Σχολή Ναυτικών Δοκίμων – *Τομέας Μαθηματικών*

Naval Academy of Greece – *Section of Mathematics*

Μαθηματική Μοντελοποίηση

Αριθμητικές Μέθοδοι

Διαδικασία

Κάθε διαδικασία απαιτεί την εκτέλεση δύο βημάτων

- μετατροπή του φυσικού προβλήματος σε μαθηματικό μοντέλο
- εφαρμογή μιας κατάλληλης υπολογιστικής τεχνικής για την επίλυση του μαθηματικού μοντέλου

Ιστορικά στοιχεία

- Μέχρι το 1940 περίπου, χρήση μεθόδων χωρισμού των μεταβλητών και ολοκληρωτικών μεθόδων
  - Απαραίτητη η εμπειρία για την εφαρμογή τους
  - Αντιμετώπιση μόνο περιορισμένου αριθμού πρακτικών προβλημάτων λόγω των πολύπλοκων γεωμετριών τους
- Μετά τα μέσα της δεκαετίας του 1960, εμφάνιση των Η/Υ υψηλής ταχύτητας και αριθμητική επίλυση ηλεκτρομαγνητικών προβλημάτων
  - Προσεγγιστικές μέθοδοι και όχι ακριβείς
  - μπορούν να δώσουν την προσεγγιστική λύση για ένα πρόβλημα για το οποίο δεν είναι δυνατή η εύρεση αναλυτικής
  - Επιτρέπουν την ανάλυση και επίλυση χωρίς την απαίτηση για γνώση ανώτερων μαθηματικών ή φυσικής.

Ακρίβεια και σφάλμα προσέγγισης

- Απαίτηση από κάθε αριθμητική μέθοδο είναι το σφάλμα προσέγγισής της να είναι όσο το δυνατό μικρότερο.
- Η έννοια της ακρίβειας είναι σχετική και εξαρτάται από την εκάστοτε εφαρμογή
  - Ακρίβεια ενός προβλήματος ακτινοβολίας από κεραία κινητού τηλεφώνου
  - Ακρίβεια κεραίας σε πρόβλημα υπερθερμίας ενός καρκινικού όγκου
- Η ακρίβεια εξαρτάται άμεσα με τις απαιτήσεις σε υπολογιστική ισχύ

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ

Στόχος: Ο προσεγγιστικός προσδιορισμός των λύσεων ενός προβλήματος αρχικών τιμών

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

Οι μέθοδοι που ακολουθούμε βασίζονται και πάλι στην προσέγγιση της συνάρτησης $f(x)$ από κατάλληλες γραμμικές ή πολυωνυμικές συναρτήσεις και τη διακριτοποίηση του πεδίου ορισμού της συνάρτησης σε υποδιαστήματα

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ
Μέθοδος Euler

Πρόβλημα αρχικών τιμών $\frac{dy}{dx} = f(x, y); \;\; y(x_0) = y_0$

Θεώρημα Taylor: $y(x_0 + \Delta\mathrm{x}) = y(x_0) + \Delta\mathrm{x}\frac{dy}{dx}|_{x=x_0} + \frac{\Delta\mathrm{x}^2}{2} \cdot \frac{d^2y}{dx^2}|_{x=x_0} + \cdots$

Κρατώντας μόνο όρους πρώτης τάξης (O($\Delta\mathrm{x}^2$)):

$$y(x_0 + \Delta\mathrm{x}) \cong y(x_0) + \Delta\mathrm{x}\frac{dy}{dx}|_{x=x_0} \Leftrightarrow$$

$$y(x_0 + \Delta\mathrm{x}) \cong y(x_0) + \Delta\mathrm{x} \cdot f(x_0, y_0)$$

Χρησιμοποιώντας τον τύπο αυτό και την αρχική τιμή $y(x_0) = y_0$ υπολογίζουμε τις τιμές της συνάρτησης σε σημεία που ισαπέχουν μεταξύ τους κατά h:

$$y_0 = y(x_0),$$

$$\boldsymbol{y(x_{i+1}) \cong y(x_i) + \mathbf{h} \cdot f(x_i, y_i)}$$ [***Εξίσωση διαφορών***]

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ
Μέθοδος Euler

Παράδειγμα 1: Να λυθεί στο διάστημα [0,1] το πρόβλημα αρχικών τιμών

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

Διακριτοποιούμε το διάστημα σε υποδιαστήματα μήκους h=0.25:

$$x_0 = 0, x_1 = 0.25, x_2 = 0.5, x_3 = 0.75, x_4 = 1$$

Χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις διαφορών που προκύπτουν από τον τύπο Euler:

$y_0 = y(0) = 1,$

$y_1 = y(0.25) = y_0 + 0.25 \cdot f(x_0, y_0) = 0.7500$ (πραγμ. τιμή: -0.778801)

$y_2 = y(0.5) = y_1 + 0.25 \cdot f(x_1, y_1) = 0.5625$ (0.606531)

$y_3 = y(0.75) = y_2 + 0.25 \cdot f(x_2, y_2) = 0.4219$ (0.472367)

$y_4 = y(1) = y_3 + 0.25 \cdot f(x_3, y_3) = 0.3164$ (0.3677879)

Μέθοδος Euler
Αλγόριθμος – Matlab – Octave

Η υλοποίηση της μεθόδου Euler με χρήση Octave ή Matlab επιτυγχάνεται με τον παρακάτω αλγόριθμο

