



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ

Εθνικόν και Καποδιστριακόν
Πανεπιστήμιον Αθηνών

ΙΔΡΥΘΕΝ ΤΟ 1837

Διατριβή επί Διδακτορία

με τίτλο

« Αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων

και προς τα πίσω ανάλυση σφάλματος »

του ΣΤΑΣΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΗ - Μαθηματικού

Που εκπονήθηκε στο Γενικό Τμήμα Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών με την εποπτεία της κάτωθι συμβουλευτικής επιτροπής :

1. Καθηγητής Χαράλαμπος Τσίτουρας , ΕΚΠΑ , Επιβλέπων και Πρόεδρος
2. Καθηγητής Θεόδωρος Η. Σίμος , Ulyanovsk State Technical University
3. Καθηγητής Ιωάννης Φαμέλης , ΠΑΔΑ

και θα εξεταστεί την 7η Νοεμβρίου 2022 από την κάτωθι επταμελή επιτροπή :

1. Καθηγητής Χαράλαμπος Τσίτουρας, ΕΚΠΑ , Επιβλέπων και Πρόεδρος
2. Καθηγητής Θεόδωρος Η. Σίμος , Ulyanovsk State Technical University
3. Καθηγητής Ιωάννης Φαμέλης , ΠΑΔΑ
4. Καθηγήτρια Ζαχαρούλα Καλογηράτου , Παν. Δυτικής Μακεδονίας
5. Καθηγητής Φώτιος Κουμπουλής , ΕΚΠΑ
6. Καθηγητής Χρήστος Μασούρος , ΕΚΠΑ
7. Αναπληρωτής Καθηγητής Βασίλειος Κατσίκης , ΕΚΠΑ

Περιεχόμενα

1	Ευχαριστίες	5
2	Abstract	7
3	Περίληψη	13
4	Εισαγωγή	19
4.1	Διαφορικές εξισώσεις	21
4.2	Εξίσωση Schrödinger	30
4.3	Ανασκόπηση σχετικών ερευνών	37

5	Πολυβηματικές Γραμμικές Μέθοδοι	43
5.1	Συνέπεια - Σταθερότητα	45
5.2	Διάστημα Περιοδικότητας	52
5.3	Συμμετρικές Μέθοδοι	56
5.4	Διάστημα Περιοδικότητας (ΣΜ)	60
6	Αλγοριθμική Απόσβεση - Φάση Υστέρησης	65
6.1	Αλγοριθμική Απόσβεση	68
6.2	Φάση υστέρησης	71
6.3	Φάση υστέρησης (ΣΜ)	77
7	Κατασκευή EPCM μεθόδου	81
7.1	Μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης	83
7.2	Νέα μεθόδος πρόβλεψης	87
7.3	Νέα μεθόδος διόρθωσης	91
7.4	Κατασκευή νέας EPCM μεθόδου	93
7.5	Ανάλυση νέας μεθόδου	99
7.6	Προβλήματα	104
7.7	Σύγκριση νέας μεθόδου	105
7.7.1	Μη ομοιογενής εξίσωση	106
7.7.2	Stiefel-Bettis πρόβλημα	106
7.7.3	Το πρόβλημα των N -σωμάτων	107

7.7.4	Franco , Palacios πρόβλημα	108
7.7.5	Εξίσωση Schrödinger	109
7.7.6	Εξίσωση Duffing	113
7.7.7	Μη γραμμική εξίσωση	114
7.7.8	Πρόβλημα Kepler	114
7.8	Σύγκριση μεθόδου	115
7.8.1	Συμπεράσματα	117
8	Κατασκευή EPC2M μέθοδου	119
8.1	Νέος τύπος μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης	126
8.2	Νέα μέθοδος πρόβλεψης	130
8.3	Νέα μέθοδος διόρθωσης	134
8.4	Κατασκευή νέας EPC2M μεθόδου	139
8.5	Ανάλυση νέας μεθόδου	141
8.6	Προβλήματα	145
8.6.1	Το τροχιακό πρόβλημα των Stiefel-Bettis	145
8.6.2	Εξίσωση Duffing	146
8.6.3	Το πρόβλημα των N-σωμάτων	146
8.6.4	Το τροχιακό πρόβλημα των Franco-Palacios	147
8.6.5	Εξίσωση Schrödinger	148
8.6.6	Μη ομοιογενής εξίσωση	152
8.6.7	Το δύο διαστάσεων πρόβλημα Kepler	153

