

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

4ο Εξάμηνο Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π.

Τυπολόγιο (DRAFT) για χρήση κατά την Εξετάση του Μαθήματος

Επιμέλεια: Κ.Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ, Β. Ασούτη Εντεταλμένη Διδάσκουσα *

20 Μαΐου 2026

1 Επίλυση της $F(x)=0$

Από τις **κλειστές** μεθόδους επίλυσης μιας μη γραμμικής εξίσωσης $F(x)=0$, αναζητώντας λύση στο $x \in [\alpha, \beta]$, η **μέθοδος των ίσων διαστημάτων** έχει κριτήριο την αλλαγή προσήμου της $F(x)$ σε δύο διαδοχικούς κόμβους. Στη **μέθοδο των διαδοχικών διχοτομήσεων**, το πλήθος επαναλήψεων για σφάλμα ϵ , είναι $\ln \left[\frac{\beta-\alpha}{\epsilon} \right] / \ln 2$. Η απόλυτη και η σχετική απόκλιση των λύσεων δύο διαδοχικών επαναλήψεων (μετρητής n) ορίζονται ως:

$$\epsilon_{\alpha\phi\alpha} = |x^{(n)} - x^{(n-1)}|$$
$$\epsilon_{\sigma\chi\epsilon\tau} = |x^{(n)} - x^{(n-1)}| / |x^{(n)}|$$

Ειδικά για συναρτήσεις πολυωνυμικής μορφής: $F(x) = \alpha_k x^k + \alpha_{k-1} x^{k-1} + \dots + \alpha_1 x + \alpha_0$ όλες οι ρίζες (πραγματικές και μιγαδικές) βρίσκονται στο εσωτερικό κυκλικού δακτυλίου με εσωτερική (R_i) και εξωτερική (R_o) ακτίνα:

$$R_i = \frac{|\alpha_k|}{|\alpha_k| + \max(|\alpha_k|, |\alpha_{k-1}|, \dots, |\alpha_1|)}$$
$$R_o = 1 + \frac{\max(|\alpha_{k-1}|, |\alpha_{k-2}|, \dots, |\alpha_0|)}{|\alpha_k|}$$

Ακολουθούν οι **ανοικτές** μέθοδοι:

*Το τυπολόγιο αυτό θα χρησιμοποιηθεί ως μοναδικό βοήθημα των φοιτητών κατά τις εξετάσεις του Μαθήματος. Είναι πιθανή η ύπαρξη τυπογραφικών σφαλμάτων, μιας και μόλις δημιουργήθηκε. Παρακαλούμε, καθώς θα το χρησιμοποιείτε στο διάβασμά σας, να ελέγχετε τους τύπους με το βιβλίο ή τις διαφάνειες και να μας στείλετε τα λάθη που θα εντοπίσετε. Οι διδάσκοντες θα συνεχίζουν να το επιμελούνται με σκοπό να οριστικοποιηθεί εγκαίρως πριν την εξεταστική του Ιουνίου 2026. Είναι ευπρόσδεκτες γενικότερες παρατηρήσεις και ιδέες για βελτίωση του τυπολογίου.

• Αλγόριθμος Σταθερού Σημείου

Ο αλγόριθμος σταθερού σημείου ή μέθοδος των διαδοχικών επαναλήψεων βασίζεται στο επαναληπτικό σχήμα $x^{(n+1)} = g(x^{(n)})$, με αναγκαία συνθήκη σύγκλισης την $|g'(x)| < 1$.

• Μέθοδος Newton-Raphson

Υλοποιείται με το επαναληπτικό σχήμα:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{F(x^{(n)})}{F'(x^{(n)})}$$

με αναγκαία συνθήκη σύγκλισης την:

$$\frac{|F(x)F''(x)|}{(F'(x))^2} < 1$$

Εναλλακτικά, η **μέθοδος της τέμνουσας** προσεγγίζει την παράγωγο, και υλοποιείται ως:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{x^{(n)} - x^{(n-1)}}{F(x^{(n)}) - F(x^{(n-1)})} F(x^{(n)})$$

• Μέθοδος Muller

Σε κάθε επανάληψη, προσαρμόζει ένα πολυώνυμο, πιθανόν δεύτερου βαθμού, λχ. το $p(x) = \alpha_2 x^2 + \alpha_1 x + \alpha_0$ σε τρία ζεύγη τιμών προερχόμενα από τις προηγούμενες επαναλήψεις (ή την αρχικοποίηση), έστω τα $(x^{(n-2)}, F(x^{(n-2)}))$, $(x^{(n-1)}, F(x^{(n-1)}))$ και $(x^{(n)}, F(x^{(n)}))$. Τα α_i υπολογίζονται παρεμβάλλοντας, με το $p(x)$, τα τρία σημεία. Η αναλυτική επίλυση του πολυωνύμου δίνει το $x^{(n+1)}$, το οποίο αντικαθιστά κάποιο από τα τρία προηγούμενα στην επόμενη επανάληψη. Το πολυώνυμο μπορεί να γραφεί και σε 'τοπικό' σύστημα, λ.χ. συναρτήσει των $x - x^{(n-2)}$, ώστε $\alpha_0 = F(x^{(n-2)})$.

- **Συστήματα Μη-γραμμικών Εξισώσεων**

Για συστήματα μη-γραμμικών εξισώσεων (ενδεικτικά για 2 εξισώσεις: $F(x, y) = 0$ και $G(x, y) = 0$), η μέθοδος Newton-Raphson παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} &= x^{(n)} - \frac{FG_y - GF_y}{F_x G_y - G_x F_y} \bigg|^{(n)} \\ y^{(n+1)} &= y^{(n)} - \frac{GF_x - FG_x}{F_x G_y - G_x F_y} \bigg|^{(n)} \end{aligned}$$

Για το ίδιο σύστημα, η μέθοδος του στόχου λύνει την $F^2 + G^2 = 0$, ενώ η μέθοδος του σταθερού σημείου (διαδοχικών αντικαταστάσεων) υλοποιείται ως:

$$x^{(n+1)} = X(x^{(n)}, y^{(n)}), \quad y^{(n+1)} = Y(x^{(*)}, y^{(n)})$$

όπου $* = n$ ή $* = n+1$, με προϋπόθεση:

$$\left| \frac{\partial X}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial X}{\partial y} \right| < 1, \quad \left| \frac{\partial Y}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial Y}{\partial y} \right| < 1$$

