πρώτη τάξη έχουμε μόνο το δέντρο  $(t_{11})$

•

για το οποίο ισχύει η συνθήκη:

$$\eta(t) = c$$

3. Στη δεύτερη τάξη προέκυψε μόνο το δέντρο ( $t_{21}$ )



και τότε ισχύει η συνθήκη:

$$\eta(\bullet) = A\eta(\bullet|\bullet) + \hat{A}\eta(\bullet|\bullet)$$

$$\eta(\bullet) = A\eta(\bullet) + \hat{A}\eta(\emptyset) = Ac + \hat{A}e$$

Όμως, από τη σχέση  $\hat{c} = \hat{A}e$  τελικά προκύπτει ότι:

$$\eta(\bullet) = Ac + \hat{c}$$

4. Στην τρίτη τάξη προέκυψαν δύο δέντρα που έχουν τρεις κορυφές. Διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

Στην πρώτη περίπτωση περιέχεται το δέντρο ( $t_{31}$ )



για το οποίο προκύπτει η συνθήκη:

$$\eta(t_{31}) = A\eta(t_{31}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{31}|\bullet)$$

$$\eta(t_{31}) = A\eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{A}2\eta(\bullet) = Acc + \hat{A}2c$$

Τελικά,

$$\eta(t_{31}) = Ac^2 + 2\hat{A}c$$

Στη δεύτερη περίπτωση όπου περιέχεται το δέντρο ( $t_{32}$ )



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{32}) = A\eta(t_{32}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{32}|\blacklozenge)$$

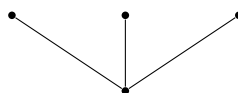
$$\eta(t_{32}) = A\eta(\blacklozenge) + \hat{A}\eta(\bullet) = A(Ac + \hat{A}e) + \hat{A}c$$

Τελικά, από τη σχέση  $\hat{c} = \hat{A}e$  προκύπτει :

$$\eta(t_{32}) = A^2c + A\hat{c} + \hat{A}c$$

5. Για την τέταρτη τάξη υπάρχουν τα τέσσερα δέντρα που αναφέραμε και στις μεθόδους Runge - Kutta , όπου μπορούμε να διακρίνουμε τις εξής τέσσερις περιπτώσεις :

Για το πρώτο δέντρο ( $t_{41}$ )



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{41}) = A\eta(t_{41}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{41}|\blacklozenge)$$

$$\eta(t_{41}) = A\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{A}3\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

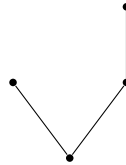
$$\eta(t_{41}) = Accc + \hat{A}3cc$$

Τελικά,

$$\eta(t_{41}) = Ac^3 + 3\hat{A}c^2$$



Για το δεύτερο δέντρο ( $t_{42}$ )



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{42}) = A\eta(t_{42}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{42}|\bullet)$$

$$\eta(t_{42}) = A\eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{A}\eta(\bullet) + \hat{A}\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\eta(t_{42}) = Ac(Ac + \hat{c}) + \hat{A}(Ac + \hat{c}) + Acc$$

Τελικά,

$$\eta(t_{42}) = AcAc + Ac\hat{c} + \hat{A}Ac + \hat{A}\hat{c} + \hat{A}c^2$$

Για το τρίτο δέντρο ( $t_{43}$ ) τέταρτης τάξης



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{43}) = A\eta(t_{43}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{43}|\bullet)$$

$$\eta(t_{43}) = A\eta(t_{31}) + \hat{A}\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\eta(t_{43}) = A(Ac^2 + 2\hat{A}c) + \hat{A}cc$$

Τελικά,

$$\eta(t_{43}) = A^2c^2 + 2A\hat{A}c + \hat{A}c^2$$

Τέλος, προέκυψε το δέντρο ( $t_{44}$ )



για το οποίο ισχύει η συνθήκη:

$$\eta(t_{44}) = A\eta(t_{44}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{44}|\dot{\bullet})$$

$$\eta(t_{44}) = A\eta(\dot{\bullet}) + \hat{A}\eta(\bullet)$$

$$\eta(t_{44}) = A(A^2c + A\hat{c} + \hat{A}c) + \hat{A}(Ac + \hat{c})$$

Τελικά,

$$\eta(t_{44}) = A^3c + A^2\hat{c} + A\hat{A}c + \hat{A}Ac + \hat{A}\hat{c}$$

6. Για την πέμπτη τάξη προέκυψαν 9 δέντρα και διακρίναμε τις εξής περιπτώσεις:

Στην πρώτη περίπτωση περιέχεται το δέντρο ( $t_{51}$ )



Για το δέντρο αυτό προκύπτει η συνθήκη:

$$\eta(t_{51}) = A\eta(t_{51}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{51}|\bullet\ddagger)$$

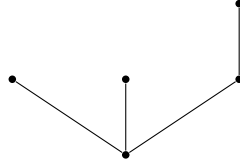
$$\eta(t_{51}) = A\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{A}4\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\eta(t_{51}) = Acccc + \hat{A}4ccc$$

Τελικά,

$$\eta(t_{51}) = Ac^4 + 4\hat{A}c^3$$

Για το δεύτερο δέντρο ( $t_{52}$ )



προκύπτει η συνθήκη:

$$\eta(t_{52}) = A\eta(t_{52}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{52}|\bullet\ddagger)$$

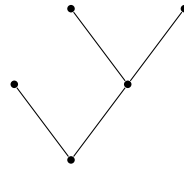
$$\eta(t_{52}) = A\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\ddagger) + \hat{A}2\eta(\bullet)\eta(\ddagger) + \hat{A}\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\eta(t_{52}) = Acc(Ac + \hat{c}) + \hat{A}2c(Ac + \hat{c}) + \hat{A}ccc$$

Τελικά,

$$\eta(t_{52}) = Ac^2Ac + Ac^2\hat{c} + 2\hat{A}cAc + 2\hat{A}c\hat{c} + \hat{A}c^3$$

Στην τρίτη περίπτωση που περιέχεται το δέντρο ( $t_{53}$ )



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{53}) = A\eta(t_{53}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{53}|\ddot{\bullet})$$

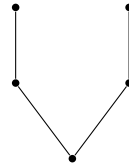
$$\eta(t_{53}) = A\eta(\bullet)\eta(t_{31}) + \hat{A}\eta(t_{31}) + \hat{A}\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\eta(t_{53}) = Ac(Ac^2 + 2\hat{A}c) + \hat{A}(Ac^2 + 2\hat{A}c) + \hat{A}ccc$$

Τελικά,

$$\eta(t_{53}) = AcAc^2 + 2Ac\hat{A}c + \hat{A}Ac^2 + 2\hat{A}^2c + \hat{A}c^3$$

Για το επόμενο δέντρο ( $t_{54}$ )



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{54}) = A\eta(t_{54}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{54}|\ddot{\bullet})$$

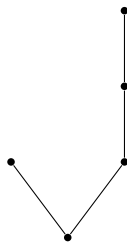
$$\eta(t_{54}) = A\eta(\ddot{\bullet})\eta(\ddot{\bullet}) + \hat{A}2\eta(\bullet)\eta(\ddot{\bullet})$$

$$\eta(t_{54}) = A(Ac + \hat{c})^2 + \hat{A}2c(Ac + \hat{c})$$

Τελικά,

$$\eta(t_{54}) = A(Ac + \hat{c})^2 + 2\hat{A}cAc + 2\hat{A}c\hat{c}$$

Για το δέντρο ( $t_{55}$ )



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{55}) = A\eta(t_{55}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{55}|\blacklozenge)$$

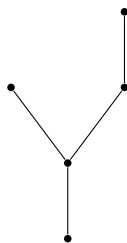
$$\eta(t_{55}) = A\eta(\bullet)\eta(t_{32}) + \hat{A}\eta(t_{32}) + \hat{A}\eta(\bullet)\eta(\blacklozenge)$$

$$\eta(t_{55}) = Ac(A^2c + A\hat{c} + \hat{A}c) + \hat{A}(A^2c + A\hat{c} + \hat{A}c) + \hat{A}c(Ac + \hat{c})$$

Τελικά,

$$\eta(t_{55}) = AcA^2c + AcA\hat{c} + Ac\hat{A}c + \hat{A}A^2c + \hat{A}A\hat{c} + \hat{A}^2c + \hat{A}cAc + \hat{A}c\hat{c}$$

Για το έκτο δέντρο ( $t_{56}$ )



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{56}) = A\eta(t_{56}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{56}|\blacklozenge)$$

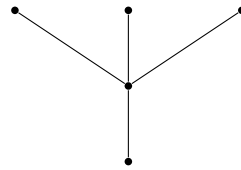
$$\eta(t_{56}) = A\eta(t_{42}) + \hat{A}\eta(\bullet)\eta(\blacklozenge)$$

$$\eta(t_{56}) = A(AcAc + Ac\hat{c} + \hat{A}c^2 + \hat{A}Ac + \hat{A}\hat{c}) + \hat{A}c(Ac + \hat{c})$$

Τελικά,

$$\eta(t_{56}) = A^2cAc + A^2c\hat{c} + A\hat{A}c^2 + A\hat{A}Ac + A\hat{A}\hat{c} + \hat{A}cAc + \hat{A}c\hat{c}$$

Για το επόμενο δέντρο που προέκυψε ( $t_{57}$ )



η συνθήκη που προκύπτει είναι:

$$\eta(t_{57}) = A\eta(t_{57}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{57}|\blacklozenge)$$

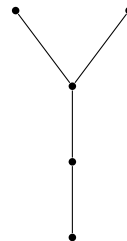
$$\eta(t_{57}) = A\eta(t_{41}) + \hat{A}\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\eta(t_{57}) = A(Ac^3 + 3\hat{A}c^2) + \hat{A}ccc$$

Τελικά,

$$\eta(t_{57}) = A^2c^3 + 3A\hat{A}c^2 + \hat{A}c^3$$

Για το όγδοο σε σειρά δέντρο που αναφέραμε ( $t_{58}$ )



προκύπτει η συνθήκη:

$$\eta(t_{58}) = A\eta(t_{58}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{58}|\blacklozenge)$$

$$\eta(t_{58}) = A\eta(t_{43}) + \hat{A}\eta(t_{31})$$

$$\eta(t_{58}) = A(A^2c^2 + 2A\hat{A}c + \hat{A}c^2) + \hat{A}(Ac^2 + 2\hat{A}c)$$

Τελικά,

$$\eta(t_{58}) = A^3c^2 + 2A^2\hat{A}c + A\hat{A}c^2 + \hat{A}Ac^2 + 2\hat{A}^2c^2$$

Τέλος, για το ένατο δέντρο ( $t_{59}$ )



προκύπτει η συνθήκη :

$$\eta(t_{59}) = A\eta(t_{59}|\bullet) + \hat{A}\eta(t_{59}|\bullet)$$









$$\eta(t_{59}) = A\eta(t_{44}) + \hat{A}\eta(t_{32})$$

$$\eta(t_{59}) = A(A^3c + A^2\hat{c} + A\hat{A}c + \hat{A}Ac + \hat{A}\hat{c}) + \hat{A}(A^2c + A\hat{c} + \hat{A}c)$$

Τελικά,


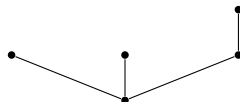
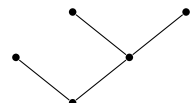
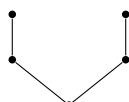
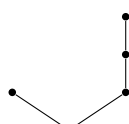
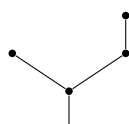
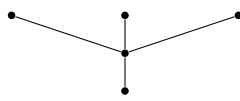
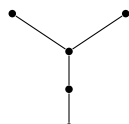

$$\eta(t_{59}) = A^4c + A^3\hat{c} + A^2\hat{A}c + A\hat{A}Ac + A\hat{A}\hat{c} + \hat{A}A^2c + \hat{A}A\hat{c} + \hat{A}^2c$$

Τα δέντρα και το διάνυσμα στοιχειώδους βάρους για το κάθε δέντρο αναγράφονται συγκεντρωτικά στον πίνακα που δίνεται στη συνέχεια :

$r(t)$	$t$	$\eta(t)$
1		$c$
2		$Ac + \hat{c}$
3		$Ac^2 + 2\hat{A}c$
		$A^2c + A\hat{c} + \hat{A}c$
4		$Ac^3 + 3\hat{A}c^2$
		$AcAc + Ac\hat{c} + \hat{A}Ac + \hat{A}\hat{c} + \hat{A}c^2$
		$A^2c^2 + 2A\hat{A}c + \hat{A}c^2$
		$A^3c + A^2\hat{c} + A\hat{A}c + \hat{A}Ac + \hat{A}\hat{c}$