8.6.8	Μη γραμμική εξίσωση	154
8.7	Σύγκριση νέας μεθόδου	155
8.7.1	Συμπεράσματα	158
9	Ανοιχτά προβλήματα	159
	Βιβλιογραφία	

Ευχαριστίες

Η διδακτρική αυτή διατριβή εκπονήθηκε στο Γενικό Τμήμα του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών υπό την επίβλεψη τριμελούς επιτροπής με επιβλέποντα τον Καθηγητή κ.Χαράλαμφο Τσίτουρα και μέλη τους Καθηγητές κ.κ. Θεόδωρο Σίμο και Ιωάννη Φαμέλη.

Με την ολοκλήρωση της διατριβής αισθάνομαι την ανάγκη να ευχαριστήσω όλους όσους με στήριξαν και συνέβαλλαν στην πραγματοποίησή της.

Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Χαράλαμπο Τσίτουρα ως επιβλέποντα καθηγητή, για τη βοήθεια, την πολύτιμη καθοδήγησή του και τις εποικοδομητικές παρατηρήσεις και παρεμβάσεις του σε όλα τα στάδια της εργασίας. Η συνεργασία μαζί του, η απαιτητική προσφορά του, η συστηματική κατάρτιση, το πνεύμα υπευθυνότητας, η πατρική στοργή και αγάπη ήταν στοιχεία που ενεργοποίησαν και τη δική μου θέληση για παραπέρα γνώση. Επίσης τον ευχαριστώ για την ενθάρρυνση του προκειμένου να συνεχίσω την επιστημονική μου έρευνα.

Ακόμα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Σίμο Θεόδωρο ο οποίος με στήριξε και με βοήθησε σε όλη τη διάρκεια της διδακτορικής μου διατριβής.

Δεν θα μπορούσα να όμως να κλείσω αυτόν τον κύκλο των ευχαριστιών χωρίς να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στην οικογένειά μου για την υπομονή, τις στερήσεις και την ηθική και υλική βοήθεια σε κάθε μου βήμα.

Abstract

In the present doctoral thesis we study the numerical solution of second order initial value problems of the form :

$$y'' = f(x, y), y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y'_0 \quad (2.1)$$

with periodic solution.

Many problems of this type appear in orbital mechanics ; they have as a common feature the fact that usually, there is only interest in obtaining the values of the dependent variable $y(t)$, forgetting the values of the derivative $y'(t)$. Generally, the most effective way to solve this problem consist in using an initial or strating method and after that, integrating the problem. This is done by means of a direc integration multistep method.

Methods of this type are the classical Störmer-Cowell formulae ; but , it has been observed in practice that , when more than two steps are used , the numerical solution spirals inwards. Stefiel and Bettis refer to this phenomenon as orbital instability [10]. When problems with periodic solution , are integrated numerically , it is desirable that the numerical solution is also periodic , with similar periodic as the analytic one. An appropriate requirement for the numerical methods which integrate periodic problems is P-stability in the sense given by Lambert and Watson [1]. Thus we can obtain multistep linear methods with good periodicity properties for the numerical integration of periodic problems.

In any problem with a periodic solution, even if the frequency of the problem is initially unknown, we have methods with constant coefficients. The methods in this class must be P-stable and this is necessary in the case of problems with extremely oscillating solutions. An important contribution is the work of Hairer [127] in which lower order P-stable methods have been developed.

Various methods have been proposed in order to overcome the drawback of orbital instability such are the modified methods Störmer-Cowell all of which methods , however , require an a priori knowledge of the frequency. Therefore we will encounter initial value problems whose frequency is known a priori, as well as problems for which we have no knowledge of their frequency. Lambert and Watson dealt with problems for which we have no knowledge of their frequency and defined the conditions under which a linear multistep method has a non-vanishing interval of periodicity.