2 Επίλυση της $A\vec{x} = \vec{b}$

Επιλύεται το γραμμικό σύστημα $A\vec{x} = \vec{b}$, με N γραμμικές εξισώσεις και N αγνώστους. Το μητρώο A είναι σε κακή κατάσταση (ill-conditioned) όταν μικρή αλλαγή $\vec{b}$ προκαλεί μεγάλη μεταβολή στη λύση. Η κατάσταση του μητρώου ελέγχεται από τον αριθμό κατάστασης (α.κ., condition number): (α) ο α.κ. του Hadamard, $K_H(A) = |\det(A)| / (r_1 r_2 \dots r_N)$ όπου $r_i = \sqrt{\sum_{k=1}^N a_{i,k}^2}$, (β) ο τυπικός α.κ. $\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$, και (γ) ο φασματικός α.κ. $\mu(A) = \frac{\max |\lambda_i|}{\min |\lambda_i|}$, όπου λ_i οι ιδιοτιμές του A . Το μητρώο A είναι σε κακή κατάσταση αν $K_H(A) \ll 1$, $\text{cond}(A) \gg 1$, ή $\mu(A) \gg 1$.

- **Επαναληπτική Μέθοδος Jacobi**

$$x_i^{\text{new}} = \frac{1}{a_{i,i}} \left[b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{i,k} x_k^{\text{old}} - \sum_{k=i+1}^N a_{i,k} x_k^{\text{old}} \right]$$

- **Επαναληπτική Μέθοδος Gauss-Seidel**

$$x_i^{\text{new}} = \frac{1}{a_{i,i}} \left[b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{i,k} x_k^{\text{new}} - \sum_{k=i+1}^N a_{i,k} x_k^{\text{old}} \right]$$

Χαλάρωση (relaxation): οι σχέσεις των Jacobi και Gauss-Seidel υπολογίζουν τα 'προσωρινά' x^* (αντί των x_i^{new}) και ακολουθεί υπο- ($\omega < 1$) ή υπερ-χαλάρωση ($\omega > 1$), ως

$$x_i^{\text{new}} = \omega x_i^* + (1 - \omega) x_i^{\text{old}}$$

- **Παραγοντοποίηση LU**

Το μητρώο A παραγοντοποιείται ως $A = LU$, με μοναδιαία είτε τα διαγώνια στοιχεία του L ($l_{i,i} = 1$, μέθοδος Doolittle), είτε αυτά του U ($u_{i,i} = 1$, μέθοδος Crout). Η εύρεση του $\vec{x}$ γίνεται σε δύο βήματα: (α) $L\vec{y} = \vec{b}$, (β) $U\vec{x} = \vec{y}$.

Στη **μέθοδο Crout** υπολογίζονται τα $l_{i,1} = a_{i,1}$ (για $i = 1, \dots, N$), και μετά τα $v_{1,j} = a_{1,j}/l_{1,1}$ (για $j = 2, \dots, N$). Ακολουθεί εξωτερικός βρόχος ($r = 2, \dots, N$), με δύο διαδοχικούς εσωτερικούς βρόχους, τους (α) $l_{i,r} = a_{i,r} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{i,k} v_{k,r}$ (για $i = r, \dots, N$) και (β) $v_{r,j} = (a_{r,j} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{r,k} v_{k,j}) / l_{r,r}$ (για $j = r+1, \dots, N$).

Στη **μέθοδο Doolittle** υπολογίζονται τα $v_{1,j} = a_{1,j}$ (για $j = 1, \dots, N$) και, μετά, τα $l_{i,1} = a_{i,1}/v_{1,1}$ (για $i = 2, \dots, N$). Ακολουθεί εξωτερικός βρόχος ($r = 2, \dots, N$), με δύο διαδοχικούς εσωτερικούς βρόχους, τους (α) $v_{r,j} = a_{r,j} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{r,k} v_{k,j}$ (για $j = r, \dots, N$) και (β) $l_{i,r} = (a_{i,r} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{i,k} v_{k,r}) / v_{r,r}$ (για $i = r+1, \dots, N$).

- **Παραγοντοποίηση Cholesky**

Η παραγοντοποίηση κατά Cholesky ενός **συμμετρικού** και θετικά-ορισμένου μητρώου A γράφεται ως $A = L L^T$, με το μητρώο L να προκύπτει από έναν διπλό βρόχο. Για κάθε $i = 1, \dots, N$, υπολογίζεται πρώτα το $l_{i,i} = \sqrt{a_{i,i} - \sum_{m=1}^{i-1} l_{i,m}^2}$ και μετά τρέχει ο εσωτερικός βρόχος ($k = i+1, \dots, N$), υπολογίζοντας τα υπόλοιπα στοιχεία της i -ιστής στήλης του L :

$$l_{k,i} = \frac{1}{l_{i,i}} \left[a_{k,i} - \sum_{m=1}^{i-1} l_{k,m} l_{i,m} \right]$$

Εναλλακτικά, γίνεται και στη μορφή $A = LDL^T$, όπου το D είναι διαγώνιο μητρώο, και $l_{i,i} = 1$. Ο νέος αλγόριθμος, για $i = 1, 2, \dots, N-1$ υπολογίζει το $d_i = a_{i,i} -$

$\sum_{m=1}^{i-1} d_m l_{i,m}^2$, μετά (εσωτερικός βρόχος, $k = i+1, \dots, N$) τα:

$$l_{k,i} = \frac{1}{d_i} \left[a_{k,i} - \sum_{m=1}^{i-1} d_m l_{k,m} l_{i,m} \right]$$

και, τελικά, $d_N = a_{N,N} - \sum_{m=1}^{N-1} d_m l_{N,m}^2$

3 Παρεμβολή

• Πολωνυμική Παρεμβολή

Τα $N+1$ σημεία $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$, παρεμβάλλονται από ένα μοναδικό πολυώνυμο

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_N x^N$$

βαθμού N (ή μικρότερου). Οι συντελεστές του υπολογίζονται λύνοντας το γραμμικό σύστημα $C\vec{a} = \vec{y}$, όπου $\vec{a} = (a_0, a_1, \dots, a_N)^T$, $\vec{y} = (y_0, y_1, \dots, y_N)^T$ και (ορίζουσα του Vandermonde):

$$C = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^N \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \dots & x_N^N \end{bmatrix}$$

• Παρεμβολή κατά Lagrange

Το πολυώνυμο παρεμβολής κατά Lagrange δημιουργείται ως $p(x) = \sum_{j=0}^N y_j L_j(x)$, με τα πολυώνυμα βάσης $L_j(x)$ να δίνονται από τη σχέση

$$\frac{(x-x_0) \dots (x-x_{j-1})(x-x_{j+1}) \dots (x-x_N)}{(x_j-x_0) \dots (x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1}) \dots (x_j-x_N)}$$

Ισχύει ότι $L_j(x_i) = \delta_i^j$, για $i, j \in [0, N]$, όπου δ_i^j είναι το σύμβολο του Kronecker.