Πίνακας 1 : Δέντρα με το αντίστοιχο διάνυσμα στοιχειώδους βάρους μέχρι και τέταρτης τάξης



$r(t)$	$t$	$\eta(t)$
5		$Ac^4 + 4\hat{A}c^3$
		$Ac^2Ac + Ac^2\hat{c} + 2\hat{A}cAc + 2\hat{A}c\hat{c} + \hat{A}c^3$
		$AcAc^2 + 2Ac\hat{A}c + \hat{A}Ac^2 + 2\hat{A}^2c + \hat{A}c^3$
		$A(Ac + \hat{c})^2 + 2\hat{A}cAc + 2\hat{A}c\hat{c}$
		$AcA^2c + AcA\hat{c} + Ac\hat{A}c + \hat{A}A^2c + \hat{A}A\hat{c} + \hat{A}^2c + \hat{A}cAc + \hat{A}c\hat{c}$
		$A^2cAc + A^2c\hat{c} + A\hat{A}c^2 + A\hat{A}Ac + A\hat{A}\hat{c} + \hat{A}cAc + \hat{A}c\hat{c}$
		$A^2c^3 + 3A\hat{A}c^2 + \hat{A}c^3$
		$A^3c^2 + 2A^2\hat{A}c + A\hat{A}c^2 + \hat{A}Ac^2 + 2\hat{A}^2c^2$
		$A^4c + A^3\hat{c} + A^2\hat{A}c + A\hat{A}Ac + A\hat{A}\hat{c} + \hat{A}A^2c + \hat{A}A\hat{c} + \hat{A}^2c$

Πίνακας 2 : Δέντρα με το αντίστοιχο διάνυσμα στοιχειώδους βάρους 5ης τάξης

Το στοιχειώδες βάρος δίνεται από τον τύπο :

$$\alpha(t) = b^T \eta(t|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t|\hat{\bullet}) \quad (3.9)$$

Ο τύπος που δίνεται παραπάνω χρησιμοποιείται όταν  $r(t) > 1$ . Στην περίπτωση όπου  $t = \bullet$  τότε η συνάρτηση στοιχειώδους βάρους δίνεται από τη σχέση  $\alpha(t) = b^T e$ .

Ο τύπος για τη συνάρτηση στοιχειώδους βάρους μαζί με τον τύπο (3.8) χρησιμοποιούνται για τον καθορισμό των συνθηκών τάξης.

Πιο αναλυτικά, οι συνθήκες που προκύπτουν ως και την πέμπτη τάξη είναι:

1. Από την προηγούμενη σχέση όταν  $t = \emptyset$  τότε  $\alpha(t) = e$ .
2. Στην πρώτη τάξη για το δέντρο  $(t_{11})$  προκύπτει από την προηγούμενη σχέση ότι το στοιχειώδες βάρος είναι:

•

$$\alpha(\bullet) = b^T e$$

Η πυκνότητα για το συγκεκριμένο δέντρο είναι  $\gamma(t_{11}) = 1$  και τότε η συνθήκη πρώτης τάξης που αντιστοιχεί στο δέντρο είναι:

$$b^T e = 1$$

3. Στη δεύτερη τάξη το δέντρο  $(t_{21})$  που προέκυψε έχει στοιχειώδες βάρος:

•  
|  
•

$$\alpha(\bullet) = b^T \eta(\bullet|\bullet) + \hat{b}^T \eta(\bullet|\bullet)$$

$$\alpha(\bullet) = b^T \eta(\bullet) + \hat{b}^T \eta(\emptyset)$$

$$\alpha(\bullet) = b^T c + \hat{b}^T e$$

Η πυκνότητα του δέντρου  $t_{21}$  είναι  $\gamma(t_{21}) = r(t_{21}) \cdot \gamma(t_{11}) = 2 \cdot 1 = 2$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{21})$  είναι:

$$b^T c + \hat{b}^T e = \frac{1}{2}$$

4. Για την τρίτη τάξη διακρίνουμε τις εξής δύο περιπτώσεις:

Για το δέντρο  $(t_{31})$  το στοιχειώδες βάρος είναι:



$$\alpha(t_{31}) = b^T \eta(t_{31}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{31}|\bullet)$$

$$\alpha(t_{31}) = b^T \eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{b}^T 2\eta(\bullet)$$

$$\alpha(t_{31}) = b^T c^2 + 2\hat{b}^T c$$

Η πυκνότητα για το δέντρο αυτό είναι  $\gamma(t_{31}) = r(t_{31}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{11}) = 3 \cdot 1 \cdot 1 = 3$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{31})$  είναι:

$$b^T c^2 + 2\hat{b}^T c = \frac{1}{3}$$

Για το δέντρο  $(t_{32})$  το στοιχειώδες βάρος δίνεται από την παρακάτω σχέση :



$$\alpha(t_{32}) = b^T \eta(t_{32}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{32}|\blacklozenge)$$

$$\alpha(t_{32}) = b^T \eta(\blacklozenge) + \hat{b}^T \eta(\bullet)$$

$$\alpha(t_{32}) = b^T (Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T c$$

$$\alpha(t_{32}) = b^T Ac + b^T \hat{c} + \hat{b}^T c$$

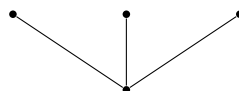
Η πυκνότητα για το δέντρο αυτό είναι  $\gamma(t_{32}) = r(t_{32}) \cdot \gamma(t_{21}) = 3 \cdot 2 = 6$ .

Η συνθήκη που αντιστοιχεί στο δέντρο είναι :

$$b^T Ac + b^T \hat{c} + \hat{b}^T c = \frac{1}{6}$$

5. Για την τέταρτη τάξη προέκυψαν τα τέσσερα δέντρα όπως αναφέρονται στις μεθόδους Runge-Kutta. Διακρίναμε τις εξής περιπτώσεις :

Το πρώτο δέντρο  $(t_{41})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{41}) = b^T \eta(t_{41}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{41}|\blacktriangleright)$$

$$\alpha(t_{41}) = b^T \eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{b}^T 3\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\alpha(t_{41}) = b^T ccc + \hat{b}^T 3cc$$

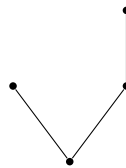
$$\alpha(t_{41}) = b^T c^3 + 3\hat{b}^T c^2$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{41})$  είναι  $\gamma(t_{41}) = r(t_{41}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{11}) = 4 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 = 4$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{41})$  είναι:

$$b^T c^3 + 3\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$$

Το δεύτερο δέντρο  $(t_{42})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{42}) = b^T \eta(t_{42}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{42}|\blacktriangleright)$$

$$\alpha(t_{42}) = b^T \eta(\bullet)\eta(\blacktriangleright) + \hat{b}^T \eta(\blacktriangleright) + \hat{b}^T \eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\alpha(t_{42}) = b^T c(Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T (Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T cc$$

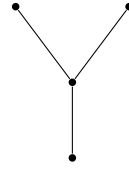
$$\alpha(t_{42}) = b^T cAc + b^T c\hat{c} + \hat{b}^T Ac + \hat{b}^T \hat{c} + \hat{b}^T c^2$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{42})$  είναι  $\gamma(t_{42}) = r(t_{42}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{21}) = 4 \cdot 1 \cdot 2 = 8$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{42})$  είναι:

$$b^T cAc + b^T c\hat{c} + \hat{b}^T Ac + \hat{b}^T \hat{c} + \hat{b}^T c^2 = \frac{1}{8}$$

Το τρίτο δέντρο  $(t_{43})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{43}) = b^T \eta(t_{43}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{43}|\bullet)$$

$$\alpha(t_{43}) = b^T \eta(t_{31}) + \hat{b}^T \eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\alpha(t_{43}) = b^T (Ac^2 + 2\hat{A}c) + \hat{b}^T cc$$

$$\alpha(t_{43}) = b^T Ac^2 + 2b^T \hat{A}c + \hat{b}^T c^2$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{43})$  είναι  $\gamma(t_{43}) = r(t_{43}) \cdot \gamma(t_{31}) = 4 \cdot 3 = 12$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{43})$  είναι:

$$b^T Ac^2 + 2b^T \hat{A}c + \hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$$

Το τέταρτο δέντρο ( $t_{44}$ )



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{44}) = b^T \eta(t_{44}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{44}|\blacklozenge)$$

$$\alpha(t_{44}) = b^T \eta(\bullet) + \hat{b}^T \eta(\blacklozenge)$$

$$\alpha(t_{44}) = b^T (A^2 c + A \hat{c} + \hat{A} c) + \hat{b}^T (A c + \hat{c})$$

$$\alpha(t_{44}) = b^T A^2 c + b^T A \hat{c} + b^T \hat{A} c + \hat{b}^T A c + \hat{b}^T \hat{c}$$

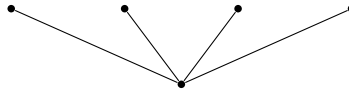
Η πυκνότητα για το δέντρο ( $t_{44}$ ) είναι  $\gamma(t_{44}) = r(t_{44}) \cdot \gamma(t_{32}) = 4 \cdot 6 = 24$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο ( $t_{43}$ ) είναι:

$$b^T A^2 c + b^T A \hat{c} + b^T \hat{A} c + \hat{b}^T A c + \hat{b}^T \hat{c} = \frac{1}{24}$$

6. Για την πέμπτη τάξη προέκυψαν τα 9 δέντρα που έχουμε αναφέρει και σε προηγούμενη ενότητα. Διακρίνουμε στις εξής περιπτώσεις:

Το δέντρο ( $t_{51}$ )



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{51}) = b^T \eta(t_{51}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{51}|\bullet)$$

$$\alpha(t_{51}) = b^T \eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{b}^T 4\eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\alpha(t_{51}) = b^T cccc + \hat{b}^T 4ccc$$

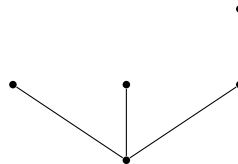
$$\alpha(t_{51}) = b^T c^4 + 4\hat{b}^T c^3$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{51})$  είναι  $\gamma(t_{51}) = r(t_{51}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{11}) = 5 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 = 5$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{51})$  είναι:

$$b^T c^4 + 4\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{5}$$

Το δεύτερο δέντρο  $(t_{52})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{52}) = b^T \eta(t_{52}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{52}|\bullet)$$

$$\alpha(t_{52}) = b^T \eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{b}^T 2\eta(\bullet)\eta(\bullet) + \hat{b}^T \eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$



$$\alpha(t_{52}) = b^T c c (Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T 2c (Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T c c c$$

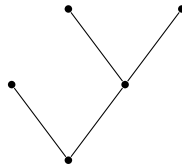
$$\alpha(t_{52}) = b^T c^2 Ac + b^T c^2 \hat{c} + 2\hat{b}^T c Ac + 2\hat{b}^T c \hat{c} + \hat{b}^T c^3$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{52})$  είναι  $\gamma(t_{52}) = r(t_{52}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{21}) = 5 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 2 = 10$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{52})$  είναι:

$$b^T c^2 Ac + b^T c^2 \hat{c} + 2\hat{b}^T c Ac + 2\hat{b}^T c \hat{c} + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{10}$$

Το δέντρο  $(t_{53})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{53}) = b^T \eta(t_{53}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{53}|\blacktriangleright)$$

$$\alpha(t_{53}) = b^T \eta(\bullet)\eta(t_{31}) + \hat{b}^T \eta(t_{31}) + \hat{b}^T \eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\alpha(t_{53}) = b^T c (Ac^2 + 2\hat{A}c) + \hat{b}^T (Ac^2 + 2\hat{A}c) + \hat{b}^T c c c$$

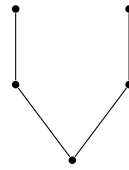
$$\alpha(t_{53}) = b^T c Ac^2 + 2b^T c \hat{A}c + \hat{b}^T Ac^2 + 2\hat{b}^T \hat{A}c + \hat{b}^T c^3$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{53})$  είναι  $\gamma(t_{53}) = r(t_{53}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{31}) = 5 \cdot 1 \cdot 3 = 15$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{53})$  είναι:

$$b^T cAc^2 + 2b^T c\hat{A}c + \hat{b}^T Ac^2 + 2\hat{b}^T \hat{A}c + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{15}$$