More specifically, Lambert and Watson presented certain linear multistep methods of an arbitrary number of steps , which have the property of periodicity when the number of steps as well as the angular frequency move within a defined interval , the interval of periodicity [1].

The aim of the present doctoral dissertation is the development of faster and more reliable algorithms for the solution of the Schrödinger equation as well as related problems. The results of the research we conducted is the development of such methods which refer to common differential equations with oscillatory of periodic solutions.

The reason for their effectiveness , as proven by the analysis we performed, is that in these new methods the phase-lag as well as its derivatives vanish. Another reason is that the methods we developed are of a higher algebraic order.

The structure of this dissertation is the following :

Chapter 1 : Acknowledgements

Chapter 2 : Abstract

Chapter 3 : Summary

Chapter 4 : Initially , the basic theory regarding differential equations,with which we will be dealing is briefly presented in this chapter. More specifically , we refer to the Schrödinger equation which is the basic problem we are dealing with. In addition , we perform a historical review in relation to the reasearch and study of second order initial value problems including the latest developments.

Chapter 5 : Theorems and suggestions regarding the symmetric methods , the order of symmetric methods , their convergence and their interval of periodicity are presented. There is also a reference to theorems where the definition of a zero-stable multistep method is given , the connection of this definition to the property is connected to the severance error. We connect the notion of a method's periodicity interval to the symmetry of the method and we ensure the necessary conditions according to which a method will have a non-zero periodicity interval.

Chapter 6 : Study and analysis of the phase-lag and the algorithmic damping of symmetric linear multistep methods.

Chapter 7 : Development of symmetric multistep predictor corrector method of eight steps and of the eighth algebraic order with a vanishing phase lag as well as its first derivative , with an interval of periodicity (0,3.225616). Initially , an explicit method is developed , the method of prediction ; subsequently the development of an implicit correction method is presented. The theoretical background and the methodology of developing this new method are given.

The main characteristic of the new method is that the method of prediction is completely included in the method of correction , and for this reason the new pair of methods is called embedded. Additionally, we test these methods on the Schrödinger equation and on seven other related problems with oscillatory or periodic solutions. Finally , we analyze and compare the method above other numerical methods applied for the solution of these problems.

Chapter 8 : Development another symmetric multistep predictor corrector method of eight steps and of the eighth algebraic order with a vanishing phase lag together with its first and second derivative given an interval of periodicity (0,6.235009). Initially we develop an explicit method , namely the method of prediction and afterwards we present the development of an implicit correction method. The theoretical background and the mode of development of this new method are given.

We test this new method on the Schrödinger equation and on seven other related problems with oscillatory or periodic solutions. Finally , we analyze and compare the method above other numerical methods applied for the solution of these problems.

Chapter 9 : Unsolved problems - suggestions on the research in which unsolved problems still exist.

Στη παρούσα διατριβή θα ασχοληθούμε με τα δεύτερης τάξης προβλήματα αρχικών τιμών :

$$y'' = f(x, y), y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y'_0 \quad (3.1)$$

τα οποία έχουν περιοδική λύση.

Πολλά προβλήματα δεύτερης τάξης αρχικών τιμών εμφανίζονται στην τροχιακή μηχανική που έχουν ως κοινό χαρακτηριστικό το γεγονός ότι η πρώτη παράγωγος $y'(x)$ απουσιάζει. Από τους πιο αποτελεσματικούς τρόπους για την επίλυση αυτών των προβλημάτων συνίσταται στη χρήση μια αρχικής μεθόδου και στη συνέχεια στην αριθμητική ολοκλήρωση του προβλήματος. Αυτό επιτυγχάνεται συνήθως μέσω μια άμεσης μεθόδου ολοκλήρωσης πολλαπλών σταδίων.