• Παρεμβολή κατά Hermite

Στα $N+1$ σημεία, είναι επιπλέον διαθέσιμες και οι κλίσεις/παράγωγοι $y'_i = (dy/dx)_i$. Το πολυώνυμο που παρεμβάλλει τα σημεία και ικανοποιεί τις δοσμένες κλίσεις, είναι βαθμού το πολύ $2(N+1)$. Ορίζονται τα Hermite πολυώνυμα βάσης $H_j(x)$ και $\bar{H}_j(x)$, με τις ιδιότητες $H_j(x_i) = \delta_i^j$, $H'_j(x_i) = 0$, $\bar{H}_j(x_i) = 0$ και $\bar{H}'_j(x_i) = \delta_i^j$, για $j=0, \dots, N$, ως:

$$H_j(x) = \left(1 - 2L'_j(x_j)(x-x_j) \right) (L_j(x))^2$$

$$\bar{H}_j(x) = (x-x_j) (L_j(x))^2$$

όπου $L_j(x)$ τα πολυώνυμα βάσης της Lagrange. Το πολυώνυμο παρεμβολής κατά Hermite είναι

$$p(x) = \sum_{j=0}^N y_j H_j(x) + \sum_{j=0}^N y'_j \bar{H}_j(x)$$

• Παρεμβολή με κυβικές Splines

Εφαρμόζεται τμηματικά συνεχής πολυωνυμική παρεμβολή, μεταξύ των σημείων (x_i, y_i) και (x_{i+1}, y_{i+1}) , στη μορφή:

$$\begin{aligned} x &\cong p_x(u) = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3 \\ y &\cong p_y(u) = b_0 + b_1 u + b_2 u^2 + b_3 u^3 \end{aligned}$$

με τους οκτώ συντελεστές $a_0, \dots, b_3$ να έχουν διαφορετικές τιμές στα επιμέρους διαστήματα.

Αν $M_i = \left(\frac{d^2 x}{du^2} \right)_i$, $i=0, \dots, N$, το $p_x(u)$ γίνεται

$$x_i + \left[(x_{i+1} - x_i) - \frac{M_{i+1}}{6} - \frac{M_i}{3} \right] u + \frac{M_i u^2}{2} + \frac{(M_{i+1} - M_i)}{6} u^3$$

ενώ, αν $Q_i = \left(\frac{d^2 y}{du^2} \right)_i$, τότε το $p_y(u)$ γίνεται

$$y_i + \left[(y_{i+1} - y_i) - \frac{Q_{i+1}}{6} - \frac{Q_i}{3} \right] u + \frac{Q_i u^2}{2} + \frac{(Q_{i+1} - Q_i)}{6} u^3$$

στο διάστημα $(x_i, y_i) \rightarrow (x_{i+1}, y_{i+1})$.

Διατυπώνονται δύο συστήματα $N+1$ εξισώσεων με $N+1$ αγνώστους έκαστο, για τον υπολογισμό των M_i και των Q_i , $i=0, \dots, N$. Το πρώτο (αντίστοιχα το δεύτερο) γράφεται:

$$\begin{bmatrix} \alpha & \beta & & \\ 1 & 4 & 1 & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & \gamma & \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_{N-1} \\ M_N \end{bmatrix} = 6 \begin{bmatrix} \epsilon \\ x_0 - 2x_1 + x_2 \\ \vdots \\ x_{N-2} - 2x_{N-1} + x_N \\ \zeta \end{bmatrix}$$

Τα α ως και ζ εξαρτώνται από την επιλογή των οριακών συνθηκών. Αυτές είναι: (α) $M_0 = M_N = 0$ (φυσικές splines), (β) δοσμένες τιμές των $\frac{dp_x}{du}$ (ίσες με d_0 και d_N) στους ακραίους κόμβους, οπότε $2M_0 + M_1 = 6(x_1 - x_0 - d_0)$ και $-M_{N-1} + 2M_N = 6(-x_N + x_{N-1} + d_N)$, ή (γ) $M_0 = M_1$ και $M_N = M_{N-1}$.

- **Παρεμβολή με κυβικές B-Splines**

Τα κυβικά πολυώνυμα ως προς u καταλαμβάνουν εύρος 4 διαδοχικών διαστημάτων (5 διαδοχικών κόμβων), από (x_{i-2}, y_{i-2}) ως (x_{i+2}, y_{i+2}) . Στο $u \in [-2, 2]$ ('τοπική' μέτρηση με $u = 0$ στον κόμβο i), η κυβική καμπύλη B-Spline του κόμβου αυτού ορίζεται ως η σύνθεση των:

$$\begin{aligned} b_\alpha(u) &= \frac{(2+u)^3}{6} & -2 \leq u \leq -1 \\ b_\beta(u) &= \frac{4-6u^2-3u^3}{6} & -1 \leq u \leq 0 \\ b_\gamma(u) &= \frac{4-6u^2+3u^3}{6} & 0 \leq u \leq 1 \\ b_\delta(u) &= \frac{(2-u)^3}{6} & 1 \leq u \leq 2 \end{aligned}$$

(πολυώνυμα $B(u)$, τα οποία εκτός του $[-2, 2]$ είναι μηδέν). Ισχύει:

$$b_\alpha(u-2) + b_\beta(u-1) + b_\gamma(u) + b_\delta(u+1) = 1, \quad 0 \leq u \leq 1$$