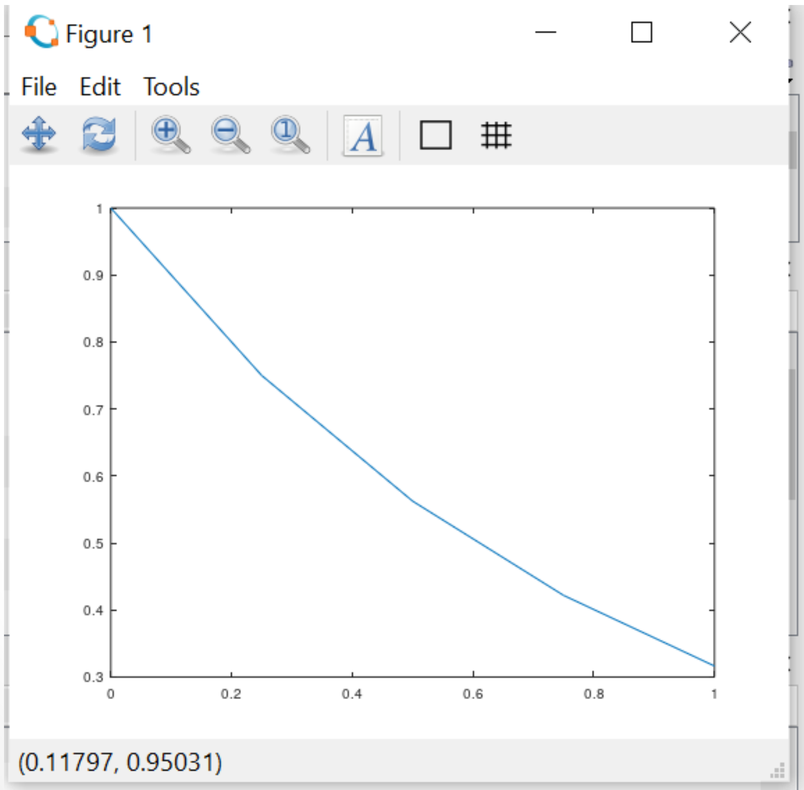
```
a=0;
b=1;
h=0.25 %step's size
N=(b-a)/h % Number of steps
X(1)=0 %The first value of x
y(1)=1 %The first value of y
for n=1:N
y(n+1)=y(n)+h*(-y(n));
x(n+1)=a+n*h;
end
```

Μέθοδος Euler
Αλγόριθμος – Matlab – Octave

Για την εμφάνιση των τιμών της y και το γράφημα χρησιμοποιούμε τις εντολές

```
y
plot(x,y)
```

Μέθοδος Euler
Αλγόριθμος – Matlab – Octave



Command Window

```
>> a=0;
>> b=1;
>> h=0.25;
>> N=(b-a)/h;
>> y(1)=1;
>> for n=1:N
y(n+1)=y(n)+h*(-y(n));
x(n+1)=n*h;
end
>> y
y =

   1.0000    0.7500    0.5625    0.4219    0.3164

>> plot(x,y)
>>
```

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ
Μέθοδος Euler

Παράδειγμα 1: Να λυθεί στο διάστημα [0,4] το πρόβλημα αρχικών τιμών

$$\frac{dy}{dx} + 2y = e^{-4x} \quad ; \quad y(0) = 1$$

$$\frac{dy}{dx} + 2y = e^{-4x} \Leftrightarrow \frac{dy}{dx} = e^{-4x} - 2y = f(x, y)$$

Διακριτοποιούμε το διάστημα σε υποδιαστήματα μήκους h=0.5 και χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις διαφορών που προκύπτουν από τον τύπο Euler:

$$y_{i+1} = y_i + 0.5 \cdot f(x_i, y_i)$$

x_i	y_i	x_i	y_i
0	1	2.5	2.27E-05
0.5	0.067668	3	3.07E-06
1	0.009158	3.5	4.16E-07
1.5	0.001239	4	5.63E-08
2	0.000168	2.5	2.27E-05

Μέθοδος Euler
Αλγόριθμος – Matlab – Octave

Η υλοποίηση της μεθόδου Euler με χρήση Octave ή Matlab επιτυγχάνεται με τον παρακάτω αλγόριθμο

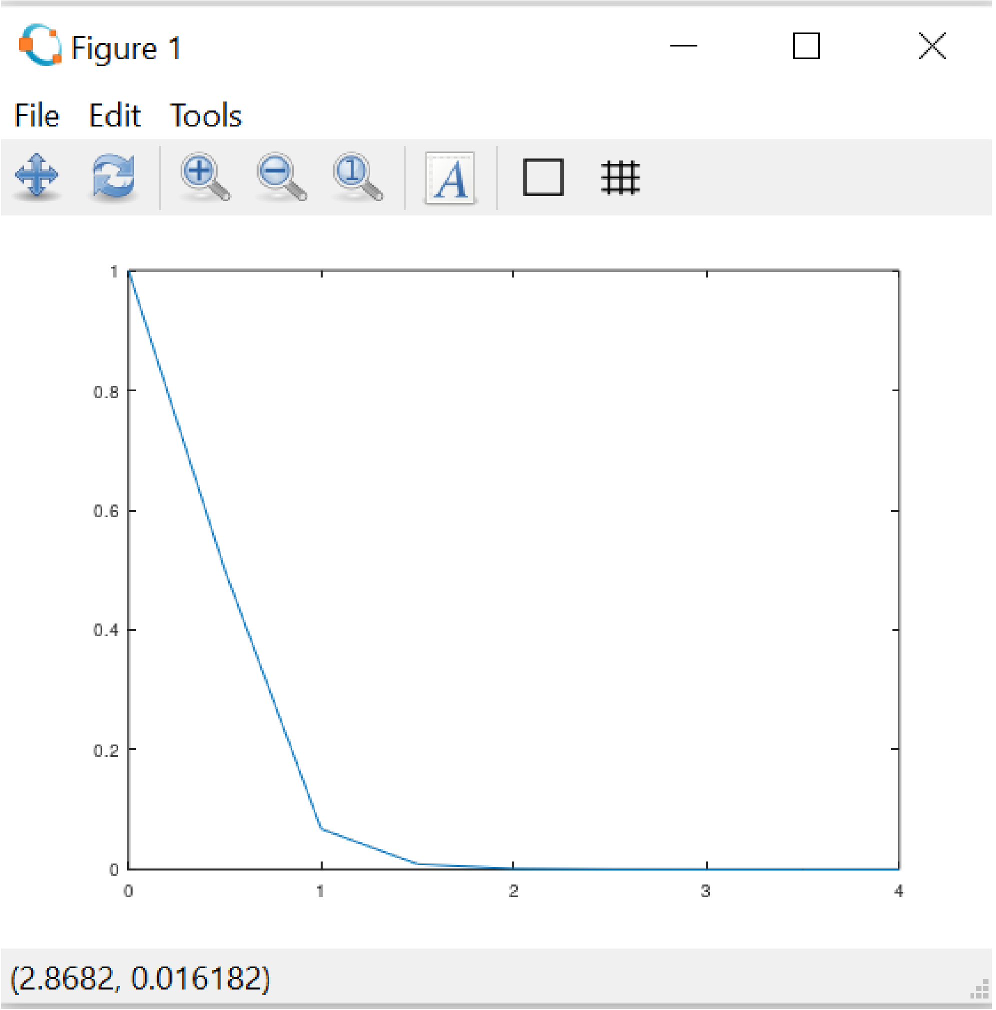
```
>> a=0;
>> b=4;
>> h=0.5;
>> N=(b-a)/h;
>> y(1)=1;
>> x(1)=0;
>> for n=1:N
x(n+1)=a+n*h;
y(n+1)=y(n)+h*(exp(-4*x(n))-2*y(n));
end
```