Μέθοδοι αυτού του τύπου είναι οι κλασσικοί τύποι **Störmer – Cowell** γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων , οι οποίοι έχουν το μειονέκτημα ότι η αριθμητική λύση στρέφεται προς τα μέσα , όταν ο αριθμός των βημάτων της μεθόδου υπερβαίνει τα δύο [1]. Οι **Stiefel** και **Bettis** αναφέρονται στο φαινόμενο αυτό ως τροχιακή αστάθεια [10]. Όταν τα προβλήματα με περιοδική λύση, ολοκληρώνονται αριθμητικά, είναι επιθυμητό η αριθμητική λύση να είναι επίσης περιοδική, με παρόμοια περίοδο με την πραγματική. Μια κατάλληλη απαίτηση για αριθμητικές μεθόδους που ολοκληρώνουν περιοδικά προβλήματα είναι η ιδιότητα **P-stability** μια έννοια που δίνεται από τους **Lambert** και **Watson** [1]. Έτσι μπορούμε να αποκτήσουμε πολυβηματικές γραμμικές μεθόδους με καλές ιδιότητες περιοδικότητας για την αριθμητική ολοκλήρωση περιοδικών προβλημάτων.

Σε οποιοδήποτε πρόβλημα με περιοδική λύση , ακόμη και αν η συχνότητα του προβλήματος είναι αρχικά άγνωστη , έχουμε μεθόδους με σταθερούς συντελεστές. Οι μέθοδοι αυτής της κατηγορίας πρέπει να είναι **P-stable** , και αυτό ισχύει ιδιαίτερα στην περίπτωση προβλημάτων με εξαιρετικά ταλαντωτικές λύσεις. Μια σημαντική συμβολή για τις **P-stable** μεθόδους είναι η εργασία του **Hairer** [127] στην οποία έχουν αναπτυχθεί μέθοδοι **P-stable** χαμηλότερης τάξης.

Έχουν προταθεί διάφορες μέθοδοι για να ξεπεραστεί το μειονέκτημα της τροχιακής αστάθειας , όπως οι τροποποιημένες μέθοδοι **Störmer – Cowell** , οι οποίες όμως όλες αυτές οι μέθοδοι απαιτούν από πριν γνώση της συχνότητας. Έτσι θα συναντήσουμε προβλήματα αρχικών τιμών των οποίων η συχνότητά τους θα είναι γνωστή εκ των προτέρων καθώς και προβλήματα των οποίων δεν έχουμε καμία γνώση της συχνότητάς τους. Με προβλήματα για τα οποία δεν έχουμε γνώση της συχνότητάς τους ασχολήθηκαν οι **Lambert** και **Watson** οι οποίοι όρισαν τις συνθήκες κατά τις οποίες μια γραμμική πολυβηματική μέθοδος έχει ένα μη-εξαφανιζόμενο διάστημα περιοδικότητας.

Συγκεκριμένα οι Lambert και Watson παρουσίασαν ορισμένες γραμμικές πολυβηματικές μεθόδους αυθαίρετου αριθμού βημάτων , οι οποίες έχουν την ιδιότητα της περιοδικότητας όταν ο αριθμός των βημάτων καθώς και η γωνιακή συχνότητα κινούνται εντός ενός ορισμένου διαστήματος , το διάστημα περιοδικότητας [1].

Σκοπός της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι η κατασκευή ταχύτερων και πιο αξιόπιστων αλγορίθμων για την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger καθώς και συναφή προβλημάτων. Το αποτέλεσμα της έρευνας που πραγματοποιήσαμε είναι η κατασκευή τέτοιων μεθόδων που αφορούν συνήθεις διαφορικές εξισώσεις με ταλαντωτικές ή περιοδικές λύσεις.

Ο λόγος της αποτελεσματικότητάς τους, όπως αποδεικνύεται από την ανάλυση που κάναμε, είναι ότι στις νέες μεθόδους η φάση υστέρησης αλλά και οι παράγωγοι αυτών εξαλείφονται. Ένας επιπλέον λόγος είναι πως οι μέθοδοι που κατασκευάσαμε είναι υψηλότερης αλγεβρικής τάξης.