Η εξίσωση παρεμβολής των $N+1$ σημείων με διανύσματα θέσης $\vec{r}_0, \dots, \vec{r}_N$, για τιμή του u που μετράται με αναφορά τον κόμβο i , είναι:

$$\vec{r}(u) = \sum_{i=-1}^{N+1} B(u) \vec{R}_i$$

και απαιτεί, στο 2Δ χώρο, $N+3$ ζεύγη συντελεστών X_i, Y_i που συχνά εκλαμβάνονται ως συντεταγμένες $N+3$ σημείων ελέγχου $\vec{R}_i$ ($-1 \leq i \leq N+1$) (παραμετρικά κομβικά σημεία). Αυτά υπολογίζονται λύνοντας 2 συστήματα στο 2Δ (3 στο 3Δ):

$$\begin{bmatrix} -N & 0 & N \\ 1 & 4 & 1 \\ & & \vdots \\ & 1 & 4 & 1 \\ -N & 0 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{R}_{-1} \\ \vec{R}_0 \\ \vdots \\ \vec{R}_N \\ \vec{R}_{N+1} \end{bmatrix} = 6 \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \vec{d}_0 \\ \vec{r}_0 \\ \vdots \\ \vec{r}_N \\ \frac{1}{3} \vec{d}_N \end{bmatrix}$$

όπου χρησιμοποιήθηκαν και οι οριακές συνθήκες $\dot{\vec{r}}(0) = \vec{d}_0$ και $\dot{\vec{r}}(1) = \vec{d}_N$, με $\dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{du}$.

4 Προσέγγιση

- **Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων**

Επιλέγεται η συνάρτηση (πιθανόν πολυώνυμο) προσέγγισης $g(x)$ και ελαχιστοποιείται το σφάλμα της σε σχέση

με τα δοσμένα $N+1$ σημεία, έστω τα $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_{N-1}, y_{N-1}), (x_N, y_N)$. Το ανά σημείο σφάλμα προσέγγισης ορίζεται ως $e_i = g(x_i) - y_i$, και πρέπει $\sum_{i=0}^N (e_i)^2 = \min$. Για πολυωνυμική προσέγγιση βαθμού n , με:

$$y \approx g(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_{n-1} x^{n-1} + a_n x^n$$

η προσέγγιση ως πρόβλημα ελαχιστοποίησης (Least Squares) του $E = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (e_i)^2$ απαιτεί:

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = \sum_{i=0}^N (a_0 + a_1 x_i + \dots + a_n x_i^n - y_i) x_i^k = 0$$

όπου $k=0, \dots, N$, ή σε μητρωική γραφή

$$\begin{bmatrix} N+1 & \sum_{i=0}^N x_i & \dots & \sum_{i=0}^N x_i^n \\ \sum_{i=0}^N x_i & \sum_{i=0}^N x_i^2 & \dots & \sum_{i=0}^N x_i^{n+1} \\ & & \ddots & \\ \sum_{i=0}^N x_i^n & \sum_{i=0}^N x_i^{n+1} & \dots & \sum_{i=0}^N x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^N y_i \\ \sum_{i=0}^N y_i x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^N y_i x_i^n \end{bmatrix}$$

- **Προσέγγιση με καμπύλες Bezier**

Οι καμπύλες Bezier-Bernstein (ή απλά καμπύλες Bezier) ελέγχονται από $N+1$ σημεία ελέγχου, τα $(X_0, Y_0), \dots, (X_N, Y_N)$ (ή $\vec{R}_0, \dots, \vec{R}_N$). Είναι παραμετρικές καμπύλες, με παράμετρο $0 \leq t \leq 1$. Για κάθε τιμή της παραμέτρου t , δίνεται το διάνυσμα θέσης του αντίστοιχου σημείου ως $\vec{r}(t) = \sum_{i=0}^N \vec{R}_i C_i(t)$ (ή $x(t) = \sum_{i=0}^N X_i C_i(t)$ και $y(t) = \sum_{i=0}^N Y_i C_i(t)$), όπου

$$\begin{bmatrix} C_0(t) \\ C_1(t) \\ \vdots \\ C_N(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{0,0} & m_{0,1} & \dots & m_{0,N} \\ m_{1,0} & m_{1,1} & \dots & m_{1,N} \\ & & \ddots & \\ m_{N,0} & m_{N,1} & \dots & m_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t^0 \\ t^1 \\ \vdots \\ t^N \end{bmatrix}$$

$$\text{με } m_{i,j} = (-1)^{j-i} \binom{N}{j} \binom{j}{i}.$$

Το μητρώο με στοιχεία $m_{i,j}$, για $N=2$, δηλαδή για 3 σημεία ελέγχου, είναι:

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

για $N=3$, δηλαδή για 4 σημεία ελέγχου, είναι:

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 3 & -6 & 3 \\ 0 & 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

για $N=4$, δηλαδή για 5 σημεία ελέγχου, είναι:

$$\begin{bmatrix} 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 0 & 4 & -12 & 12 & -4 \\ 0 & 0 & 6 & -12 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & -4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

και για $N=5$ (6 σημεία ελέγχου) είναι:

$$\begin{bmatrix} 1 & -5 & 10 & -10 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -20 & 30 & -20 & 5 \\ 0 & 0 & 10 & -30 & 30 & -10 \\ 0 & 0 & 0 & 10 & -20 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Για $t=0$ είναι $\frac{d\vec{r}(0)}{dt} = N(\vec{r}_0 - \vec{r}_1)$, ενώ, για $t=1$ είναι $\frac{d\vec{r}(1)}{dt} = N(\vec{r}_N - \vec{r}_{N-1})$.

Από μια καμπύλη Bezier με $N+1$ σημεία ελέγχου $\vec{R}_i^A$, οι σχέσεις:

$$\vec{R}_0^B = \vec{R}_0^A$$

$$\vec{R}_i^B = \frac{i}{N+1} \vec{R}_{i-1}^A + \left(1 - \frac{i}{N+1}\right) \vec{R}_i^A, \quad 1 \leq i \leq N$$

$$\vec{R}_{N+1}^B = \vec{R}_N^A$$

δημιουργούν μια ταυτοτικά ίδια καμπύλη αλλά με $N+2$ σημεία ελέγχου $\vec{R}_i^B$.