Το δέντρο  $(t_{54})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{54}) = b^T \eta(t_{54}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{54}|\hat{\bullet})$$

$$\alpha(t_{54}) = b^T \eta(\hat{\bullet})\eta(\hat{\bullet}) + \hat{b}^T 2\eta(\bullet)\eta(\hat{\bullet})$$

$$\alpha(t_{54}) = b^T (Ac + \hat{c})^2 + \hat{b}^T 2c(Ac + \hat{c})$$

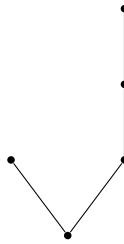
$$\alpha(t_{54}) = b^T (Ac)^2 + 2b^T Ac\hat{c} + b^T \hat{c}^2 + 2\hat{b}^T cAc + 2\hat{b}^T c\hat{c}$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{54})$  είναι  $\gamma(t_{54}) = r(t_{54}) \cdot \gamma(t_{21}) \cdot \gamma(t_{21}) = 5 \cdot 2 \cdot 2 = 20$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{54})$  είναι:

$$b^T (Ac)^2 + 2b^T Ac\hat{c} + b^T \hat{c}^2 + 2\hat{b}^T cAc + 2\hat{b}^T c\hat{c} = \frac{1}{20}$$

Το δέντρο  $(t_{55})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{55}) = b^T \eta(t_{55}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{55}|\blacktriangleright)$$

$$\alpha(t_{55}) = b^T \eta(\bullet)\eta(t_{32}) + \hat{b}^T \eta(t_{32}) + \hat{b}^T \eta(\bullet)\eta(\blacktriangleright)$$

$$\alpha(t_{55}) = b^T c(A^2c + A\hat{c} + \hat{A}c) + \hat{b}^T (A^2c + A\hat{c} + \hat{A}c) + \hat{b}^T c(Ac + \hat{c})$$

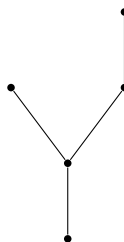
$$\alpha(t_{55}) = b^T cA^2c + b^T cA\hat{c} + b^T c\hat{A}c + \hat{b}^T A^2c + \hat{b}^T A\hat{c} + \hat{b}^T \hat{A}c + \hat{b}^T cAc + \hat{b}^T c\hat{c}$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{55})$  είναι  $\gamma(t_{55}) = r(t_{55}) \cdot \gamma(t_{11}) \cdot \gamma(t_{32}) = 5 \cdot 1 \cdot 6 = 30$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{55})$  είναι:

$$b^T cA^2c + b^T cA\hat{c} + b^T c\hat{A}c + \hat{b}^T A^2c + \hat{b}^T A\hat{c} + \hat{b}^T \hat{A}c + \hat{b}^T cAc + \hat{b}^T c\hat{c} = \frac{1}{30}$$

Το δέντρο  $(t_{56})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{56}) = b^T \eta(t_{56}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{56}|\blacktriangleright)$$

$$\alpha(t_{56}) = b^T \eta(t_{42}) + \hat{b}^T \eta(\bullet)\eta(\blacktriangleright)$$

$$\alpha(t_{56}) = b^T (AcAc + Ac\hat{c} + \hat{A}c^2 + \hat{A}Ac + \hat{A}\hat{c}) + \hat{b}^T c(Ac + \hat{c})$$

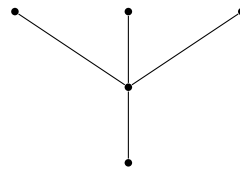
$$\alpha(t_{56}) = b^T AcAc + b^T Ac\hat{c} + b^T \hat{A}c^2 + b^T \hat{A}Ac + b^T \hat{A}\hat{c} + \hat{b}^T cAc + \hat{b}^T c\hat{c}$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{56})$  είναι  $\gamma(t_{56}) = r(t_{56}) \cdot \gamma(t_{42}) = 5 \cdot 8 = 40$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{56})$  είναι:

$$b^T AcAc + b^T Ac\hat{c} + b^T \hat{A}c^2 + b^T \hat{A}Ac + b^T \hat{A}\hat{c} + \hat{b}^T cAc + \hat{b}^T c\hat{c} = \frac{1}{40}$$

Το δέντρο  $(t_{57})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{57}) = b^T \eta(t_{57}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{57}|\blacktriangleright)$$

$$\alpha(t_{57}) = b^T \eta(t_{41}) + \hat{b}^T \eta(\bullet)\eta(\bullet)\eta(\bullet)$$

$$\alpha(t_{57}) = b^T (Ac^3 + 3\hat{A}c^2) + \hat{b}^T ccc$$

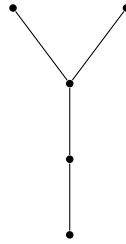
$$\alpha(t_{57}) = b^T Ac^3 + 3b^T \hat{A}c^2 + \hat{b}^T c^3$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{57})$  είναι  $\gamma(t_{57}) = r(t_{57}) \cdot \gamma(t_{41}) = 5 \cdot 4 = 20$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{57})$  είναι:

$$b^T A c^3 + 3b^T \hat{A} c^2 + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

Το δέντρο  $(t_{58})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{58}) = b^T \eta(t_{58}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{58}|\blacklozenge)$$

$$\alpha(t_{58}) = b^T \eta(t_{43}) + \hat{b}^T \eta(t_{31})$$

$$\alpha(t_{58}) = b^T (A^2 c^2 + 2A \hat{A} c + \hat{A} c^2) + \hat{b}^T (A c^2 + 2 \hat{A} c)$$

$$\alpha(t_{58}) = b^T A^2 c^2 + 2b^T A \hat{A} c + b^T \hat{A} c^2 + \hat{b}^T A c^2 + 2\hat{b}^T \hat{A} c$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{58})$  είναι  $\gamma(t_{58}) = r(t_{58}) \cdot \gamma(t_{43}) = 5 \cdot 12 = 60$ .

Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{58})$  είναι:

$$b^T A^2 c^2 + 2b^T A \hat{A} c + b^T \hat{A} c^2 + \hat{b}^T A c^2 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{60}$$

Το δέντρο  $(t_{59})$



έχει στοιχειώδες βάρος:

$$\alpha(t_{59}) = b^T \eta(t_{59}|\bullet) + \hat{b}^T \eta(t_{59}|\blacklozenge)$$

$$\alpha(t_{59}) = b^T \eta(t_{44}) + \hat{b}^T \eta(t_{32})$$

$$\alpha(t_{59}) = b^T (A^3 c + A^2 \hat{c} + A \hat{A} c + \hat{A} A c + \hat{A} \hat{c}) + \hat{b}^T (A^2 c + A \hat{c} + \hat{A} c)$$





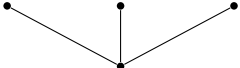
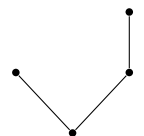
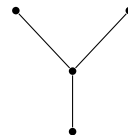

$$\alpha(t_{59}) = b^T A^3 c + b^T A^2 \hat{c} + b^T A \hat{A} c + b^T \hat{A} A c + b^T \hat{A} \hat{c} + \hat{b}^T A^2 c + \hat{b}^T A \hat{c} + \hat{b}^T \hat{A} c$$

Η πυκνότητα για το δέντρο  $(t_{59})$  είναι  $\gamma(t_{59}) = r(t_{59}) \cdot \gamma(t_{44}) = 5 \cdot 24 = 120$ .


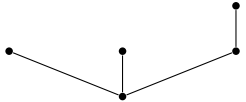
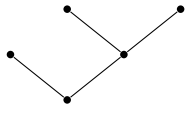

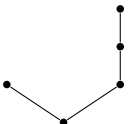
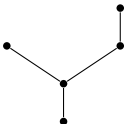
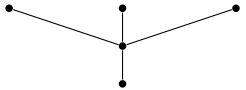
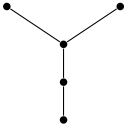
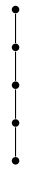
Επομένως, η συνθήκη που προκύπτει για το δέντρο  $(t_{59})$  είναι:

$$b^T A^3 c + b^T A^2 \hat{c} + b^T A \hat{A} c + b^T \hat{A} A c + b^T \hat{A} \hat{c} + \hat{b}^T A^2 c + \hat{b}^T A \hat{c} + \hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{120}$$

Οι συνθήκες για το στοιχειώδες βάρος για κάθε δέντρο αναγράφονται συνοπτικά στους δύο πίνακες που δίνονται στη συνέχεια.

$r(t)$	$t$	$\alpha(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$
1		$b^T e = 1$
2		$b^T c + \hat{b}^T e = \frac{1}{2}$
3		$b^T c^2 + 2\hat{b}^T c = \frac{1}{3}$
		$b^T A c + b^T \hat{c} + \hat{b}^T c = \frac{1}{6}$
4		$b^T c^3 + 3\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$
		$b^T c A c + b^T c \hat{c} + \hat{b}^T A c + \hat{b}^T \hat{c} + \hat{b}^T c^2 = \frac{1}{8}$
		$b^T A c^2 + 2b^T \hat{A} c + \hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$
		$b^T A^2 c + b^T A \hat{c} + b^T \hat{A} c + \hat{b}^T A c + \hat{b}^T \hat{c} = \frac{1}{24}$

Πίνακας 3 : Δέντρα και συνθήκες στοιχειώδους βάρους μέχρι και τέταρτης τάξης

$r(t)$	$t$	$\alpha(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$
5		$b^T c^4 + 4\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{5}$
		$b^T c^2 Ac + b^T c^2 \hat{c} + 2\hat{b}^T cAc + 2\hat{b}^T c\hat{c} + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{10}$
		$b^T cAc^2 + 2b^T c\hat{A}c + \hat{b}^T Ac^2 + 2\hat{b}^T \hat{A}c + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{15}$
		$b^T (Ac)^2 + 2b^T Ac\hat{c} + b^T \hat{c}^2 + 2\hat{b}^T cAc + 2\hat{b}^T c\hat{c} = \frac{1}{20}$
		$b^T cA^2c + b^T cA\hat{c} + b^T c\hat{A}c + \hat{b}^T A^2c + \hat{b}^T A\hat{c} + \hat{b}^T \hat{A}c + \hat{b}^T cAc + \hat{b}^T c\hat{c} = \frac{1}{30}$
		$b^T AcAc + b^T Ac\hat{c} + b^T \hat{A}c^2 + b^T \hat{A}Ac + b^T \hat{A}\hat{c} + \hat{b}^T cAc + \hat{b}^T c\hat{c} = \frac{1}{40}$
		$b^T Ac^3 + 3b^T \hat{A}c^2 + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$
		$b^T A^2c^2 + 2b^T A\hat{A}c + b^T \hat{A}c^2 + \hat{b}^T Ac^2 + 2\hat{b}^T \hat{A}c = \frac{1}{60}$
		$b^T A^3c + b^T A^2\hat{c} + b^T A\hat{A}c + b^T \hat{A}Ac + b^T \hat{A}\hat{c} + \hat{b}^T A^2c + \hat{b}^T A\hat{c} + \hat{b}^T \hat{A}c = \frac{1}{120}$

Πίνακας 4 : Δέντρα με την αντίστοιχη συνθήκη στοιχειώδους βάρους 5ης τάξης



Οι απλοποιητικές παραδοχές για τις μεθόδους Runge-Kutta δίνονται από τη σχέση:

$$Ac^{k-1} + (k-1)\hat{A}c^{k-2} = \frac{c^k}{k}, \quad k = 1, 2, \dots, q \quad (3.10)$$

Οι συνθήκες που προκύπτουν από την ( 3.10 ) μειώνουν τον αριθμό των συνθηκών τάξης. Για  $k = 1$  προκύπτει η απλοποιητική παραδοχή  $Ae = c$  όπου ικανοποιεί τις συνθήκες των μεθόδων Runge-Kutta.

Για τις μεθόδους TDRK μπορούν να ικανοποιηθούν μόνο οι δύο πρώτες απλοποιητικές παραδοχές:

1. Για  $k = 1$  προκύπτει η πρώτη απλοποιητική παραδοχή  $Ae = c$
2. Για  $k = 2$  προκύπτει η δεύτερη απλοποιητική παραδοχή  $Ac + \hat{A}e = \frac{c^2}{2}$

Με βάση τις απλοποιητικές παραδοχές προκύπτουν τα εξής στοιχεία:

Για την τρίτη τάξη αν στη συνθήκη του δέντρου ( $t_{32}$ ) αντικαταστήσουμε την δεύτερη απλοποιητική παραδοχή τότε αυτή μετατρέπεται ισοδύναμα:

$$b^T Ac + b^T \hat{c} + \hat{b}^T c = \frac{1}{6}$$

$$b^T (Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T c = \frac{1}{6}$$

$$b^T \frac{c^2}{2} + \hat{b}^T c = \frac{1}{6}$$

$$b^T c^2 + 2\hat{b}^T c = \frac{1}{3}$$

Παρατηρούμε λοιπόν πως με τη χρήση της απλοποιητικής παραδοχής η συνθήκη που αντιστοιχεί στο δέντρο ( $t_{32}$ ) συμπίπτει με τη συνθήκη που αντιστοιχεί στο δέντρο ( $t_{31}$ ) και τελικά μένει μόνο η συνθήκη αυτή.