Η δομή της διατριβής είναι η ακόλουθη :

Κεφάλαιο 1 : Ευχαριστίες

Κεφάλαιο 2 : Abstract

Κεφάλαιο 3 : Περίληψη

Κεφάλαιο 4 : Αρχικά στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται συνοπτικά η βασική θεωρία σχετικά με τις διαφορικές εξισώσεις με τις οποίες θα ασχοληθούμε. Ειδικότερα αναφερόμαστε στην εξίσωση Schrödinger η οποία είναι το βασικό πρόβλημα με το οποίο ασχολούμαστε. Επίσης κάνουμε μια ιστορική ανασκόπηση σχετικά με την έρευνα και τη μελέτη προβλημάτων αρχικών τιμών δεύτερης τάξης μέχρι και τις πιο πρόσφατες εξελίξεις.

Κεφάλαιο 5 : Παρουσιάζονται θεωρήματα και προτάσεις σχετικά με τις συμμετρικές μεθόδους , την τάξη των συμμετρικών μεθόδων , την σύγκλισή τους καθώς και το διάστημα περιοδικότητά τους. Ακόμη γίνεται αναφορά σε θεωρήματα όπου δίνεται ο ορισμός μιας **zero - stable** πολυβηματικής μεθόδου , η σύνδεση του ορισμού αυτού με την σύγκλιση της μεθόδου καθώς και πως σχετίζεται η ιδιότητα **zero - stable** με το σφάλμα αποκοπής. Αντιστοιχίζουμε την έννοια του διαστήματος περιοδικότητας μιας μεθόδου με την συμμετρικότητά της μεθόδου και εξασφαλίζουμε τις απαραίτητες συνθήκες σύμφωνα με τις οποίες μια μέθοδος θα έχει διάστημα περιοδικότητας μη μηδενικό.

Κεφάλαιο 6 : Μελετάται και γίνεται ανάλυση της φάσης υστέρησης όπως επίσης και της αλγοριθμικής απόσβεσης των συμμετρικών γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων.

Κεφάλαιο 7 : Ανάπτυσσεται μια συμμετρική πολυβηματική μέθοδος , οκτώ βημάτων και όγδοης αλγεβρικής τάξης , πρόβλεψης-διόρθωσης με εξαφανιζόμενη φάση υστέρησης καθώς και την πρώτη παράγωγο αυτής , με διάστημα περιοδικότητας (0,3.225616). Αρχικά αναπτύσσεται μία άμεση μέθοδος, η μέθοδος πρόβλεψης και στη συνέχεια παρουσιάζεται η ανάπτυξη της έμμεσης μεθόδου διόρθωσης. Δίνεται όλο το θεωρητικό υπόβαθρο, όπως και η μεθοδολογία κατασκευής της νέας μεθόδου.

Κύριο χαρακτηριστικό της νέας αυτής μεθόδου είναι ότι η μέθοδος πρόβλεψης περιλαμβάνεται πλήρως στη μέθοδο διόρθωσης και για το λόγο αυτό το νέο αυτό ζευγάρι μεθόδων καλείται ενσωματωμένο (**embedded**).Επίσης δοκιμάζουμε τις μεθόδους αυτές στην εξίσωση **Schrödinger** και σε άλλα επτά σχετικά προβλήματα με ταλαντωτικές ή περιοδικές λύσεις. Τέλος αναλύουμε και συγκρίνουμε την παραπάνω μέθοδο με άλλες αριθμητικές μεθόδους επίλυσης των προβλημάτων αυτών.

Κεφάλαιο 8 : Αναπτύσσεται μια συμμετρική πολυβηματική μέθοδος , οκτώ βημάτων και όγδοης αλγεβρικής τάξης , πρόβλεψης-διόρθωσης με εξαφανιζόμενη φάση υστέρησης καθώς και την πρώτη και δεύτερη παράγωγο αυτής , με διάστημα περιοδικότητας (0,6.235009). Αρχικά αναπτύσσεται μία άμεση μέθοδος, η μέθοδος πρόβλεψης και στη συνέχεια παρουσιάζεται η ανάπτυξη της έμμεσης μεθόδου διόρθωσης. Δίνεται όλο το θεωρητικό υπόβαθρο και ο τρόπος ανάπτυξης της νέας μεθόδου.