Μέθοδος Euler
Αλγόριθμος – Matlab – Octave

Command Window

```
>> a=0;
>> b=4;
>> h=0.5;
>> N=(b-a)/h;
>> y(1)=1;
>> x(1)=0;
>> for n=1:N
x(n+1)=a+n*h;
y(n+1)=y(n)+h*(exp(-4*x(n))-2*y(n));
end
>> x
x =

 Columns 1 through 8:

        0    0.5000    1.0000    1.5000    2.0000    2.5000    3.0000    3.5000

 Column 9:

   4.0000

>> y
y =

 Columns 1 through 5:

   1.0000e+00   5.0000e-01   6.7668e-02   9.1578e-03   1.2394e-03

 Columns 6 through 9:

   1.6773e-04   2.2700e-05   3.0721e-06   4.1576e-07
```

Μέθοδος Euler
Αλγόριθμος – Matlab – Octave



ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ
Μέθοδοι Runge - Kutta

Πρόβλημα αρχικών τιμών $\frac{dy}{dx} = f(x,y); \; y(x_0) = y_0$

Range-Kutta δεύτερης τάξης:

$$y(x_{i+1}) \cong y(x_i) + \frac{\mathrm{h}}{2} \cdot \left[f(x_i, y_i) + f\big(x_{i+1}, y_i + \mathrm{h} \cdot f(x_i, y_i)\big) \right]$$

Range-Kutta τρίτης τάξης:

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{\mathrm{h}}{2}, y_i + \frac{\mathrm{h}}{2} k_1 \right)$$

$$k_3 = f(x_i + h, y_i + h k_2)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\mathrm{h}}{6} [k_1 + 4k_2 + k_3]$$

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ
Μέθοδος Runge – Kutta δεύτερης τάξης

Παράδειγμα 1: Να λυθεί στο διάστημα [0,4] το πρόβλημα αρχικών τιμών

$$\frac{dy}{dx} + 2y = e^{-4x} \quad ; \quad y(0) = 1$$

$$\frac{dy}{dx} + 2y = e^{-4x} \Leftrightarrow \frac{dy}{dx} = e^{-4x} - 2y = f(x,y)$$

Διακριτοποιούμε το διάστημα σε υποδιαστήματα μήκους h=0.5 και χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις διαφορών **Runge – Kutta δεύτερης τάξης** :

$$y(x_{i+1}) \cong y(x_i) + \frac{0.5}{2} \cdot \left[f(x_i, y_i) + f\big(x_{i+1}, y_i + \mathrm{h} \cdot f(x_i, y_i)\big)\right]$$

x_i	y_i	x_i	y_i
0	1	2.5	0.034145182
0.5	0.533833821	3	0.017074127
1	0.27149582	3.5	0.008537271
1.5	0.136367598	4	0.004268664
2	0.068267665	2.5	0.034145182

Μέθοδος Runge – Kutta Αλγόριθμος – Matlab – Octave

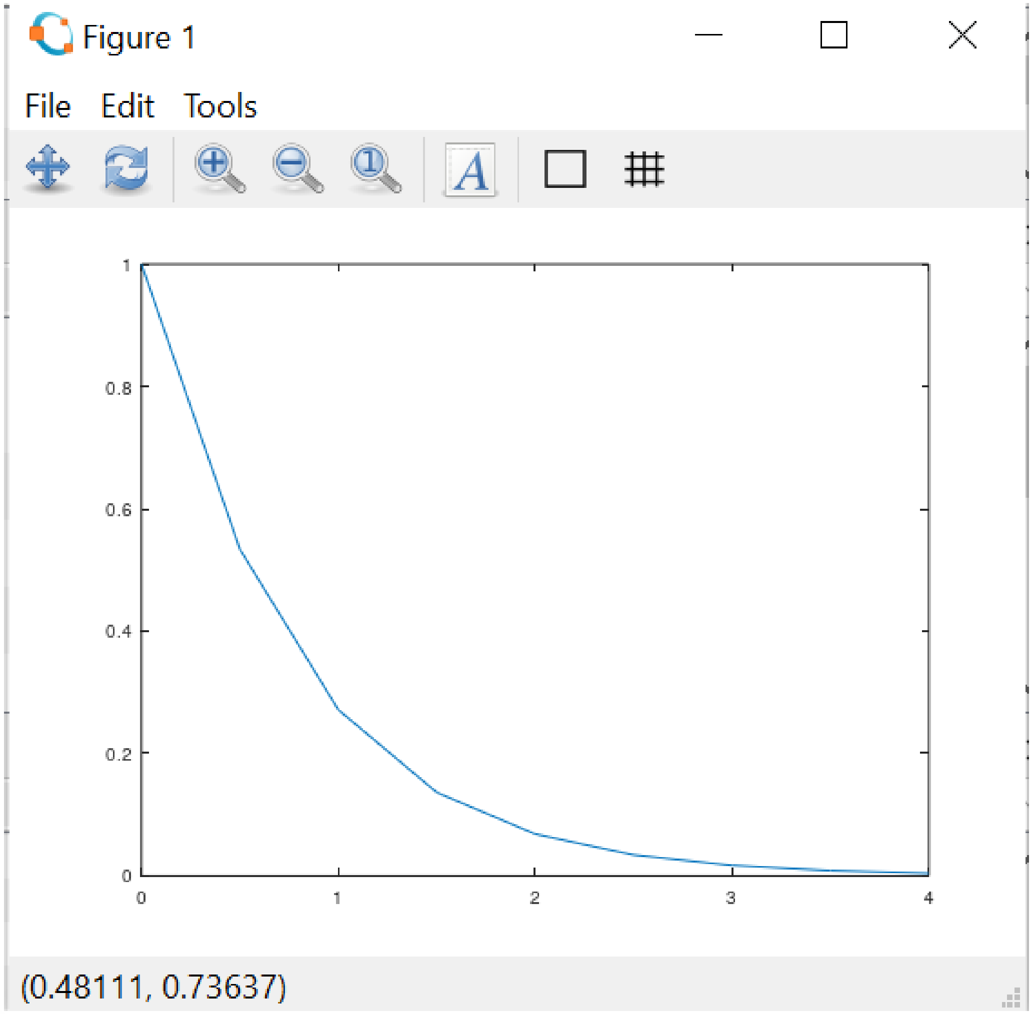
Η υλοποίηση της μεθόδου Runga – Kutta για το συγκεκριμένο παράδειγμα με χρήση Octave ή Matlab επιτυγχάνεται με τον παρακάτω αλγόριθμο

```
>> a=0;
>> b=4;
>> h=0.5;
>> N=(b-a)/h;
>> f=@(x,y)exp(-4*x)-2*y;
>> x(1)=a;
>> y(1)=1;
>> for n=1:N
z(n)=f(x(n),y(n));
x(n+1)=a+n*h;
y(n+1)=y(n)+(h/2)*(z(n)+f(x(n+1),y(n)+h*z(n)));
end
```