Για την τέταρτη τάξη αν στη συνθήκη του δέντρου ( $t_{42}$ ) αντικαταστήσουμε την δεύτερη απλοποιητική παραδοχή θα μετατραπεί ισοδύναμα:

$$b^T cAc + b^T c\hat{c} + \hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T Ac + \hat{b}^T \hat{c} = \frac{1}{8}$$

$$b^T c(Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T (Ac + \hat{c}) = \frac{1}{8}$$

$$b^T c \frac{c^2}{2} + \hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T \frac{c^2}{2} = \frac{1}{8}$$

$$b^T c^3 + 2\hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$$

$$b^T c^3 + 3\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$$

Επομένως, η συνθήκη του δέντρου  $(t_{42})$  συμπίπτει με εκείνη του δέντρου  $(t_{41})$ .

Αντίστοιχα, για την συνθήκη του δέντρου  $(t_{44})$  με τη χρήση απλοποιητικών παραδοχών αυτή μετατρέπεται ισοδύναμα :

$$b^T A^2 c + b^T A\hat{c} + b^T \hat{A}c + \hat{b}^T Ac + \hat{b}^T \hat{c} = \frac{1}{24}$$

$$b^T A(Ac + \hat{c}) + b^T \hat{A}c + \hat{b}^T (Ac + \hat{c}) = \frac{1}{24}$$

$$b^T A \frac{c^2}{2} + b^T \hat{A}c + \hat{b}^T \frac{c^2}{2} = \frac{1}{24}$$

$$b^T Ac^2 + 2b^T \hat{A}c + 2\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$$

Επομένως, η συνθήκη του δέντρου  $(t_{44})$  συμπίπτει με τη συνθήκη του δέντρου  $(t_{43})$ .

Στην τέταρτη τάξη μένουν δύο μόνο συνθήκες, εκείνες που αντιστοιχούν στα δέντρα  $(t_{41})$  και  $(t_{43})$ .

Για την πέμπτη τάξη με τη χρήση της απλοποιητικής παραδοχής μένουν πέντε συνθήκες τάξης. Αναλυτικά, στη συνθήκη του δέντρου ( $t_{52}$ ) θα αντικαταστήσουμε την δεύτερη απλοποιητική παραδοχή και τότε προκύπτει ισοδύναμα :

$$b^T c^2 Ac + b^T c^2 \hat{c} + \hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T c Ac + 2\hat{b}^T c \hat{c} = \frac{1}{10}$$

$$b^T c^2 (Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T c (Ac + \hat{c}) = \frac{1}{10}$$

$$b^T c^2 \frac{c^2}{2} + \hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T c \frac{c^2}{2} = \frac{1}{10}$$

$$b^T c^4 + 2\hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T c c^2 = \frac{1}{5}$$

$$b^T c^4 + 4\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{5}$$

Επομένως, η συνθήκη του δέντρου ( $t_{52}$ ) συμπίπτει με εκείνη του δέντρου ( $t_{51}$ ).

Αντίστοιχα, για την συνθήκη του δέντρου ( $t_{55}$ ) αντικαθιστώντας τις απλοποιητικές παραδοχές μετατρέπεται ισοδύναμα :

$$b^T c A^2 c + b^T c A \hat{c} + b^T c \hat{A} c + \hat{b}^T c A c + \hat{b}^T c \hat{c} + \hat{b}^T A^2 c + \hat{b}^T A \hat{c} + \hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{30}$$

$$b^T c A (Ac + \hat{c}) + b^T c \hat{A} c + \hat{b}^T c (Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T A (Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{30}$$

$$b^T c A \frac{c^2}{2} + b^T c \hat{A} c + \hat{b}^T c \frac{c^2}{2} + \hat{b}^T A \frac{c^2}{2} + \hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{30}$$

$$b^T c A c^2 + 2b^T c \hat{A} c + \hat{b}^T c^3 + \hat{b}^T A c^2 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{15}$$

Επομένως, η συνθήκη του δέντρου ( $t_{55}$ ) συμπίπτει με τη συνθήκη του δέντρου ( $t_{53}$ ).

Η συνθήκη του δέντρου ( $t_{56}$ ) μετατρέπεται ισοδύναμα :

$$b^T AcAc + b^T Acc\hat{c} + b^T \hat{A}c^2 + b^T \hat{A}Ac + b^T \hat{A}\hat{c} + \hat{b}^T cAc + \hat{b}^T c\hat{c} = \frac{1}{40}$$

$$b^T Ac(Ac + \hat{c}) + b^T \hat{A}c^2 + b^T \hat{A}(Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T c(Ac + \hat{c}) = \frac{1}{40}$$

$$b^T Ac\frac{c^2}{2} + b^T \hat{A}c^2 + b^T \hat{A}\frac{c^2}{2} + \hat{b}^T c\frac{c^2}{2} = \frac{1}{40}$$

$$b^T Ac^3 + 2b^T \hat{A}c^2 + b^T \hat{A}c^2 + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

$$b^T Ac^3 + 3b^T \hat{A}c^2 + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

Επομένως, η συνθήκη του δέντρου ( $t_{56}$ ) συμπίπτει με τη συνθήκη του δέντρου ( $t_{57}$ ).

Για την συνθήκη του δέντρου ( $t_{59}$ ) με χρήση απλοποιητικών παραδοχών μετατρέπεται ισοδύναμα :

$$b^T A^3c + b^T A^2\hat{c} + b^T A\hat{A}c + b^T \hat{A}Ac + b^T \hat{A}\hat{c} + \hat{b}^T A^2c + \hat{b}^T A\hat{c} + \hat{b}^T \hat{A}c = \frac{1}{120}$$

$$b^T A^2(Ac + \hat{c}) + b^T \hat{A}(Ac + \hat{c}) + b^T \hat{A}Ac + \hat{b}^T A(Ac + \hat{c}) + \hat{b}^T \hat{A}c = \frac{1}{120}$$



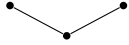
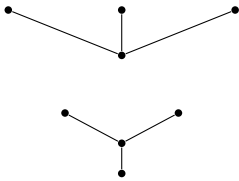
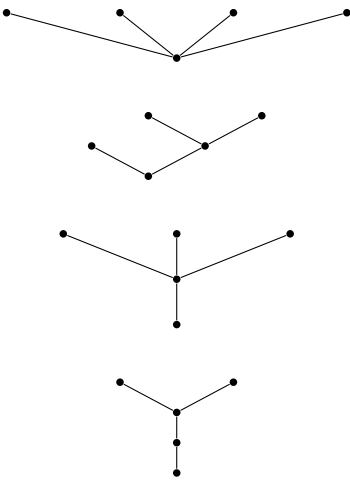
$$b^T A^2\frac{c^2}{2} + b^T \hat{A}\frac{c^2}{2} + b^T \hat{A}Ac + \hat{b}^T A\frac{c^2}{2} + \hat{b}^T \hat{A}c = \frac{1}{120}$$

$$b^T A^2c^2 + b^T \hat{A}c^2 + 2b^T \hat{A}Ac + \hat{b}^T Ac^2 + 2\hat{b}^T \hat{A}c = \frac{1}{60}$$

Επομένως, η συνθήκη του δέντρου ( $t_{59}$ ) συμπίπτει με τη συνθήκη του δέντρου ( $t_{58}$ ).

Τελικά, στην πέμπτη τάξη μένουν εκείνες οι συνθήκες που αντιστοιχούν στα δέντρα  $(t_{51})$ ,  $(t_{53})$ ,  $(t_{54})$ ,  $(t_{57})$  και  $(t_{58})$ .

Οι συνθήκες που μένουν μετά τη χρήση των απλοποιητικών παραδοχών συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα:

<i>Order</i>	<i>Tree</i>	<i>OrderCondition</i>
1		$b^T e = 1$
2		$b^T c + \hat{b}^T e = \frac{1}{2}$
3		$b^T c^2 + 2\hat{b}^T c = \frac{1}{3}$
4		$b^T c^3 + 3\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$ $b^T A c^2 + 2b^T \hat{A} c + \hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$
5		$b^T c^4 + 4\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{5}$ $b^T c A c^2 + 2b^T c \hat{A} c + \hat{b}^T A c^2 + 2\hat{b}^T \hat{A} c + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{15}$ $b^T A c^3 + 3b^T \hat{A} c^2 + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$ $b^T A^2 c^2 + 2b^T A \hat{A} c + b^T \hat{A} c^2 + \hat{b}^T A c^2 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{60}$

Πίνακας 5 : Δέντρα και συνθήκες μέχρι 5ης τάξης

### 3.3 Άμεση μέθοδος TDRK

Για να κατασκευάσουμε μία άμεση μέθοδο (explicit method) με τον ελάχιστο αριθμό υπολογισμών της συνάρτησης  $f$  χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις:

$$Y = e \otimes y_n + h(A \otimes I_N)F(Y) + h^2(\hat{A} \otimes I_N)C(Y)$$

$$y_{n+1} = y_n + h(b^T \otimes I_N)F(Y) + h^2(\hat{b}^T \otimes I_N)G(Y)$$

Η ειδική άμεση μέθοδος TDRK, η οποία αναφέρεται στη συνέχεια, περιλαμβάνει μόνο έναν υπολογισμό της συνάρτησης  $f$  σε κάθε στάδιο. Σε αυτή την περίπτωση, ο πίνακας των Runge - Kutta μεθόδων  $A$  έχει μηδενικά στοιχεία, εκτός από το διάνυσμα  $c$  της πρώτης στήλης. Το διάνυσμα  $b$  έχει όλα τα στοιχεία μηδέν εκτός του πρώτου, δηλαδή  $b = [1, 0, \dots, 0]^T$ .

Ο πίνακας που αντιστοιχεί στη μέθοδο είναι:

$$\begin{array}{c} c \parallel \hat{A} \\ \parallel \hat{b}^T \end{array}$$

όπου  $c_1 = 0$  και ο πίνακας  $\hat{A}$  είναι κάτω τριγωνικός, δηλαδή για τα στοιχεία του πίνακα ισχύει  $\hat{a}_{ij} = 0$  για  $i \leq j$ .

Η απλοποιητική παραδοχή σε αυτή την περίπτωση είναι:

$$\hat{A}e = \frac{c^2}{2}$$

Οι υποθέσεις που αναφέρθηκαν παραπάνω απλοποιούν τις συνθήκες τάξης σε αυτές που αναφέρονται στον πίνακα που δίνεται στη συνέχεια. Ο αριθμός των αγνώστων για μία μέθοδο  $s$  σταδίων είναι  $\frac{s(s+1)}{2}$ .