Δοκιμάζουμε την νέα αυτή μέθοδο στην εξίσωση **Schrödinger** και σε άλλα επτά σχετικά προβλήματα με ταλαντωτικές ή περιοδικές λύσεις. Τέλος αναλύουμε και συγκρίνουμε την παραπάνω μέθοδο με άλλες αριθμητικές μεθόδους επίλυσης των προβλημάτων αυτών.

Κεφάλαιο 9 : Ανοιχτά προβλήματα - προτάσεις πάνω στην έρευνα όπου υπάρχουν ακόμη ανοικτά προβλήματα.

Κατά τη διάρκεια της διδακτορικής μου διατριβής εκδόθηκαν ή έχουν γίνει δεκτές και βρίσκονται στο στάδιο της δημοσίευσης ή έχουν αποσταλεί για δημοσίευση οι ακόλουθες εργασίες :

A) ΕΡΓΑΣΙΕΣ ΣΕ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΠΟΥ ΑΝΑΓΝΩΡΙΖΟΝΤΑΙ ΑΠΟ ΤΟ WEB OF SCIENCE

1.«New 8-step symmetric embedded predictor–corrector (EPCM) method with vanished phase-lag and its first derivative for the numerical integration of the Schrödinger equation» , Journal of Mathematical Chemistry,Vol56,pp 2741–2767

2.Έχει αποσταλεί για δημοσίευση η εργασία με τίτλο : «New Eight Step Symmetric Embedded Predictor Corrector (EPCM) Method with Vanished Phase lag and its First and Second Derivatives for the Numerical Integration of the Schrödinger equation»

Β) ΕΡΓΑΣΙΕΣ ΣΕ ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ ΠΟΥ ΑΝΑΓΝΩΡΙΖΟΝΤΑΙ ΑΠΟ ΤΟ WEB OF SCIENCE (CPCI), SCOPUS Κ.Α.Π.

1. «Symmetric embedded predictor–corrector (EPCM) methods with vanished phase–lag and its derivatives for the numerical solution of the Schrödinger equation» , P. I. Stasinou, and T. E. Simos , AIP Conference Proceedings 1790, 150034 (2016) ; <https://doi.org/10.1063/1.4968773>

2. «Symmetric embedded predictor–corrector (EP2CM) methods with vanished phase–lag and its derivatives for second order problems» , P. I. Stasinou, and T. E. Simos , AIP Conference Proceedings 1863, 560096 (2017) ; <https://doi.org/10.1063/1.4992779>

3. «Symmetric embedded predictor–predictor–corrector (EPPCM) methods with vanished phase–lag and its derivatives for second order problems» , P. I. Stasinou, and T. E. Simos , AIP Conference Proceedings 1906, 200023 (2017); <https://doi.org/10.1063/1.5012499>

4. «Symmetric embedded predictor3–Corrector (EP3CM) methods with vanished phase–lag and its derivatives» , P. I. Stasinou, and T. E. Simos , AIP Conference Proceedings 1978, 470110 (2018) ; <https://doi.org/10.1063/1.5044180>

5. «Symmetric embedded predictor4–Corrector (EP4CM) complete in phase methods» , P. I. Stasinou, and T. E. Simos , AIP Conference Proceedings 2040, 150017 (2018) ; <https://doi.org/10.1063/1.5079220>

6. «Symmetric embedded predictor5–Corrector (EP5CM) full in phase methods» , P. I. Stasinou, and T. E. Simos , AIP Conference Proceedings 2116, 450109 (2019) ; <https://doi.org/10.1063/1.5114576>

Κύριο αποτέλεσμα αυτής της εργασίας είναι η ανάπτυξη αποτελεσματικότερων μεθόδων πολλαπλών βημάτων για την αριθμητική επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων με ταλαντωτικές ή περιοδικές λύσεις. Η νέα μεθοδολογία βασίζεται στην απαίτηση εξαφάνισης του **phase-lag** καθώς και των παραγώγων της, όπως και στην προσπάθεια επίτευξης υψηλής αλγεβρικής τάξης για την καλύτερη απόδοση και αποτελεσματικότητα των μεθόδων αυτών.