Μέθοδος Runge – Kutta Αλγόριθμος – Matlab – Octave

```
>> a=0;
>> b=4;
>> h=0.5;
>> N=(b-a)/h;
>> f=@(x,y)exp(-4*x)-2*y;
>> x(1)=a;
>> y(1)=1;
>> for n=1:N
z(n)=f(x(n),y(n));
x(n+1)=a+n*h;
y(n+1)=y(n)+(h/2)*(z(n)+f(x(n+1),y(n)+h*z(n)));
end
>> x
x =

 Columns 1 through 8:

        0   0.5000   1.0000   1.5000   2.0000   2.5000   3.0000   3.5000

 Column 9:

   4.0000

>> y
y =

 Columns 1 through 5:

   1.0000e+00   5.3383e-01   2.7150e-01   1.3637e-01   6.8268e-02

 Columns 6 through 9:

   3.4145e-02   1.7074e-02   8.5373e-03   4.2687e-03
```

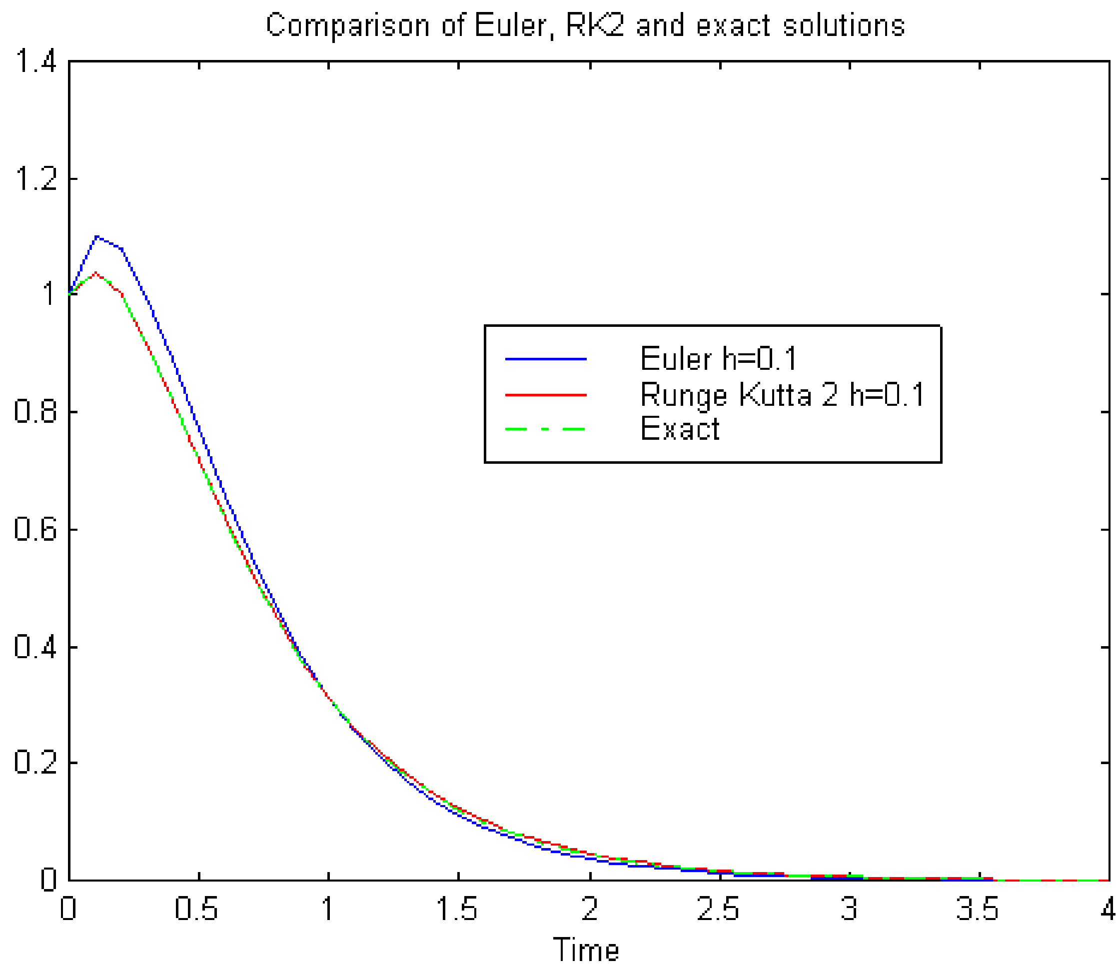
Μέθοδος Runge – Kutta Αλγόριθμος – Matlab – Octave



ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ

<u>Παράδειγμα 1</u>: Να λυθεί στο διάστημα [0,4] το πρόβλημα αρχικών τιμών

$$\frac{dy}{dx} + 2y = e^{-4x} \quad ; \quad y(0) = 1$$



ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ

Προτεινόμενες Ασκήσεις

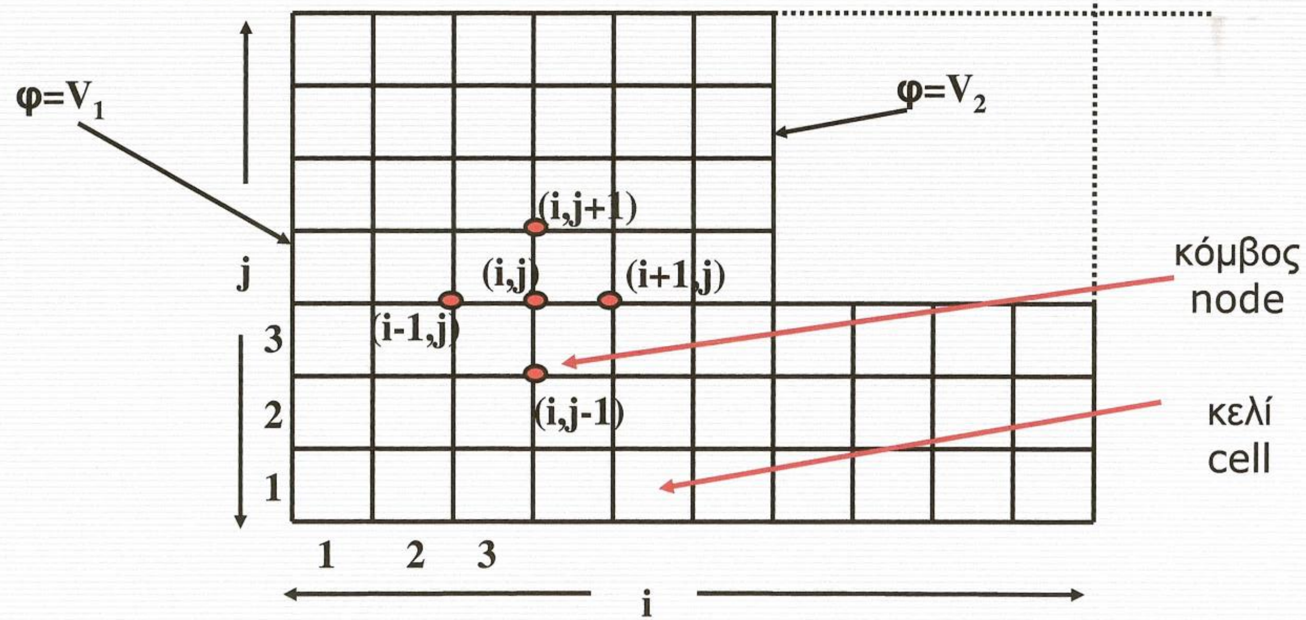
Εφαρμόστε την μέθοδο Euler και την Runge-Kutta 2ης τάξης για την επίλυση των επόμενων προβλημάτων:

1. $y' = y + e^x \qquad y(0) = 1$
2. $y' = x - \dfrac{y}{x} \qquad y(1) = 0$
3. $y' = y + e^x\sqrt{y} \qquad y(0) = 0$
4. $y' = \dfrac{y}{4x} + \dfrac{x}{y^3} \qquad y(1) = 1$
5. $y' = \dfrac{y + xy^2}{x} \qquad y(1) = 1$
6. $y' = xy^2 - \dfrac{y}{x} + \dfrac{1}{x} \qquad y\left(\dfrac{\pi}{4}\right) = 0$
7. $y' = y - \dfrac{1}{4}y^{3/2}, \qquad y(0) = \dfrac{1}{4}$
8. $y' = \dfrac{2y}{t} + t\tan\left(\dfrac{y}{t^2}\right) \qquad y(1) = 2$
9. $(t-3)y'' + y = 0 \qquad y(1) = 1 \qquad y'(1) = -3$
10. $y'' + x^3 = 0 \qquad y(1) = 1 \qquad y'(1) = 0.$

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΜΕ ΜΕΡΙΚΕΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥΣ (2 μεταβλητών)

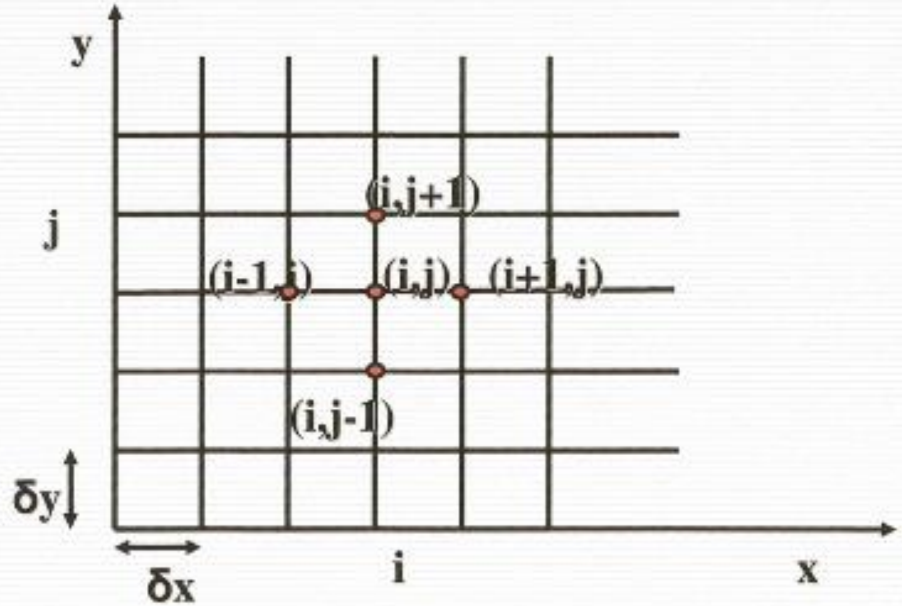
Διακριτοποίηση του χώρου

- Η περιοχή του προβλήματος διαιρείται με τη βοήθεια ενός ορθογωνικού πλέγματος



Διακριτοποίηση του χώρου

- Η περιοχή του προβλήματος διαιρείται με τη βοήθεια ενός ορθογωνικού πλέγματος

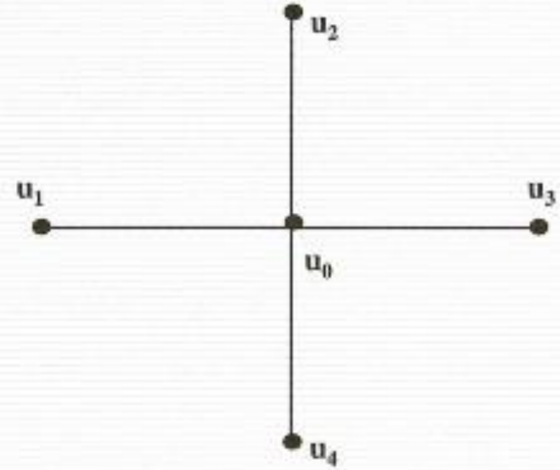


Διακριτοποίηση εξισώσεων

Οι διαφορικές εξισώσεις μετατρέπονται σε εξισώσεις διαφορών με χρήση του αναπτύγματος Taylor

ΟΜΟΙΩΣ

$$\boxed{\left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right|_{(i,j)} = \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\delta y^2}}$$