Order	Conditions
1	$b^T e = 1$
2	$\hat{b}^T e = \frac{1}{2}$
3	$\hat{b}^T c = \frac{1}{6}$
4	$\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$
5	$\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20} \quad \hat{b}^T \hat{A}c = \frac{1}{120}$

Πίνακας 6: Συνθήκες τάξης για την άμεση μέθοδο TDRK

Αναλυτικά, επειδή ο πίνακας  $A$  είναι ο μηδενικός πίνακας η απλοποιητική παραδοχή που προκύπτει για τις άμεσες μεθόδους TDRK είναι:

$$\hat{A}e = \frac{c^2}{2}$$

Επιπλέον, ισχύει η σχέση

$$\hat{A}e = \hat{c}$$

Στην άμεση μέθοδο που έχουμε παρατηρούμε πως  $b^T = [1, 0, \dots, 0]$  και από το διάνυσμα  $c$  το πρώτο στοιχείο είναι μηδέν, δηλαδή  $c_1 = 0$ . Προκύπτει λοιπόν πως:

$$b^T c = 0$$

Σύμφωνα με τις παραπάνω σχέσεις που αναφέραμε προκύπτουν οι συνθήκες τάξης για τις άμεσες μεθόδους TDRK. Οι σχέσεις που προκύπτουν σε κάθε τάξη αναφέρονται στη συνέχεια:

Στην πρώτη τάξη, η συνθήκη τάξης είναι:

$$b^T e = 1$$

Στη δεύτερη τάξη, η συνθήκη τάξης μετατρέπεται ισοδύναμα:

$$b^T c + \hat{b}^T e = \frac{1}{2}$$

$$\hat{b}^T e = \frac{1}{2}$$

Για την τρίτη τάξη οι συνθήκες τάξης είναι δύο και με κατάλληλες πράξεις μετατρέπονται ισοδύναμα:

Πρώτη συνθήκη:

$$b^T c^2 + 2\hat{b}^T c = \frac{1}{3}$$

$$2\hat{b}^T c = \frac{1}{3}$$

$$\hat{b}^T c = \frac{1}{6}$$

Δεύτερη συνθήκη :

$$b^T A c + b^T \hat{c} + \hat{b}^T c = \frac{1}{6}$$

$$\hat{b}^T c = \frac{1}{6}$$

Τελικά, η συνθήκη τάξης που μένει είναι :

$$\hat{b}^T c = \frac{1}{6}$$

Για την τέταρτη τάξη οι τέσσερις συνθήκες που έχουμε παρουσιάσει με χρήση των απλοποιητικών παραδοχών μετατρέπονται ισοδύναμα :

Πρώτη συνθήκη :

$$b^T c^3 + 3\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$$

$$3\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$$

$$\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$$



Δεύτερη συνθήκη :

$$b^T c A c + b^T c \hat{c} + \hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T A c + \hat{b}^T \hat{c} = \frac{1}{8}$$

$$\hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T \hat{c} = \frac{1}{8}$$

$$\hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T \hat{A} e = \frac{1}{8}$$

$$\hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T \frac{c^2}{2} = \frac{1}{8}$$

$$2\hat{b}^T c^2 + \hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$$

$$3\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{4}$$

$$\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$$

Τρίτη συνθήκη :

$$b^T A c^2 + 2b^T \hat{A} c + \hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$$

$$\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$$

Τέταρτη συνθήκη :

$$b^T A^2 c + b^T A \hat{c} + b^T \hat{A} c + \hat{b}^T A c + \hat{b}^T \hat{c} = \frac{1}{24}$$

$$\hat{b}^T \hat{c} = \frac{1}{24}$$

$$\hat{b}^T \hat{A}e = \frac{1}{24}$$

$$\hat{b}^T \frac{c^2}{2} = \frac{1}{24}$$

$$\hat{b}^T c^2 = \frac{2}{24}$$

$$\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$$

Τελικά, η συνθήκη για την τέταρτη τάξη είναι :

$$\hat{b}^T c^2 = \frac{1}{12}$$

Για την πέμπτη τάξη οι εννέα συνθήκες που έχουμε παρουσιάσει με χρήση της απλοποιητικής παραδοχής μετατρέπονται ισοδύναμα :

Πρώτη συνθήκη :

$$b^T c^4 + 4\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{5}$$

$$4\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{5}$$

$$\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

Δεύτερη συνθήκη :

$$b^T c^2 A c + b^T c^2 \hat{c} + \hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T c A c + 2\hat{b}^T c \hat{c} = \frac{1}{10}$$

$$\hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T c \hat{c} = \frac{1}{10}$$

$$\hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T c \hat{A} e = \frac{1}{10}$$

$$\hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T c \frac{c^2}{2} = \frac{1}{10}$$

$$\hat{b}^T c^3 + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{10}$$

$$2\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{10}$$

$$\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

Τρίτη συνθήκη :

$$b^T c A c^2 + 2b^T c \hat{A} c + \hat{b}^T c^3 + \hat{b}^T A c^2 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{15}$$

$$\hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{15}$$

Επειδή  $\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$  και  $\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{120}$  η προηγούμενη εξίσωση είναι συνδιασμός αυτών των δύο συνθηκών καθώς προκύπτει :

$$\hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{20} + 2\frac{1}{120} = \frac{1}{20} + \frac{1}{60} = \frac{4}{60} = \frac{1}{15}$$

Τέταρτη συνθήκη:

$$b^T c A^2 c + b^T c A \hat{c} + b^T c \hat{A} c + \hat{b}^T c A c + \hat{b}^T A \hat{c} + \hat{b}^T c \hat{c} + \hat{b}^T A^2 c + \hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{30}$$

$$\hat{b}^T c \hat{c} + \hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{30}$$

$$\hat{b}^T c \hat{A} c + \hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{30}$$

$$\hat{b}^T c \frac{c^2}{2} + \hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{30}$$

$$\hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{15}$$

Επειδή  $\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$  και  $\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{120}$  η προηγούμενη εξίσωση είναι συνδιασμός αυτών των δύο συνθηκών καθώς προκύπτει:

$$\hat{b}^T c^3 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{20} + 2\frac{1}{120} = \frac{1}{20} + \frac{1}{60} = \frac{4}{60} = \frac{1}{15}$$

Πέμπτη συνθήκη:

$$b^T A^2 c^2 + 2b^T \hat{c} A c + b^T \hat{c}^2 + 2\hat{b}^T c A c + 2\hat{b}^T c \hat{c} = \frac{1}{20}$$

$$2\hat{b}^T c \hat{c} = \frac{1}{20}$$

$$2\hat{b}^T c \hat{A} c = \frac{1}{20}$$

$$2\hat{b}^T c \frac{c^2}{2} = \frac{1}{20}$$

$$\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

Έκτη συνθήκη:

$$b^T A c^3 + 3b^T \hat{A} c^2 + \hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

$$\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

Έβδομη συνθήκη:

$$b^T A c A c + b^T A c \hat{c} + b^T \hat{A} c^2 + b^T \hat{A} A c + b^T \hat{A} \hat{c} + \hat{b}^T c A c + \hat{b}^T c \hat{c} = \frac{1}{40}$$

$$\hat{b}^T c \hat{c} = \frac{1}{40}$$

$$\hat{b}^T c \frac{c^2}{2} = \frac{1}{40}$$

$$\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

Όγδοη συνθήκη:

$$b^T A^2 c^2 + 2b^T A \hat{A} c + b^T \hat{A} c^2 + \hat{b}^T A c^2 + 2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{60}$$

$$2\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{60}$$

$$\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{120}$$

Ένατη συνθήκη :

$$b^T A^3 c + b^T A^2 \hat{c} + b^T A \hat{A} + b^T \hat{A} A c + b^T \hat{A} \hat{c} + \hat{b}^T \hat{A} c + \hat{b}^T A^2 c + \hat{b}^T A \hat{c} = \frac{1}{120}$$

$$\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{120}$$

Τελικά, οι συνθήκες που απομένουν στην πέμπτη τάξη είναι :

$$\hat{b}^T c^3 = \frac{1}{20}$$

$$\hat{b}^T \hat{A} c = \frac{1}{120}$$

## Κεφάλαιο 4

### Κατασκευή TDRK μεθόδων

Στις άμεσες μεθόδους TDRK ο πίνακας Butcher παίρνει τη μορφή:

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

Με την χρήση της απλοποιητικής παραδοχής  $\hat{A}e = \frac{c^2}{2}$  οι συνθήκες τάξης απλοποιούνται όπως φαίνεται στον Πίνακα 4.

#### 4.1 Μέθοδοι ενός σταδίου

Σε αυτή την περίπτωση ο πίνακας παίρνει τη μορφή:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline & \hat{b}_1 \end{array}$$

Αν επιλεγεί  $\hat{b}_1 = \frac{1}{2}$  τότε προκύπτει μία μέθοδος δεύτερης τάξης που απαιτεί έναν υπολογισμό των  $f$  και  $g$  και έχει τη μορφή:

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_n) + \frac{h^2}{2}g(y_n)$$

Η μέθοδος αυτή έχει την ίδια συνάρτηση ευστάθειας με μία άμεση μέθοδο Runge Kutta δύο σταδίων δεύτερης τάξης που απαιτεί δύο υπολογισμούς της συνάρτησης  $f$ .

## 4.2 Μέθοδοι δύο σταδίων

Στις άμεσες μεθόδους δύο σταδίων ο πίνακας Butcher που προκύπτει μετά και τη χρήση της απλοποιητικής παραδοχής είναι :

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ c_2 & \frac{c_2^2}{2} \\ \hline & \hat{b}_1 \quad \hat{b}_2 \end{array}$$

Με δύο στάδια μπορούν να κατασκευαστούν μέθοδοι έως και τέταρτης τάξης. Αυτό σημαίνει πως για την κατασκευή τέταρτης τάξης μεθόδου με δύο στάδια θα πρέπει να ικανοποιούνται οι συνθήκες από πρώτη μέχρι τέταρτη τάξη που δίνονται στον πίνακα 4.

Οι συνθήκες που θα πρέπει να ικανοποιούνται είναι :

$$\hat{b}_1 + \hat{b}_2 = 1$$

$$\hat{b}_2 c_2 = \frac{1}{6}$$

$$\hat{b}_2 c_2^2 = \frac{1}{12}$$

Αν επιλέξουμε όπου  $c_2 = \frac{1}{2}$  τότε :

$$a_{21} = \frac{c_2^2}{2} = \frac{1}{8}$$

$$\hat{b}_2 c_2 = \frac{1}{6} \rightarrow \hat{b}_2 \frac{1}{2} = \frac{1}{6} \rightarrow \hat{b}_2 = \frac{1}{3}$$

$$\hat{b}_1 + \hat{b}_2 = \frac{1}{2} \rightarrow \hat{b}_1 + \frac{1}{3} = \frac{1}{2} \rightarrow \hat{b}_1 = \frac{1}{6}$$

Ο πίνακας για τη μέθοδο αυτή των δύο σταδίων τέταρτης τάξης είναι :



$$\begin{array}{c|cc}
 0 & & \\
 \frac{1}{2} & & \frac{1}{8} \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3}
 \end{array}$$

Η μέθοδος που προκύπτει είναι:

$$\begin{aligned}
 Y &= y_n + \frac{h}{2}f(y_n) + \frac{h^2}{8}g(y_n) \\
 y_{n+1} &= y_n + hf(y_n) + \frac{h^2}{6}g(y_n) + \frac{h^2}{3}g(Y)
 \end{aligned}$$

Παρατηρούμε πως η μέθοδος αυτή χρειάζεται έναν υπολογισμό της  $f$  και δύο υπολογισμούς της  $g$ , ενώ η άμεση μέθοδος τεσσάρων σταδίων Runge Kutta τέταρτης τάξης απαιτεί τέσσερις υπολογισμούς της  $f$ . Η συνάρτηση ευστάθειας για τις δύο αυτές μεθόδους είναι η ίδια.

### 4.3 Μέθοδοι τριών σταδίων

Στις άμεσες μεθόδους τριών σταδίων ο πίνακας Butcher που προκύπτει μετά και τη χρήση της απλοποιητικής παραδοχής είναι:

$$\begin{array}{c|ccc}
 & & & \\
 c_2 & & \frac{c_2^2}{2} & \\
 c_3 & \frac{c_3^2}{2} - \hat{a}_{32} & \hat{a}_{32} & \\
 \hline
 & \hat{b}_1 & \hat{b}_2 & \hat{b}_3
 \end{array}$$

Με τη χρήση της απλοποιητικής παραδοχής έμειναν έξι άγνωστοι να υπολογιστούν στη μέθοδο. Με έξι αγνώστους μπορούν να ικανοποιηθούν οι συνθήκες για πέμπτη τάξη. Θα προκύψει ένα σύστημα με πέντε εξισώσεις και μία παράμετρο:

$$\hat{b}_1 = \frac{10c_3^2 - 8c_3 + 1}{12c_3(5c_3 - 3)}$$

$$\hat{b}_2 = \frac{25(2c_3 - 1)^3}{12(5c_3 - 3)(10c_3^2 - 10c_3 + 3)}$$

$$\hat{b}_3 = \frac{1}{12c_3(10c_3^2 - 10c_3 + 3)}$$

$$\hat{a}_{32} = \frac{c_3(2c_3 - 1)(10c_3^2 - 10c_3 + 3)}{2(5c_3 - 3)}$$

$$c_2 = \frac{5c_3 - 3}{5(2c_3 - 1)}$$

Η μέθοδος αυτή απαιτεί έναν υπολογισμό της συνάρτησης  $f$  και τρεις υπολογισμούς της  $g$  σε κάθε στάδιο. Η μέθοδος TDRK τριών σταδίων πέμπτης τάξης μπορεί να συγκριθεί με την άμεση μέθοδο Runge-Kutta έξι σταδίων που απαιτεί έξι υπολογισμούς της  $f$ .