5 Ολοκλήρωση

Προσεγγίζεται αριθμητικά το ολοκλήρωμα:

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

με δεδομένα $N+1$ σημεία (x_i, y_i) ($i=0, \dots, N$), όπου $y_i = f(x_i)$ και $x_i \in [a, b]$. Βασίζεται στην (τμηματική) παρεμβολή των σημείων με πολυώνυμο p_m (m βαθμού) και τον αναλυτικό υπολογισμό του $\int_a^b p_m(x) dx$. Ανάλογα με τον βαθμό του πολυωνύμου προκύπτουν οι παρακάτω περιπτώσεις:

• Μέθοδος Ορθογωνίου

Για $m=0$, για 2 σημεία, το αποτέλεσμα είναι $I \cong (b-a)f(a)$ ή $I \cong (b-a)f(b)$ (σταθερό πολυώνυμο), με σφάλμα $\pm \frac{1}{2}(b-a)^2 f'(\xi)$, όπου $\xi \in [a, b]$.

• Μέθοδος Τραπεζίου

Για $m=1$, για 2 σημεία (γραμμικό πολυώνυμο) είναι:

$$I \cong (b-a) \frac{f(b)+f(a)}{2}$$

με σφάλμα $-\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi)$. Για $n+1$ ισαπέχοντα σημεία στο $[a, b]$, είναι:

$$I \cong \frac{1}{2n}(b-a) \left[f(x_0) + f(x_n) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right]$$

με συνολικό σφάλμα $E = -\frac{\Delta x^3}{12} n \bar{f}''$, όπου η μέση τιμή της m -ιστής παραγώγου δίνεται ως:

$$\bar{f}^{(m)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f^{(m)}(\xi_i), \quad \xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$$

• Μέθοδος Simpson 1/3

Για $m=2$ (τετραγωνικό πολυώνυμο), για 3 ισαπέχοντα σημεία, είναι

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6}$$

με σφάλμα $\frac{1}{2880}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi)$. Για $n+1$ ισαπέχοντα σημεία στο $[a, b]$, είναι:

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + f(x_n) + 4 \sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=2,4,6}^{n-2} f(x_i)}{3n}$$

με συνολικό σφάλμα $E = -\frac{\Delta x^5}{180} n \bar{f}^{(4)}$.

• Μέθοδος Simpson 3/8

Για $m=3$ (κυβικό πολυώνυμο), για 4 ισαπέχοντα σημεία, είναι:

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8}$$

με σφάλμα $-\frac{1}{6480}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi)$.

• Richardson Extrapolation

Υπολογίζεται, με μέθοδο τραπεζίου, το $I = \int_a^b f(x)dx$ με n_1 ίσα διαστήματα στο $[a, b]$ (τιμή I_{n_1}), μετά με $n_2 = 2n_1$ ίσα διαστήματα (τιμή I_{n_2}), και προκύπτει μια καλύτερη εκτίμηση του ολοκληρώματος ως:

$$I \cong \frac{4}{3}I_{n_2} - \frac{1}{3}I_{n_1}$$

• Η Μέθοδος Romberg

Το $I = \int_a^b f(x)dx$ εκτιμάται βηματικά με τη μέθοδο του τραπεζίου, υπολογίζοντας το $I_{0,1}$ με διαμέριση σε 2^N ($N = 0$) διαστήματα και το $I_{1,1}$ με διαμέριση σε 2^N ($N = 1$) ίσα διαστήματα. Από αυτά, με Richardson Extrapolation, υπολογίζεται το $I_{0,2}$. Ο αλγόριθμος συνεχίζει για $N = N+1$, δημιουργώντας την τριγωνική δομή:

$$\begin{array}{ccccccc} I_{0,1} & \} & \rightarrow & I_{0,2} & \} & \rightarrow & I_{0,3} & \} & \rightarrow & I_{0,4} & \cdots \\ I_{1,1} & \} & \rightarrow & I_{1,2} & \} & \rightarrow & I_{1,3} & \} & \rightarrow & \vdots \\ I_{2,1} & \} & \rightarrow & I_{2,2} & \} & \rightarrow & \vdots \\ I_{3,1} & \} & \rightarrow & \vdots \\ \vdots & & & & & & \end{array}$$

Εκτός της πρώτης, κάθε εφαρμογή της μεθόδου του τραπεζίου γίνεται με τον αναδρομικό τύπο:

$$I_{N,1} = \frac{1}{2} \left[I_{N-1,1} + \frac{(b-a)}{2^{N-1}} \sum_{i=1,3,5,\dots}^{2^{N-1}} f\left(a + \frac{b-a}{2^N} i\right) \right]$$

Κάθε κίνηση 'προς τα πάνω-δεξιά' χρησιμοποιεί τη Richardson Extrapolation ως:

$$I_{i,j} = \frac{4^{j-1}I_{i+1,j-1} - I_{i,j-1}}{4^{j-1} - 1}$$

• Ολοκλήρωση κατά Gauss - Gauss Quadrature (GQ)

Η μέθοδος GQ παρουσιάζεται για υπολογισμό ολοκληρωμάτων $I = \int_{-1}^1 f(t)dt$. Για άλλα όρια, $I = \int_a^b f(x)dx$, χρησιμοποιείται ο μετασχηματισμός $x = \left(\frac{b-a}{2}\right)t + \left(\frac{b+a}{2}\right) = \mu t + \lambda$ και υπολογίζεται το $I = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f(\mu t + \lambda)dt$.

Η μέθοδος GQ προσεγγίζει το I (στο $[-1, 1]$) ως $\sum_{i=0}^N C_i f(t_i)$. Οι $N+1$ κόμβοι Gauss t_i και

οι $N+1$ συντελεστές C_i υπολογίζονται επιβάλλοντας τον ακριβή υπολογισμό των ολοκληρωμάτων των $2N+2$ πρώτων μονωνύμων (από το t^0 ως και το t^{2N+1}), στο $[-1, 1]$. Έτσι προκύπτει ο πίνακας:

$N=1$	$t_0 = -1/\sqrt{3}$ $t_1 = 1/\sqrt{3}$	$C_0 = 1$ $C_1 = 1$
$N=2$	$t_0 = -\sqrt{0.6}$ $t_1 = 0.00$ $t_2 = \sqrt{0.6}$	$C_0 = 5/9$ $C_1 = 8/9$ $C_2 = 5/9$
$N=3$	$t_0 = -0.861136$ $t_1 = -0.339981$ $t_2 = 0.339981$ $t_3 = 0.861136$	$C_0 = 0.3478548$ $C_1 = 0.652145$ $C_2 = 0.652145$ $C_3 = 0.3478548$
$N=4$	$t_0 = -0.9061798$ $t_1 = -0.5384693$ $t_2 = 0.00$ $t_3 = 0.5384693$ $t_4 = 0.9061798$	$C_0 = 0.2369268$ $C_1 = 0.4786286$ $C_2 = 0.5688888$ $C_3 = 0.4786286$ $C_4 = 0.2369268$