ενώ ανάλογα υπολογίζονται

και οι παράγωγοι πρώτης τάξης

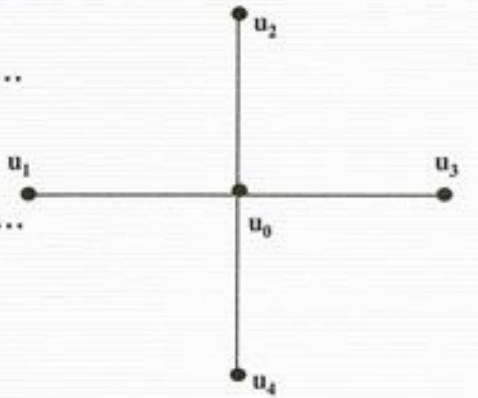
ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΜΕ ΜΕΡΙΚΕΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥΣ (2 μεταβλητών)

Διακριτοποίηση εξισώσεων

Οι διαφορικές εξισώσεις μετατρέπονται σε εξισώσεις διαφορών με χρήση του αναπτύγματος Taylor

$$\phi_{i-1,j} = \phi_{i,j} - \delta x \frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg|_{(i,j)} + \frac{\delta x^2}{2!}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\bigg|_{(i,j)} - \frac{\delta x^3}{3!}\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\bigg|_{(i,j)} + \ldots$$

$$\phi_{i+1,j} = \phi_{i,j} + \delta x \frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg|_{(i,j)} + \frac{\delta x^2}{2!}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\bigg|_{(i,j)} + \frac{\delta x^3}{3!}\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\bigg|_{(i,j)} + \ldots$$



$$\Downarrow$$

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} = 2\phi_{ij} + \delta x^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\bigg|_{(i,j)} + O(\delta x^4) \Rightarrow \boxed{\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\bigg|_{(i,j)} = \frac{\phi_{i+1j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\delta x^2}}$$

Διακριτοποίηση εξισώσεων

Σφάλμα προσέγγισης

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} = 2\phi_{ij} + \delta x^2 \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{(i,j)} + O\left(\delta x^4\right)$$

Για την εξαγωγή της παραπάνω εξίσωσης από τα αναπτύγματα Taylor, αφαιρέθηκαν οι όροι από 4ης τάξης και επάνω

$$\phi_{i-1,j} = \phi_{i,j} - \delta x \left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{(i,j)} + \frac{\delta x^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{(i,j)} - \frac{\delta x^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{(i,j)} + \dots$$

Η προσέγγιση αυτή εισάγει σφάλμα ανάλογο με τη δύναμη του όρου δx. Η προσέγγιση αυτή δηλώνεται με την αντικατάσταση των όρων από τη δύναμη n και πέρα από τον όρο $O(\delta x^n)$, όπου το γράμμα O είναι το αρχικό της λέξης order (τάξη).

- Ισχύει $O(\delta x^n)/\delta x^m = O(\delta x^{n-m})$

Έτσι η εξίσωση $\boxed{\left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{(i,j)} = \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\delta x^2}}$ έχει ακρίβεια 2ης τάξης

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΜΕ ΜΕΡΙΚΕΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥΣ (2 μεταβλητών)

Επίλυση συστήματος εξισώσεων

Το σύνολο των εξισώσεων που προκύπτουν από κάθε κόμβο του πλέγματος με την εφαρμογή και των οριακών συνθηκών σχηματίζουν ένα σύστημα εξισώσεων.

$$a_{11}\phi_1 + a_{12}\phi_2 + \cdots + a_{1m}\phi_m = \beta_1$$

$$a_{21}\phi_1 + a_{22}\phi_2 + \cdots + a_{2m}\phi_m = \beta_2$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$a_{m1}\phi_1 + a_{m2}\phi_2 + \cdots + a_{mm}\phi_m = \beta_m$$

[A] [φ] = [B]

Η λύση του δίνει τις τιμές του αγνώστου μεγέθους στους κόμβους και άρα τη ΛΥΣΗ.

Διακριτοποίηση εξισώσεων

Παράδειγμα: Εξίσωση Laplace

$$\nabla^2\phi(x,y) = \frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial y^2} = 0$$

$$\downarrow$$

$$\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_{(i,j)} + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right|_{(i,j)} = \frac{\phi_{i+1j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\delta x^2} + \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\delta y^2} = 0$$

$$\downarrow \quad \delta x = \delta y = h$$

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j} = 0$$

Επίλυση συστήματος εξισώσεων

Το σύνολο των εξισώσεων που προκύπτουν από κάθε κόμβο του πλέγματος με την εφαρμογή και των οριακών συνθηκών σχηματίζουν ένα σύστημα εξισώσεων.

$$a_{11}\phi_1 + a_{12}\phi_2 + \cdots + a_{1m}\phi_m = \beta_1$$

$$a_{21}\phi_1 + a_{22}\phi_2 + \cdots + a_{2m}\phi_m = \beta_2$$

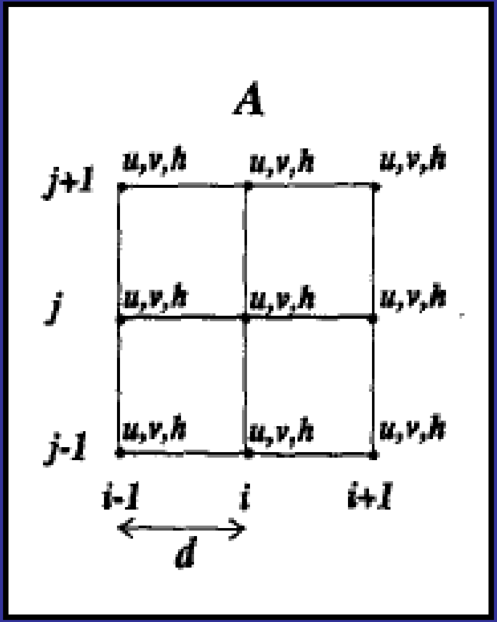
....

$$a_{m1}\phi_1 + a_{m2}\phi_2 + \cdots + a_{mm}\phi_m = \beta_m$$

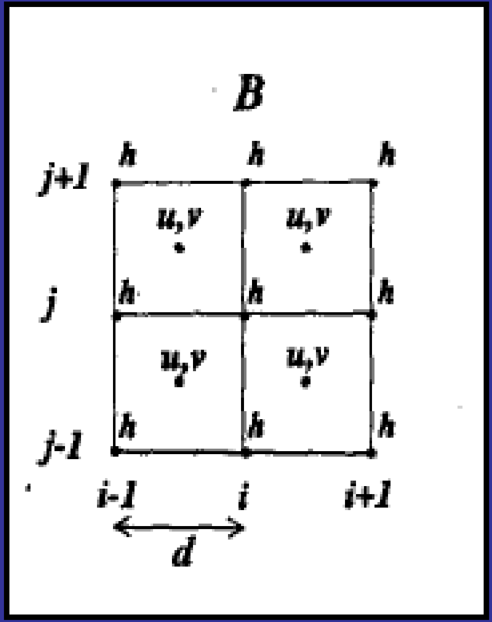
[A] [φ] = [B]

Η λύση του δίνει τις τιμές του αγνώστου μεγέθους στους κόμβους και άρα τη ΛΥΣΗ.