Κάποιες μέθοδοι που προκύπτουν είναι :

Για  $c_3 = 1$ :

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{2}{5} & \frac{2}{25} & \\ 1 & \frac{-1}{4} & \frac{3}{4} \\ \hline & \frac{1}{8} & \frac{25}{72} & \frac{1}{36} \end{array}$$

Για  $c_3 = \frac{3}{4}$ :

$$\begin{array}{c|cc}
 0 & & \\
 \frac{3}{10} & \frac{9}{200} & \\
 \frac{3}{4} & 0 & \frac{9}{32} \\
 \hline
 & \frac{5}{54} & \frac{25}{81} & \frac{8}{81}
 \end{array}$$

Για  $c_3 = \frac{4}{5}$ :

$$\begin{array}{c|cc}
 0 & & \\
 \frac{1}{3} & \frac{1}{18} & \\
 \frac{4}{5} & \frac{-2}{125} & \frac{42}{125} \\
 \hline
 & \frac{5}{48} & \frac{9}{28} & \frac{25}{336}
 \end{array}$$

Για  $c_3 = \frac{2}{3}$ :

$$\begin{array}{c|cc}
 0 & & \\
 \frac{1}{5} & \frac{1}{50} & \\
 \frac{2}{3} & \frac{-1}{27} & \frac{7}{27} \\
 \hline
 & \frac{1}{24} & \frac{25}{84} & \frac{9}{56}
 \end{array}$$

Για  $c_3 = \frac{5+\sqrt{5}}{10}$ :

0			
$\frac{5-\sqrt{5}}{10}$	$\frac{3-\sqrt{5}}{20}$		
$\frac{5+\sqrt{5}}{10}$	0	$\frac{3+\sqrt{5}}{20}$	
	$\frac{1}{12}$	$\frac{5+\sqrt{5}}{24}$	$\frac{5-\sqrt{5}}{24}$

## 4.4 Μέθοδοι τεσσάρων σταδίων

Στις άμεσες μεθόδους τεσσάρων σταδίων ο πίνακας Butcher που προκύπτει μετά και τη χρήση της απλοποιητικής παραδοχής είναι :

0				
$c_2$	$\frac{c_2^2}{2}$			
$c_3$	$\frac{c_3^2}{2} - a_{32}$	$a_{32}$		
$c_4$	$\frac{c_4^2}{2} - a_{42} - a_{43}$	$a_{42}$	$a_{43}$	
	$\hat{b}_1$	$\hat{b}_2$	$\hat{b}_3$	$\hat{b}_4$

Με τη χρήση της απλοποιητικής παραδοχής έμειναν οκτώ άγνωστοι να υπολογιστούν στη μέθοδο. Μπορούν να ικανοποιηθούν οι συνθήκες για έκτη τάξη. Επομένως, προκύπτει ένα σύστημα με επτά εξισώσεις και μία παράμετρο.

$$\hat{b}_1 = \frac{\frac{1}{2}c_2c_3c_4 - \frac{1}{6}(c_2c_3 + c_3c_4 + c_2c_4) + \frac{1}{12}(c_2 + c_3 + c_4) - \frac{1}{20}}{c_2c_3c_4}$$

$$\hat{b}_2 = \frac{\frac{1}{6}c_3c_4 - \frac{1}{12}(c_3 + c_4) + \frac{1}{20}}{c_2(c_3 - c_2)(c_4 - c_2)}$$

$$\hat{b}_3 = \frac{-\frac{1}{6}c_2c_4 + \frac{1}{12}(c_2 + c_4) - \frac{1}{20}}{c_3(c_3 - c_2)(c_4 - c_3)}$$

$$\hat{b}_4 = \frac{\frac{1}{6}c_2c_3 - \frac{1}{12}(c_2 + c_3) + \frac{1}{20}}{c_4(c_4 - c_3)(c_4 - c_2)}$$

$$\hat{a}_{32} = \frac{-c_3(c_3 - c_2)(3c_4 - 2)}{6c_2(10c_2c_4 - 5(c_2 + c_4) + 3)}$$

$$\hat{a}_{42} = \frac{c_4(c_4 - c_2)((c_3 - c_2)(2 - 3c_3) - (1 - 3c_2)(c_4 - c_3))}{6c_2(c_3 - c_2)(10c_2c_3 - 5(c_2 + c_3) + 3)}$$

$$\hat{a}_{43} = \frac{c_4(c_4 - c_2)(c_4 - c_3)(1 - 3c_2)}{6c_3(c_3 - c_2)(10c_2c_3 - 5(c_2 + c_3) + 3)}$$

Στη συνέχεια δίνονται ορισμένες μέθοδοι έκτης τάξης με τέσσερα στάδια.

Για  $c_4 = \frac{2}{3}$  προκύπτει η μέθοδος:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{18} & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{8} & & \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{9} & \frac{1}{9} & \\ \hline & \frac{11}{120} & \frac{9}{20} & \frac{-4}{15} \quad \frac{9}{40} \end{array}$$

Για  $c_4 = 1$  προκύπτει η μέθοδος:

0				
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{32}$			
$\frac{2}{3}$	$\frac{-2}{81}$	$\frac{20}{81}$		
1	$\frac{5}{4}$	$\frac{-6}{5}$	$\frac{9}{20}$	
	$\frac{3}{40}$	$\frac{64}{225}$	$\frac{27}{200}$	$\frac{1}{180}$

Για  $c_4 = \frac{5+\sqrt{5}}{10}$  προκύπτει η μέθοδος:

0				
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{18}$			
$\frac{5-\sqrt{5}}{10}$	$\frac{5-\sqrt{5}}{100}$	$\frac{5-2\sqrt{5}}{50}$		
$\frac{5+\sqrt{5}}{10}$	$\frac{5+\sqrt{5}}{100}$	$\frac{5+2\sqrt{5}}{50}$	0	
	$\frac{1}{12}$	0	$\frac{5+\sqrt{5}}{24}$	$\frac{5-\sqrt{5}}{24}$

## 4.5 Μέθοδοι πέντε σταδίων

Στις άμεσες μεθόδους πέντε σταδίων υπάρχουν δεκατρείς συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται και μπορούν να προκύψουν συνθήκες έως και έβδομης τάξης. Μετά τη χρήση απλοποιητικών παραδοχών προκύπτει ο πίνακας:

0						
$c_2$	$\frac{c_2^2}{2}$					
$c_3$	$\frac{c_3^2}{2} - a_{32}$	$a_{32}$				
$c_4$	$\frac{c_4^2}{2} - a_{42} - a_{43}$	$a_{42}$	$a_{43}$			
$c_5$	$\frac{c_5^2}{2} - a_{52} - a_{53} - a_{54}$	$a_{52}$	$a_{53}$	$a_{54}$		
	$\hat{b}_1$	$\hat{b}_2$	$\hat{b}_3$	$\hat{b}_4$	$\hat{b}_5$	

Στη συνέχεια δίνονται τρεις μέθοδοι έβδομης τάξης με πέντε στάδια :

Η πρώτη μέθοδος είναι :

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c}
 0 & & & & & \\
 \frac{2}{7} & \frac{2}{49} & & & & \\
 \frac{2}{5} & \frac{2}{25} & & & & \\
 \frac{4}{7} & \frac{4}{49} & \frac{4}{49} & & & \\
 1 & \frac{-159}{832} & \frac{1715}{832} & \frac{-1875}{832} & \frac{735}{832} & \\
 \hline
 & \frac{71}{960} & \frac{2401}{4800} & \frac{-625}{1728} & \frac{2401}{8640} & \frac{13}{1350}
 \end{array}$$

Η δεύτερη μέθοδος είναι :

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c}
 0 & & & & & \\
 \frac{2}{7} & \frac{2}{49} & & & & \\
 \frac{3\pm\sqrt{2}}{7} & \frac{3\pm\sqrt{2}}{84} & \frac{45\mp 29\sqrt{2}}{588} & & & \\
 \frac{3\pm\sqrt{2}}{7} & \frac{3\pm\sqrt{2}}{84} & \frac{45\pm 29\sqrt{2}}{588} & & & \\
 1 & \frac{-1}{4} & \frac{-35}{12} & \frac{11\pm 6\sqrt{2}}{6} & \frac{11\mp 6\sqrt{2}}{6} & \\
 \hline
 & \frac{1}{15} & 0 & \frac{51\pm 10\sqrt{2}}{240} & \frac{51\mp 10\sqrt{2}}{240} & \frac{1}{120}
 \end{array}$$

Η τρίτη μέθοδος είναι :

0					
$\frac{2}{5}$	$\frac{2}{25}$				
$\frac{3-\sqrt{2}}{7}$	$\frac{79}{1372} - \frac{107\sqrt{2}}{4116}$	$\frac{75}{1372} - \frac{145\sqrt{2}}{4116}$			
$\frac{3+\sqrt{2}}{7}$	$\frac{683}{28812} + \frac{181\sqrt{2}}{28812}$	$\frac{1515}{67228} + \frac{185\sqrt{2}}{201684}$	$\frac{3328}{50421} + \frac{908\sqrt{2}}{16807}$		
1	$\frac{-5}{12} + \frac{\sqrt{2}}{3}$	$\frac{-45}{28} + \frac{5\sqrt{2}}{7}$	$\frac{29}{42} - \frac{\sqrt{2}}{21}$	$\frac{11}{6} - \sqrt{2}$	
	$\frac{1}{15}$	0	$\frac{17}{80} + \frac{\sqrt{2}}{24}$	$\frac{17}{80} - \frac{\sqrt{2}}{24}$	$\frac{1}{120}$



## Κεφάλαιο 5

# Εφαρμογή στο πρόβλημα του Rigid Body

### 5.1 Rigid Body

Ένα άκαμπτο σώμα είναι ένα συμπαγές σώμα στο οποίο η παραμόρφωση είτε είναι μηδενική είτε είναι ελάχιστη ώστε να μπορεί να αγνοηθεί. Σε ένα άκαμπτο σώμα η απόσταση δύο σημείων παραμένει σταθερή στο χρόνο ανεξάρτητα από τις έξωτερικές δυνάμεις που ασκούνται σε αυτό.

Η θέση ενός άκαμπτου σώματος μπορεί να θεωρηθεί η θέση όλων των σωματιδίων από τα οποία αποτελείται. Επειδή το σώμα είναι άκαμπτο όλα τα σωματίδια που το αποτελούν διατηρούν ίση απόσταση μεταξύ τους.

Αυτό σημαίνει πως για να περιγραφεί η θέση του αρκεί να περιγραφεί η θέση τουλάχιστον τριών μη γραμμικών σωματιδίων. Έτσι, μπορεί να βρεθεί η θέση των άλλων σωματιδίων με την προϋπόθεση ότι είναι γνωστή και χρονικά αναλλοίωτη η θέση τους σε σχέση με τα τρία αυτά σωματίδια.

Οι εξισώσεις που περιγράφουν την κίνηση ενός στερεού σώματος χωρίς δυνάμεις είναι:

$$q' = f(q) = ((a - b)q_2q_3, (1 - a)q_3q_1, (b - 1)q_1q_2)^T$$

με αρχικές τιμές  $q(0) = (0, 1, 1)^T$  και τιμές παραμέτρων  $a = 1 + \frac{1}{\sqrt{1.51}}$  και  $b = 1 - \frac{0.51}{\sqrt{1.51}}$ .

Η ακριβής λύση αυτού του συστήματος δίνεται από:

$$q(t) = (\sqrt{1.51}sn(t, 0.51), cn(t, 0.51), dn(t, 0.51))^T$$

όπου είναι περιοδική με περίοδο  $T = 7.45056320933095$  και τα  $sn, cn, dn$  αντιπροσωπεύουν τα στοιχεία της ελλειπτικής συνάρτησης Jacobi .

$$\text{Επιπλέον ισχύει ότι } G_1(q) = q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 \text{ και } G_2(q) = q_1^2 + bq_2^2 + aq_3^2$$

## 5.2 Jacobi Elliptic functions

Οι συναρτήσεις Jacobi elliptic ικανοποιούν μη γραμμικές διαφορικές εξισώσεις που συναντώνται συχνά στη μηχανική σωματιδίων.