Ένας δεύτερος τρόπος, που οδηγεί στο ίδιο αποτέλεσμα, είναι με χρήση του **θεωρήματος**

GQ. Το I προσεγγίζεται ως $\sum_{i=0}^N C_i f(t_i)$, όπου

$C_i = \int_{-1}^1 L_i(t)dt$. Τα $L_i(t)$ είναι τα πολυώνυμα Lagrange που αντιστοιχούν στα t_i στο διάστημα $[-1, 1]$. Αν τα $(t_0, t_1, \dots, t_N) \in [-1, 1]$ επιλεγούν ως οι ρίζες πολυωνύμου $q(t)$, $N+1$ βαθμού, για το οποίο ισχύει $\int_{-1}^1 t^k q(t)dt = 0$, με $k = 0, 1, \dots, N$, εξασφαλίζεται ακρίβεια αν το $f(t)$ είναι πολυώνυμο βαθμού $\leq 2N+1$.

Ένας τρίτος τρόπος είναι με χρήση κατάλληλων **ορθογωνίων πολυωνύμων**, οι ρίζες των οποίων είναι οι κόμβοι Gauss. Η επιλογή της οικογένειας ορθογωνίων πολυωνύμων για τον υπολογισμό του $\int_a^b f(t)dt$ εξαρτάται από τα όρια ολοκλήρωσης (a και b), και τη συνάρτηση βάρους $w(x)$ (μέχρι τώρα ήταν $w(x)=1$). Ακολουθούν οι βασικές οικογένειες ορθογωνίων πολυωνύμων.

• Ορθογώνια Πολυώνυμα

Τα πολυώνυμα Legendre $P_n(x)$ είναι ορθογώνια στο διάστημα $[-1, +1]$, με συνάρτηση βάρους την $w(x)=1$, και ισχύει:

$$\int_{-1}^{+1} P_m(x)P_n(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_m^n$$

Τα επτά πρώτα πολυώνυμα Legendre είναι τα:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ P_2(x) &= (3x^2 - 1)/2 \\ P_3(x) &= (5x^3 - 3x)/2 \\ P_4(x) &= (35x^4 - 30x^2 + 3)/8 \\ P_5(x) &= (63x^5 - 70x^3 + 15x)/8 \\ P_6(x) &= (231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)/16 \end{aligned}$$

Προκύπτουν δε από τον αναδρομικό τύπο:

$$P_{n+1}(x)(n+1) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$$

με κοινή ιδιότητα ότι $P_n(1) = 1, \forall n$.

Τα **πολυώνυμα Laguerre** ($\mathcal{L}_n(x)$) είναι ορθογώνια στο $[0, \infty]$ με $w(x) = e^{-x}$. Άρα, στην GQ, χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων της μορφής:

$$\int_0^\infty f(x)e^{-x}dx$$

Η ορθογωνιότητά τους διατυπώνεται ως:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \mathcal{L}_n(x)\mathcal{L}_m(x)e^{-x}dx &= 0, \text{ αν } n \neq m \\ \int_0^\infty [\mathcal{L}_n(x)]^2 e^{-x}dx &= \frac{\Gamma(n+1)}{n!} \neq 0 \end{aligned}$$

Τα έξι πρώτα πολυώνυμα Laguerre είναι τα:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0(x) &= 1 \\ \mathcal{L}_1(x) &= -x + 1 \\ \mathcal{L}_2(x) &= (x^2 - 4x + 2)/2 \\ \mathcal{L}_3(x) &= (-x^3 + 9x^2 - 18x + 6)/6 \\ \mathcal{L}_4(x) &= (x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24)/24 \\ \mathcal{L}_5(x) &= (-x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120)/120 \end{aligned}$$

και προκύπτουν από τον αναδρομικό τύπο:

$$\mathcal{L}_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1} \left[(2n+1-x)\mathcal{L}_n(x) - n\mathcal{L}_{n-1}(x) \right]$$

Στην Gauss-Laguerre ολοκλήρωση:

$$I \cong \sum_{i=0}^N C_i f(x_i)$$

όπου x_i (κόμβοι Gauss είναι οι ρίζες του πολυωνύμου Laguerre βαθμού $N+1$. Δίνονται τα x_i και C_i των τριών πρώτων πολυωνύμων Laguerre:

$N=1$	$x_0=0.585786$ $x_1=3.41421$	$C_0=0.853553$ $C_1=0.146447$
$N=2$	$x_0=0.415775$ $x_1=2.29428$ $x_2=6.28995$	$C_0=0.711093$ $C_1=0.278518$ $C_2=0.0103893$
$N=3$	$x_0=0.322548$ $x_1=1.74576$ $x_2=4.53662$ $x_3=9.39507$	$C_0=0.603154$ $C_1=0.357419$ $C_2=0.0388879$ $C_3=0.000539295$

Τα **πολυώνυμα Hermite** είναι ορθογώνια στο $(-\infty, +\infty)$ με $w(x) = e^{-x^2}$. Τα επτά πρώτα πολυώνυμα Hermite είναι:

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \\ H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x \\ H_6(x) &= 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120 \end{aligned}$$

Η ορθογωνιότητα τους διατυπώνεται ως:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(x)H_n(x)e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}2^n n! \delta_m^n$$

Τα πολυώνυμα Hermite παράγονται από τον αναδρομικό τύπο:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

ενώ ισχύει ότι $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$.