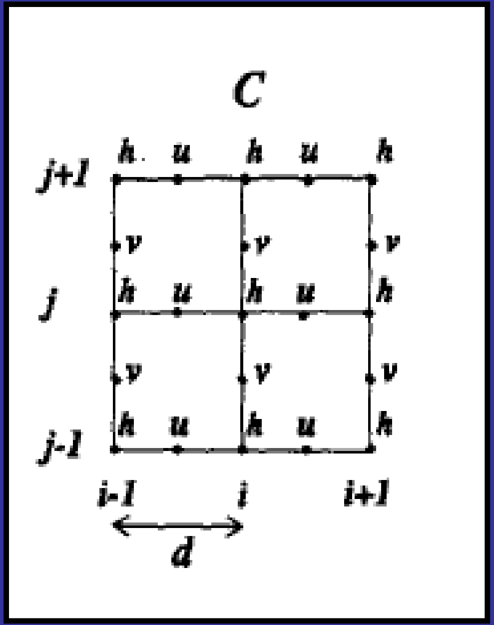
Horizontal grid structures



MM5 and others



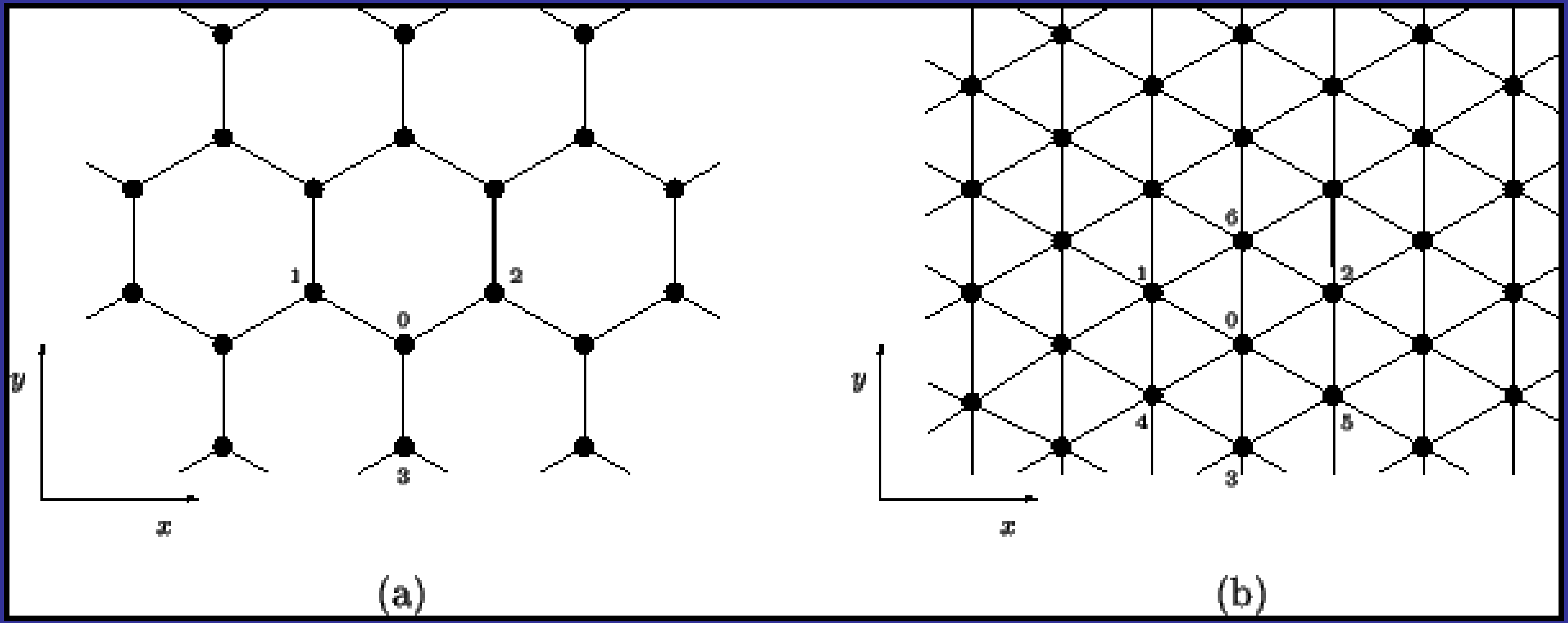
WRF and others



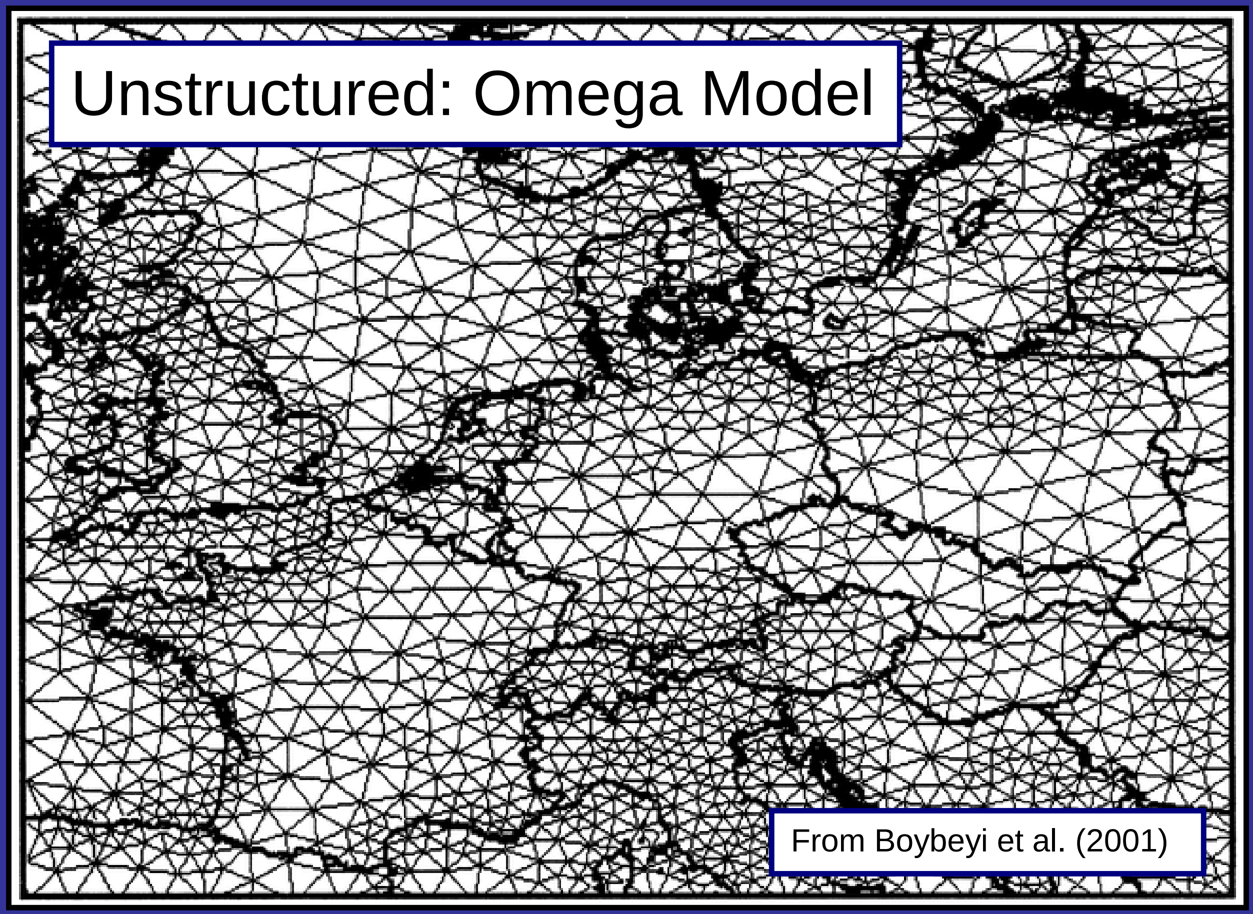
From Randall (1994)

Hexagonal

Triangular



Unstructured: Omega Model

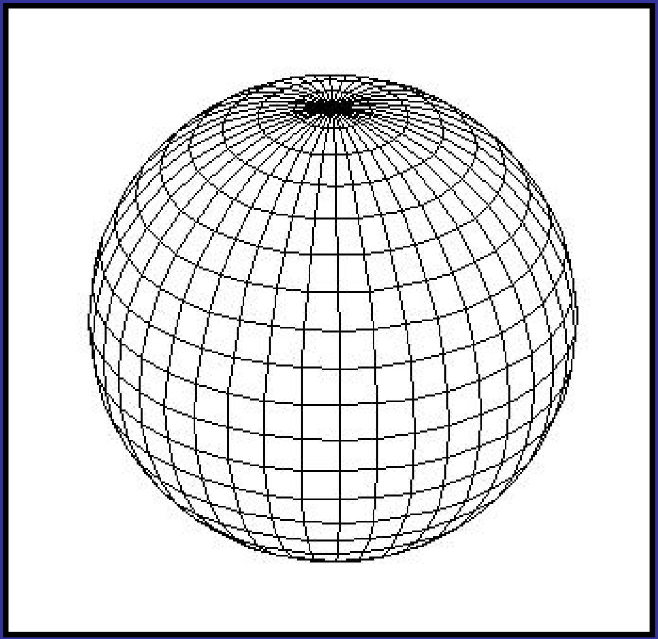