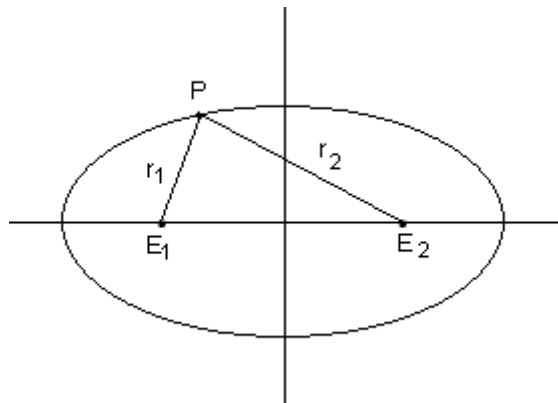
Η έλλειψη είναι ο γεωμετρικός τόπος των σημείων  $P$  του επιπέδου των οποίων το άθροισμα των αποστάσεων από δύο σταθερά σημεία  $E_1$  και  $E_2$  είναι σταθερό. Τα σημεία  $E_1$  και  $E_2$  ονομάζονται εστίες της έλλειψης. Το σταθερό άθροισμα των αποστάσεων κάθε σημείου από τις εστίες θα το συμβολίσουμε με  $2a$  και την απόσταση των εστιών  $2c$ .

Θα πρέπει να καθοριστεί η απόσταση  $2c$  μεταξύ των δύο εστιών. Μετακινούμε το σημείο  $P$ , όταν το  $P$  είναι στον άξονα  $x$  προς τα δεξιά τότε:  $r_1 = a + c$ ,  $r_2 = a - c$ . Σε αυτή την περίπτωση το άθροισμα είναι  $r_1 + r_2 = a + c + a - c = 2a$ . Μετακινώντας το σημείο  $P$  στον άξονα  $y$  παρατηρούμε πως  $r_1 = r_2 = a$  και τότε  $a^2 = b^2 + c^2$ .

Η εκκενρότητα είναι μία παράμετρος που καθορίζει τη μορφή που θα έχει η έλλειψη και είναι ο λόγος  $k = \frac{c}{a}$ .

Η εξίσωση της έλλειψης είναι:

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 = 1 \tag{5.1}$$



Αν ορίσουμε  $b = 1$  τότε η εξίσωση της έλλειψης θα έχει τη μορφή:

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + y^2 = 1 \quad (5.2)$$

Σε αυτή την περίπτωση η εκκεντρότητα είναι:  $k = \frac{\sqrt{a^2-1}}{a}$ .

Επειδή η ακτίνα δεν είναι σταθερή η εξίσωση του μοναδιαίου κύκλου θα είναι  $x^2 + y^2 = 1$ . Αντικαθιστώντας στην περίπτωση της έλλειψης:

$$\frac{x^2}{a^2} + y^2 = 1$$

$$x^2 + y^2 = r^2$$

Υπάρχουν 3 βασικές συναρτήσεις που συμβολίζονται με  $sn, cn, dn$  και είναι αντίστοιχες των ημίτονο και συνημίτονο της κυκλικής υπόθεσης. Οι τιμές των συναρτήσεων αυτών καθορίζονται από τους λόγους:

$$sn = y$$

$$cn = \frac{x}{a}$$

$$dn = \frac{r}{a}$$

Σύμφωνα με τα παραπάνω η εξίσωση ( 5.2 ) γίνεται :

$$cn^2 + sn^2 = 1$$

Στο MATLAB οι συναρτήσεις  $cn$ ,  $sn$  και  $dn$  ορίζονται από τις εντολές :

$$[SN, CN, DN] = \text{ellipj}(U, M)$$

$$[SN, CN, DN] = \text{ellipj}(U, M, tol)$$

Με τη χρήση της πρώτης εντολής επιστρέφονται οι συναρτήσεις Jacobi  $cn$ ,  $sn$  και  $dn$  που έχουν υπολογιστεί για τα στοιχεία των ορισμάτων  $U$  και  $M$ . Οι τιμές των ορισμάτων πρέπει να έχουν το ίδιο μέγεθος ή σε κλιμακωτή μορφή. Η δεύτερη εντολή υπολογίζει τις ελλειπτικές συναρτήσεις Jacobi σύμφωνα με την ακρίβεια που ορίζουμε ( $tol$ ).

Στην περίπτωση του Rigid Body η εντολή για τις συναρτήσεις Jacobi είναι  $[sn, cn, dn] = \text{ellipj}(X, 0.51)$  και δέχεται ως ορίσματα ένα διάνυσμα  $x$  που περιέχει τις τιμές των σημείων διαμέρισης και την τιμή 0,51 που έχουμε πάρει από το πρόβλημα του Rigid Body.

### 5.3 Αριθμητικά αποτελέσματα

Υλοποιήθηκαν έντεκα μέθοδοι, τρεις μέθοδοι Runge - Kutta και οκτώ μέθοδοι Two Derivative Runge - Kutta σε MATLAB . Έγινε εφαρμογή στο πρόβλημα των άκαμπτων σωμάτων. Οι μέθοδοι που υλοποιήθηκαν είναι :

- Μία μέθοδος RK με τέσσερα στάδια 4ης τάξης.
- Μία μέθοδος RK με έξι στάδια 5ης τάξης.
- Μία μέθοδος RK με επτά στάδια 6ης τάξης.
- Τρεις μέθοδοι TDRK με τρία στάδια 5ης τάξης.
- Τρεις μέθοδοι TDRK με τέσσερα στάδια 6ης τάξης.
- Δύο μέθοδοι TDRK με πέντε στάδια 7ης τάξης.

Σε κάθε μέθοδο χρησιμοποιήθηκε το διάστημα ολοκλήρωσης  $[0,100]$  και χρησιμοποιήθηκαν πέντε διαφορετικά σημεία διαμέρισης. Σε κάθε περίπτωση το βήμα ολοκλήρωσης είναι:

- Για 200 σημεία το βήμα ολοκλήρωσης  $h = 0,5$ .
- Για 500 σημεία το βήμα ολοκλήρωσης  $h = 0,2$ .
- Για 1000 σημεία το βήμα ολοκλήρωσης  $h = 0,1$ .
- Για 2000 σημεία το βήμα ολοκλήρωσης  $h = 0,05$ .
- Για 5000 σημεία το βήμα ολοκλήρωσης  $h = 0,02$ .

Υπολογίστηκε το σφάλμα της προσεγγιστικής λύσης που δόθηκε από τις μεθόδους σε σύγκριση με την πραγματική λύση και τα αποτελέσματα δίνονται στο επόμενο πίνακα.

	N=200 h=0,5	N=500 h=0,2	N=1000 h=0,1	N=2000 h=0,05	N=5000 h=0,02
TDRK3s5o_1	0.0424	4.6055e-004	1.4579e-005	4.5787e-007	4.7056e-009
TDRK3s5o_2	0.0188	1.7245e-004	5.3522e-006	1.6744e-007	1.7212e-009
TDRK3s5o_3	0.0231	2.1685e-004	6.7480e-006	2.1127e-007	2.1721e-009
RK4s4o	0.0960	0.0020	1.1311e-004	6.6432e-006	1.6335e-007
TDRK4s6o_1	0.0027	2.7218e-006	1.2692e-008	3.7968e-010	6.6964e-012
TDRK4s6o_2	0.0012	1.6640e-006	4.2377e-009	1.2911e-010	6.1061e-012
TDRK4s6o_3	0.0014	1.2613e-006	1.0462e-008	3.0118e-010	6.6445e-012
TDRK5s7o_1	0.0011	2.0440e-006	1.6285e-008	1.2346e-010	5.4942e-012
TDRK5s7o_2	9.6294e-005	2.2116e-007	1.8283e-009	1.0392e-011	4.9391e-012
RK6s5o	0.0190	2.1245e-004	6.7584e-006	2.1211e-007	2.1780e-009
RK7s6o	0.0064	4.4159e-006	1.3992e-007	3.4375e-009	2.0020e-011

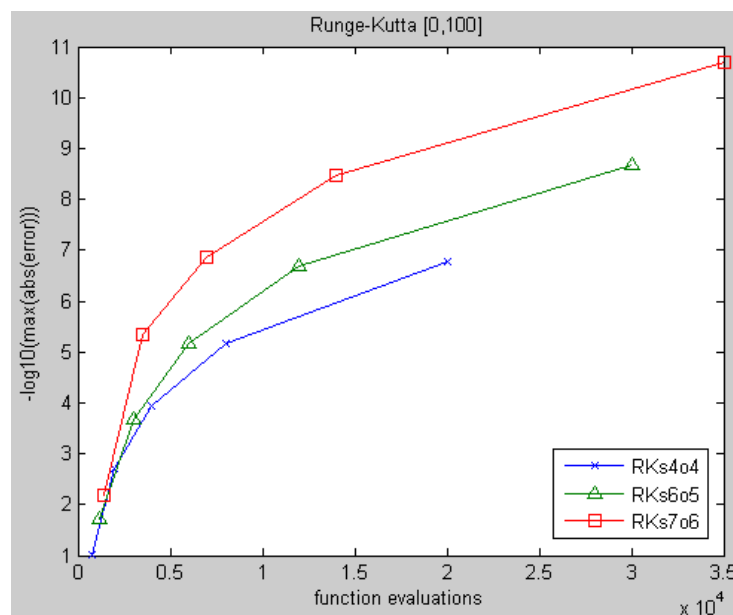
Από τον πίνακα παρατηρούμε πως όσο αυξάνονται τα σημεία διαμέρισης τόσο αυξάνεται και η ακρίβεια του αποτελέσματος. Σε κάθε μέθοδο παρατηρούμε πως όσο αυξάνουμε τα σημεία τόσο το σφάλμα γίνεται μικρότερο. Συγκρίνοντας τις μεθόδους μεταξύ τους βλέπουμε:

Στις μεθόδους Runge - Kutta όσο αυξάνονται τα στάδια και η τάξη μιας μεθόδου τόσο το σφάλμα μικραίνει. Ενδεικτικά, όταν τα σημεία διαμέρισης είναι

200 η μέθοδος Runge - Kutta 4ης τάξης δίνει σφάλμα 0.096, η μέθοδος Runge - Kutta 5ης τάξης έχει σφάλμα 0.019 και η μέθοδος Runge - Kutta 6ης τάξης δίνει σφάλμα 0.0064. Ενώ, όταν η διαμέριση είναι για 5000 σημεία τότε η μέθοδος Runge - Kutta 4ης τάξης δίνει ακρίβεια 7 δεκαδικών ψηφίων, η μέθοδος Runge - Kutta 5ης τάξης εννέα δεκαδικών ψηφίων και η μέθοδος Runge - Kutta 6ης τάξης 11 δεκαδικών ψηφίων. Επομένως, βλέπουμε πως το αποτέλεσμα είναι πιο κοντά στην πραγματική τιμή όταν η τάξη και τα στάδια της μεθόδου είναι περισσότερα.

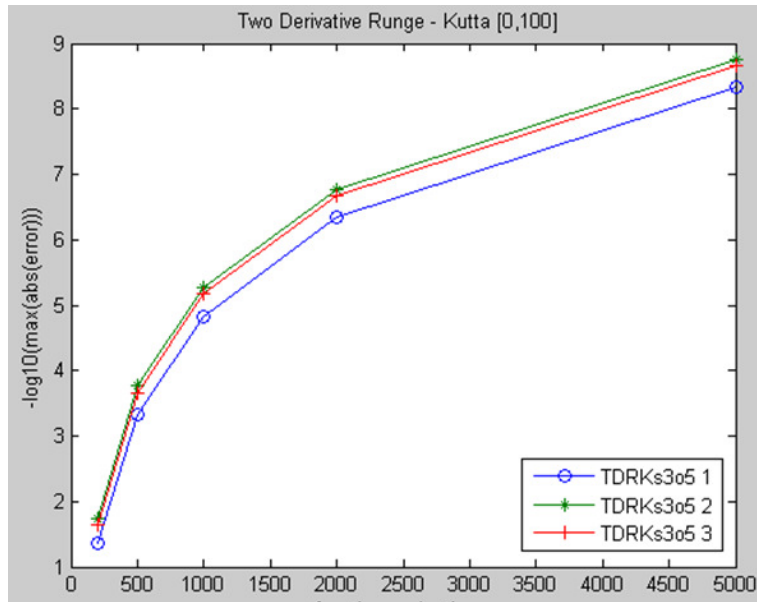
Αντίστοικα, στις μεθόδους TDRK παρατηρούμε πως μεταξύ μεθόδων που έχουν ίδια τάξη και στάδια η διαφορά που προκύπτει στο σφάλμα είναι μικρή. Για τις μεθόδους με τρία στάδια 5ης τάξης λίγο καλύτερη ακρίβεια δίνει η δεύτερη μέθοδος που προγραμματίσαμε. Το ίδιο συμβαίνει και στις τρεις μεθόδους τεσσάρων σταδίων 6ης τάξης. Από τις μεθόδους TDRK η δεύτερη μέθοδος 5 σταδίων και 7ης τάξης είναι η καλύτερη καθώς παρατηρούμε πως ακόμα και για 200 σημεία η μέθοδος αυτή δίνει ακρίβεια 5 δεκαδικών ψηφίων. Από τον πίνακα φαίνεται πως όλες οι μεθοδοι TDRK 6ης τάξης δίνουν μεγαλύτερη ακρίβεια από εκείνες 5ης τάξης. Σαν αποτέλεσμα μπορούμε να θεωρήσουμε πως όσο αυξάνονται τα στάδια της μεθόδου τόσο μειώνεται το σφάλμα.