Τα **τροποποιημένα (probabilistic) πολυώνυμα Hermite** $He_n(x)$ ορίζονται ως:

$$He_n(x) = 2^{-n/2} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)$$

Τα πέντε πρώτα τροποποιημένα πολυώνυμα Hermite είναι:

$$\begin{aligned} He_1(x) &= x \\ He_2(x) &= x^2 - 1 \\ He_3(x) &= x^3 - 3x \\ He_4(x) &= x^4 - 6x^2 + 3 \\ He_5(x) &= x^5 - 10x^3 + 15x \end{aligned}$$

Το $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}$ είναι η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (pdf) κανονικής κατανομής με μέση τιμή 0 και τυπική απόκλιση 1. Εδώ $w(x) = e^{-x^2/2}$. Η ορθογωνιότητά τους γράφεται:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} He_m(x)He_n(x)e^{-x^2/2}dx = \sqrt{2\pi}n!\delta_n^m$$

Στην Gauss-Hermite ολοκλήρωση, προσεγγίζεται το ολοκλήρωμα:

$$I \cong \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x) dx \cong \sum_{i=0}^N C_i f(x_i)$$

όπου τα x_i είναι οι ρίζες πολωνύμων Hermite βαθμού $N+1$. Δίνονται τα x_i και C_i των τριών πρώτων πολωνύμων:

$N=1$	$x_0 = -0.70710678$ $x_1 = 0.70710678$	$C_0 = 0.88622692$ $C_1 = 0.88622692$
$N=2$	$x_0 = -1.22474487$ $x_1 = 0.00$ $x_2 = 1.22474487$	$C_0 = 0.29540897$ $C_1 = 1.1816359$ $C_2 = 0.29540897$
$N=3$	$x_0 = -1.6506801$ $x_1 = -0.52464762$ $x_2 = 0.52464762$ $x_3 = 1.6506801$	$C_0 = 0.0813128$ $C_1 = 0.80491409$ $C_2 = 0.80491409$ $C_3 = 0.0813128$

Τα **πολυώνυμα Chebyshev** είναι ορθογώνια στο $[-1, +1]$ με $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$. Άρα, στην GQ, χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων της μορφής:

$$\int_{-1}^1 f(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$$

Τα 7 πρώτα πολυώνυμα είναι:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1 \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x \\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1 \\ T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x \\ T_6(x) &= 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1 \end{aligned}$$

και παράγονται από τον αναδρομικό τύπο:

$$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x)$$

Η μεταξύ τους ορθογωνιότητα γράφεται ως:

$$\int_{-1}^1 T_n(x)T_m(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} 0, & \text{αν } n \neq m \\ \pi, & \text{αν } n=m=0 \\ \pi/2, & \text{αν } n=m \neq 0 \end{cases}$$

Οι ρίζες του πολωνύμου $T_n(x)=0$ είναι οι

$$x_k = \cos\left(\frac{\pi}{2} \cdot \frac{2k-1}{n}\right), \quad k=1, \dots, n$$

Όλα τα μονώνυμα εκφράζονται συναρτήσει των πολωνύμων Chebyshev. Ενδεικτικά:

$$\begin{aligned} 1 &= T_0 \\ x &= T_1 \\ x^2 &= (T_0 + T_2)/2 \\ x^3 &= (3T_1 + T_3)/4 \\ x^4 &= (3T_0 + 4T_2 + T_4)/8 \\ x^5 &= (10T_1 + 5T_3 + T_5)/16 \\ x^6 &= \frac{1}{32}(10T_0 + 15T_2 + 6T_4 + T_6)/32 \end{aligned}$$

6 Επίλυση ΣΔΕ

• Πεπερασμένες Διαφορές

Για ισαπέχοντες κόμβους, η πρώτη παράγωγος προσεγγίζεται με σχήματα εμπρός, πίσω και κεντρικής διαφόρισης, αντίστοιχα, είναι:

$$\begin{aligned} \left. \frac{du}{dx} \right|_i &\cong \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \\ \left. \frac{du}{dx} \right|_i &\cong \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \\ \left. \frac{du}{dx} \right|_i &\cong \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned}$$

(όπου $u_i = u(x)$, $u_{i+1} = u(x + \Delta x)$, κ.ο.κ.) με αφετηρία αναπτύγματα Taylor :

$$u_{i+1} = u_i + \Delta x \left. \frac{du}{dx} \right|_i + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_i + \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{d^3u}{dx^3} \right|_i + \dots$$

Η δεύτερη παράγωγος προσεγγίζεται ως:

$$\left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_i \cong \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Σχήματα υψηλότερης ακρίβειας:

$$\begin{aligned}\frac{du}{dx}\Big|_i &\cong \frac{3u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \frac{du}{dx}\Big|_i &\cong \frac{-3u_i + 4u_{i+1} - u_{i+2}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \frac{d^2u}{dx^2}\Big|_i &\cong \frac{-u_{i+2} + 16u_{i+1} - 30u_i + 16u_{i-1} - u_{i-2}}{12(\Delta x)^2} + \mathcal{O}(\Delta x^4)\end{aligned}$$

• Η Μέθοδος Euler

Επιλύεται η $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$, με αρχική συνθήκη $y(x_0) = y_0$, με το σχήμα $y_{i+1} = y_i + \Delta x f(x_i, y_i)$, $i \geq 1$. Η μέθοδος Euler, για $N+1$ ισαπέχοντα σημεία και βήμα Δx , έχει τοπικό (αντίστοιχα, συνολικό) σφάλμα της τάξης του Δx^2 (αντίστοιχα Δx).

• Η Μέθοδος Runge-Kutta

Μέθοδος Runge-Kutta δεύτερης τάξης (με τοπικό σφάλμα αποκοπής τρίτης τάξης):

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2 \\ k_1 &= \Delta x f(x_i, y_i) \\ k_2 &= \Delta x f(x_{i+1}, y_i + k_1)\end{aligned}$$

Εναλλακτική γραφή της είναι η:

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + \Delta x f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, \bar{y}_{i+\frac{1}{2}}\right) \\ \bar{y}_{i+\frac{1}{2}} &= y_i + \frac{\Delta x}{2} f(x_i, y_i)\end{aligned}$$

Μέθοδος Runge-Kutta τρίτης τάξης:

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \\ k_1 &= \Delta x f(x_i, y_i) \\ k_2 &= \Delta x f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= \Delta x f(x_i + \Delta x, y_i + 2k_2 - k_1)\end{aligned}$$

Μέθοδος Runge-Kutta τέταρτης τάξης:

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 &= \Delta x f(x_i, y_i) \\ k_2 &= \Delta x f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= \Delta x f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 &= \Delta x f(x_{i+1}, y_i + k_3)\end{aligned}$$