From Boybeyi et al. (2001)

Domains

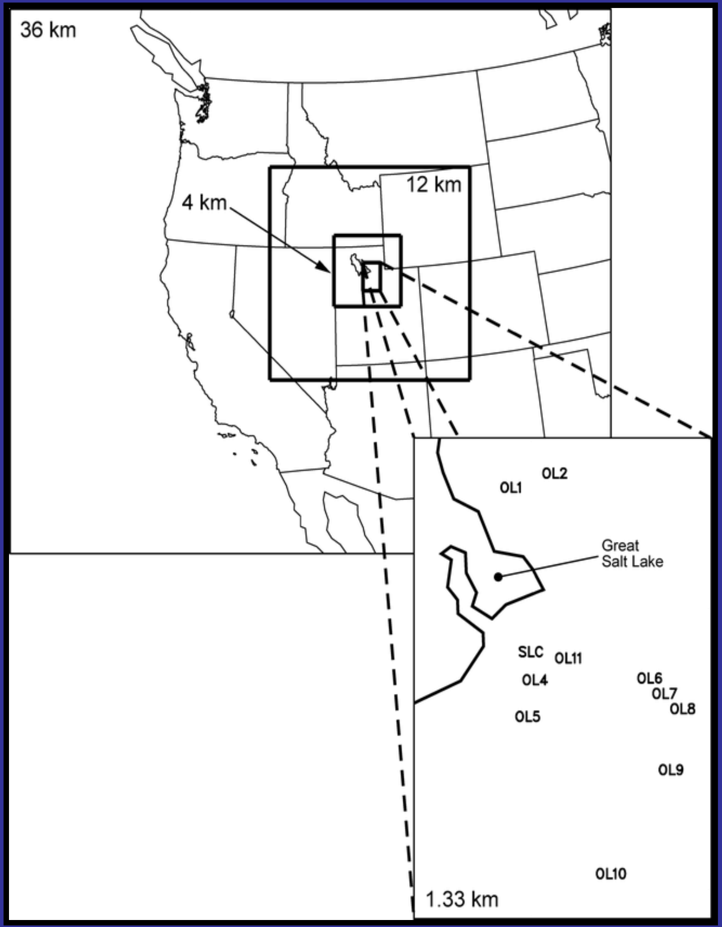
- Shape

Spherical



From mitgcm.org (2006)

Nested grids



From Rife et al. (2004)

An important concept

X X X

Grid-point spacing

Smaller-scale processes need smaller grid spacings – 5-10 grid points per wave length