Συγκρίνοντας τις μεθόδους Runge - Kutta μεταξύ τους όπως βλέπουμε και στο γράφημα όσο περισσότερα σημεία διαμέρισης έχουμε επιλέξει τόσο καλύτερη προσέγγιση έχουμε. Επίσης, καλύτερη μέθοδος είναι εκείνη που έχει περισσότερα στάδια και μεγαλύτερη τάξη.

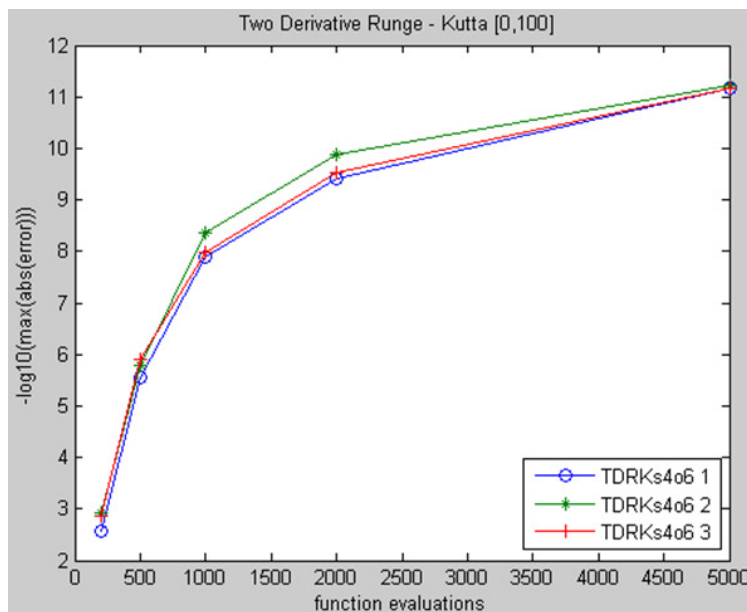


Συγκρίνοντας τις μεθόδους TDRK με τρία στάδια και 5η τάξη παρατηρούμε ότι ενώ όσο αυξάνουν τα σημεία διαμέρισης τόσο αυξάνεται και η ακρίβεια της μεθόδου, οι μέθοδοι μεταξύ τους δεν έχουν μεγάλη διαφορά στο αποτέλεσμα που

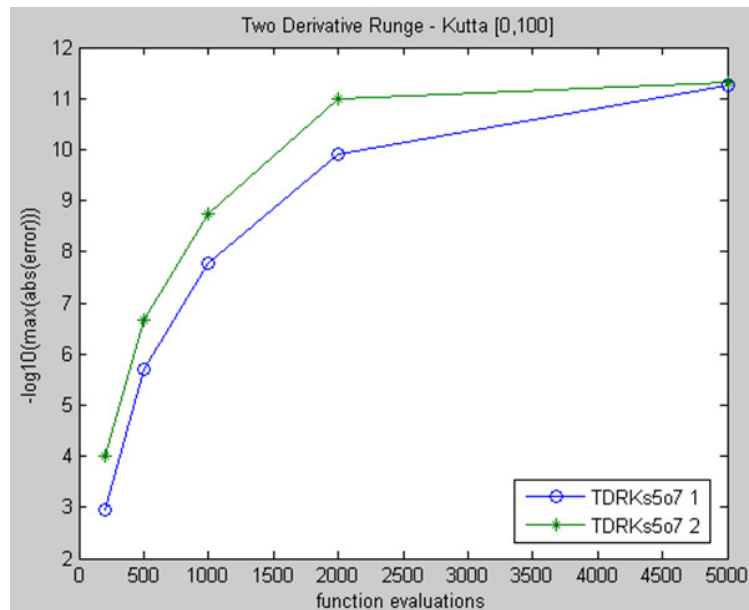
δίνουν.



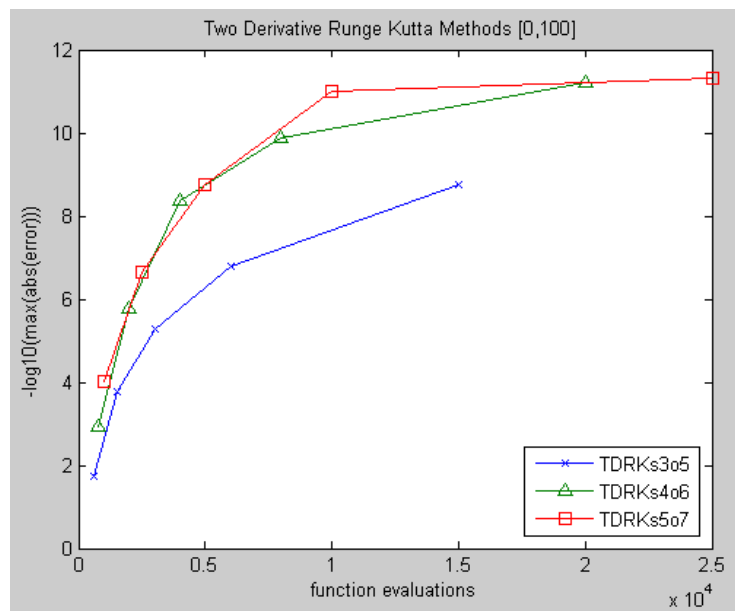
Στη συνέχεια συγκρίναμε τις μεθόδους TDRK με τέσσερα στάδια και 6η τάξη. Όπως και στις μεθόδους τριών σταδίων έτσι και εδώ παρατηρούμε μικρές διαφορές μεταξύ των τριών μεθόδων.



Στις μεθόδους TDRK με πέντε στάδια και 7η τάξη όσο περισσότερα σημεία διαμέρισης έχουμε επιλέξει τόσο πιο μικρό είναι το σφάλμα της μεθόδου.



Από τις TDRK επιλέξαμε την μέθοδο που δίνει καλύτερο αποτέλεσμα για τα διαφορετικά στάδια. Από τη σύγκριση παρατηρούμε πως η μέθοδος με τρία στάδια δεν δίνει τόσο καλό αποτέλεσμα όσο οι άλλες δύο καθώς έχει λιγότερα στάδια. Από τις άλλες δύο μεθόδους καλύτερη είναι εκείνη που έχει περισσότερα στάδια.



Σαν συμπέρασμα μπορούμε να θεωρήσουμε πως όσο αυξάνονται τα στάδια μίας μεθόδου τόσο καλύτερη είναι η ακρίβεια που δίνει η μέθοδος. Επίσης, όσο αυξάνονται τα σημεία διαμέρισης τόσο μικρότερο είναι το σφάλμα της μεθόδου.



# **ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ**



Παραγωγή συνάρτησης με δύο μεταβλητές:

Έστω μία συνάρτηση  $f(u, v)$  με  $(u(x, y))$  και  $v(x, y)$ , τότε μπορούμε να βρούμε τις μερικές παραγώγους της συνάρτησης  $f$  ως προς  $x$  και  $y$  χρησιμοποιώντας τον κανόνα της αλυσίδας.

$$\begin{aligned} \text{Παραγωγή ως προς } x: \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial v} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \\ \text{Παραγωγή ως προς } y: \frac{\partial f}{\partial y} &= \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial v} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \end{aligned}$$

Στην ειδική περίπτωση όπου η συνάρτηση έχει τη μορφή  $f(x, y(x))$  τότε:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial v} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial v} \cdot \frac{\partial y}{\partial x} = f_x + f_y \cdot y'(x)$$

Επειδή  $y'(x) = f'(x, y)$  παίρνουμε:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = f_x + f_y \cdot f'$$

Η παραπάνω είναι η ολική παράγωγος της  $f$  ως προς  $x$ .

Το ανάπτυγμα Taylor για δύο μεταβλητές είναι:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(x_0, y_0) + ((x - x_0) \cdot \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x} + (y - y_0) \cdot \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y}) + \\ &+ \left( \frac{(x - x_0)^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x^2} + 2 \cdot \frac{(x - x_0) \cdot (y - y_0)}{2!} \cdot \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x \partial y} + \frac{(y - y_0)^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial y^2} \right) + \dots \end{aligned}$$

Για  $x = x_0 + k \Rightarrow k = x - x_0$  και  $y = y_0 + l \Rightarrow l = y - y_0$  μετά από πράξεις καταλήγουμε στο εξής:

$$f(x_0 + k, y_0 + l) = f + (kf_x + lf_y) + \frac{2}{4}(k^2 f_{xx} + kl f_{xy} + l^2 f_{yy}) + \dots$$



# **ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ**



Μέθοδοι Runge-Kutta που υλοποιήθηκαν:

Μέθοδος 4 σταδίων 4ης τάξης:

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$

Μέθοδος 6 σταδίων 5ης τάξης:

0						
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				
$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$\frac{-9}{10}$	$\frac{6}{5}$			
$\frac{2}{3}$	$\frac{226}{729}$	$\frac{-25}{27}$	$\frac{880}{729}$	$\frac{55}{729}$		
1	$\frac{-181}{270}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{-266}{297}$	$\frac{-91}{27}$	$\frac{189}{55}$	
	$\frac{19}{216}$	0	$\frac{1000}{2079}$	$\frac{-125}{216}$	$\frac{81}{88}$	$\frac{5}{56}$

Μέθοδος 7 σταδίων 6ης τάξης:

0							
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$						
$\frac{2}{3}$	0	$\frac{2}{3}$					
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{-1}{12}$				
$\frac{5}{6}$	$\frac{25}{48}$	$\frac{-55}{24}$	$\frac{35}{48}$	$\frac{15}{8}$			
$\frac{1}{6}$	$\frac{3}{20}$	$\frac{-11}{24}$	$\frac{-1}{8}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{10}$		
1	$\frac{-261}{260}$	$\frac{33}{13}$	$\frac{43}{156}$	$\frac{-118}{39}$	$\frac{32}{195}$	$\frac{80}{39}$	
	$\frac{13}{200}$	0	$\frac{11}{40}$	$\frac{11}{40}$	$\frac{4}{25}$	$\frac{4}{25}$	$\frac{13}{200}$



# Βιβλιογραφία

- [1] J.C. Butcher, *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations*, John Wiley Sons, Chichester, 1987.
- [2] R.P.K. Chan, A.Y.J.Tsai, On explicit two-derivative Runge-Kutta methods, *Numer Algor*, 53 (2010) 171-194.
- [3] E. Hairer, S.P. Norsett and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations. I Nonstiff Problems*, Springer-Verlag, 1993.
- [4] Z. Kalogiratou, Th. Monovasilis, T.E. Simos, Two-derivative Runge-Kutta methods with optimal phase properties, *Math. Meth. Appl. Sci.*,43 (2020), 1267-1277.
- [5] Z. Kalogiratou, Th. Monovasilis, T.E. Simos, New fifth-order two-derivative Runge-Kutta methods with constant and frequency-dependent coefficients, *Math. Meth. Appl. Sci.*,42 (2019),
- [6] M. Calvo, J.M. Franco, J.I. Montijano, L.Randez, *Structure preservation of exponentially fitted Runge-Kutta methods*, *Journal of computational and applied mathematics*, 2008.
- [7] Μ. Βραχάτης, *Αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων*, Ελληνικά Γράμματα, 2003.
- [8] Ζ. Καλογηράτου, Θ. Μονοβασίλης, Θ. Σίμος, *Αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων*, Καστοριά 2015.
- [9] Γ. Παπαγεωργίου και Χ. Τσίτουρας, *Αριθμητική ανάλυση με εφαρμογές σε Matlab και Mathematica*, Εκδόσεις Συμεών, πέμπτη έκδοση, 2008.
- [10] Δ. Δημητριάδου, Αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων με συμπλεκτικές και μη συμπλεκτικές μεθόδους Runge-Kutta Nystrom , εφαρμογή στο πρόβλημα δύο σταδίων του Kepler Πτυχιακή εργασία, Τ.Ε.Ι. Δυτικής Μακεδονίας, Καστοριά 2012.
- [11] Π. Σωτηροπούλου, Two Derivative Runge-Kutta μέθοδοι με χρήση δέντρων, Πτυχιακή εργασία, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, Καστοριά 2018.