ή

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4) \\ k_1 &= \Delta x f(x_i, y_i) \\ k_2 &= \Delta x f\left(x_i + \frac{\Delta x}{3}, y_i + \frac{k_1}{3}\right) \\ k_3 &= \Delta x f\left(x_i + \frac{2\Delta x}{3}, y_i - \frac{k_1}{3} + k_2\right) \\ k_4 &= \Delta x f(x_{i+1}, y_i + k_1 - k_2 + k_3)\end{aligned}$$

ή, εναλλακτικά, (μέθοδος Gill):

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}(k_1 + (2-\sqrt{2})k_2 + (2+\sqrt{2})k_3 + k_4) \\ k_1 &= \Delta x f(x_i, y_i) \\ k_2 &= \Delta x f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= \Delta x f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{\sqrt{2}-1}{2}k_1 + \frac{2-\sqrt{2}}{2}k_2\right) \\ k_4 &= \Delta x f\left(x_{i+1}, y_i - \frac{1}{\sqrt{2}}k_2 + \frac{1+\sqrt{2}}{\sqrt{2}}k_3\right)\end{aligned}$$

• Πολυβηματικές Μέθοδοι

Αντιλαμβάνονται την επίλυση της ΣΔΕ ως μια ολοκλήρωση:

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) dx$$

όπου το πολυώνυμο $\psi_i(x)$ παρεμβάλλει τα σημεία $(x_{i-k}, f_{i-k}), \dots, (x_i, f_i)$ (σχέσεις ανοικτής ολοκλήρωσης). Εναλλακτικά, αν το $\psi_i(x)$ παρεμβάλλει και από το (x_{i+1}, f_{i+1}) προκύπτουν σχέσεις κλειστής ολοκλήρωσης.

Στις σχέσεις **ανοικτής ολοκλήρωσης**, είναι

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \Delta x \int_{-k}^1 \psi_i(x_i + a\Delta x) da$$

αναπτύσσοντας ως (ανάντι πεπερασμένες διαφορές κατά Newton, με $a = \frac{x-x_i}{\Delta x}$):

$$\begin{aligned}\psi_i(x_i + a\Delta x) &= f_i + a\nabla f_i + a(a+1)\frac{\nabla^2 f_i}{2!} \\ &\quad + a(a+1)(a+2)\frac{\nabla^3 f_i}{3!} \dots + \\ &\quad + a(a+1)(a+2) \dots (a+r-1)\frac{\nabla^r f_i}{r!}\end{aligned}$$

όπου

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x - \Delta x)$$

$$\nabla^2 f(x) = \nabla f(x) - \nabla f(x - \Delta x)$$

$$\nabla^3 f(x) = \nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(x - \Delta x)$$

Για διαφορετικές τιμές των k (πόσοι προηγούμενοι κόμβοι) και r (αποκοπή) προκύπτουν διαφορετικοί αλγόριθμοι, όπως για $k=1$, $r=1$:

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2\Delta x f_i + O(\Delta x^3)$$

για $k=3$, $r=3$:

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4\Delta x}{3} (2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}) + O(\Delta x^5)$$

και για $k=5$, $r=5$:

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3\Delta x}{10} (11f_i - 14f_{i-1} + 26f_{i-2} - 14f_{i-3} + 11f_{i-4}) + O(\Delta x^7)$$

Στις σχέσεις **κλειστής ολοκλήρωσης**, δίνονται δύο ενδεικτικά σχήματα, για $k=1$, $r=3$:

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{\Delta x}{3} (f_{i+1} + 4f_i + f_{i-1}) + O(\Delta x^5)$$

και για $k=3$, $r=5$:

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2\Delta x}{45} (7f_{i+1} + 32f_i + 12f_{i-1} + 32f_{i-2} + 7f_{i-3}) + O(\Delta x^7)$$

• Μέθοδοι Πρόβλεψης–Διόρθωσης

Η μέθοδος Milne τέταρτης τάξης, έχει τα εξής βήματα πρόβλεψης/διόρθωσης:

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4\Delta x}{3} (2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}) + O(\Delta x^5)$$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{\Delta x}{3} (f_{i+1} + 4f_i + f_{i-1}) + O(\Delta x^5)$$

Η μέθοδος Milne έκτης τάξης έχει και τα δύο βήματα με $O(\Delta x^7)$, ως εξής:

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3\Delta x}{10} (11f_i - 14f_{i-1} + 26f_{i-2} - 14f_{i-3} + 11f_{i-4})$$

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2\Delta x}{45} (7f_{i+1} + 32f_i + 12f_{i-1} + 32f_{i-2} + 7f_{i-3})$$

Η Μέθοδος Adams–Moulton έχει τα:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta x}{24} (55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}) + O(\Delta x^5)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta x}{24} (9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}) + O(\Delta x^5)$$

• Συστήματα ΣΔΕ

Για την αριθμητική επίλυση συστήματος M ΣΔΕ πρώτης τάξης, της μορφής

$$\frac{dy_1}{dx} = f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_M)$$

$$\frac{dy_2}{dx} = f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_M)$$

$$\vdots$$

$$\frac{dy_M}{dx} = f_M(x, y_1, y_2, \dots, y_M)$$

με τις γνωστές αρχικές συνθήκες $y_m(x_0) = y_{m,0}$ ($m=1, \dots, M$), δίνεται η μέθοδος Runge–Kutta τέταρτης τάξης:

$$k_{m,1} = \Delta x f_m(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, \dots, y_{M,i})$$

$$y_m^{(1)} = y_{m,i} + \frac{1}{2}k_{m,1}$$

$$k_{m,2} = \Delta x f_m(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_1^{(1)}, y_2^{(1)}, \dots, y_M^{(1)})$$

$$y_m^{(2)} = y_{m,i} + \frac{1}{2}k_{m,2}$$

$$k_{m,3} = \Delta x f_m(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_1^{(2)}, y_2^{(2)}, \dots, y_M^{(2)})$$

$$y_m^{(3)} = y_{m,i} + k_{m,3}$$

$$k_{m,4} = \Delta x f_m(x_i + \Delta x, y_1^{(3)}, y_2^{(3)}, \dots, y_M^{(3)})$$

$$y_{m,i+1} = y_{m,i} + \frac{1}{6} (k_{m,1} + 2k_{m,2} + 2k_{m,3} + k_{m,4})$$

όπου καθεμιά από τις παραπάνω γραμμές υπονοεί ξεχωριστό βρόχο $m = 1, \dots, M$ (8 διαδοχικοί βρόχοι).