Βάσει αυτής της νέας μεθοδολογίας αναπτύξαμε :

- 1) Μια μέθοδο που έχει εξαφανισμένο **phase-lag** αλλά επίσης εξαφανισμένη τη πρώτη παράγωγός της, η οποία είναι δέκατης αλγεβρικής τάξης.

2) Μια μέθοδο που έχει εξαφανισμένο **phase-lag** αλλά επίσης εξαφανισμένη τη πρώτη και τη δεύτερη παράγωγός της , η οποία είναι δέκατης αλγεβρικής τάξης.

Η αριθμητική ακρίβεια για την ολοκλήρωση πλανητικών τροχιών καθορίζεται από την συσσώρευση των σφαλμάτων στρογγυλοποίησης και των σφαλμάτων αποκοπής. Για τις συνήθεις μεθόδους πολλών σταδίων του **Störmer** , ακόμη και εάν ληφθούν μέτρα μείωσης του σφάλματος στρογγυλοποίησης , το σφάλμα αποκοπής εξακολουθεί να αναπτύσσεται και να οδηγεί σε ένα σφάλμα γεωγραφικού μήκους το οποίο αναπτύσσεται τετραγωνικά με το χρόνο.

Οι **Quinlan** και **Tremaine** [266] ανέπτυξαν μια συμμετρική μέθοδο πολλαπλών σταδίων για την οποία το σφάλμα αποκοπής αναπτύσσεται μόνο γραμμικά με το χρόνο.

Πηγές σφαλμάτων κατά την ολοκλήρωση είναι :

- 1) Σφάλμα περικοπής (που προκύπτει από το μηδενικό βήμα)
- 2) Σφάλμα στρογγυλοποίησης (αποτέλεσμα από την πεπερασμένη ακρίβεια)
- 3) Σφάλμα στις αρχικές συνθήκες και τις μάζες των πλανητών
- 4) Σφάλματα στο φυσικό μοντέλο π.χ. παραμέληση της απώλειας ηλιακής μάζας

Στο κεφάλαιο Εισαγωγή αρχικά δίνεται συνοπτικά η θεωρία της **backward error analysis** καθώς και των διαφορικών εξισώσεων με τις οποίες ασχοληθήκαμε. Παρουσιάζονται οι βασικές κατηγορίες στις οποίες διακρίνονται οι διαφορικές εξισώσεις και γίνεται αναφορά στην μέθοδο της αριθμητικής ολοκλήρωσης.

Ακόμη αναφερόμαστε στο βασικό πρόβλημα με το οποίο ασχοληθήκαμε, την εξίσωση **Schrödinger** . Στο τελευταίο μέρος του κεφαλαίου γίνεται μια ιστορική ανασκόπηση σχετικά με την έρευνα και μελέτη προβλημάτων αρχικών τιμών δεύτερης τάξης μέχρι και τις πιο πρόσφατες εξελίξεις.

Διαφορικές εξισώσεις

Βασική ιδέα της backward error analysis (BEA) είναι να εκτιμηθεί ή να αξιολογηθεί η ποιότητα μιας αριθμητικής λύσης ενός συγκεκριμένου προβλήματος θεωρώντας την αριθμητική λύση αυτή ως την ακριβή λύση ενός κοντινού - παρεμφερούς προβλήματος. Γενικά θα επικεντρωθούμε στη χρήση BEA , στην αριθμητική επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων (ordinary differential equations - ODE) με έμφαση σε προβλήματα αρχικών τιμών (initial value problems - IVP) .

Σχετικά με την ανάλυση σφαλμάτων για διαφορικές εξισώσεις της μορφής :

$$\frac{dy}{dt} \equiv \dot{y}(t) = f(y, t) , y(t_0)=y_0 \text{ (I)}$$

όπου y, f, t ορίζονται κατάλληλα , χρειαζόμαστε διάφορες έννοιες όπως αυτή του ελλείματος-υπολοίπου και του **global error** .

The defect : Έλλειμα - υπόλοιπο ονομάζεται η ποσότητα

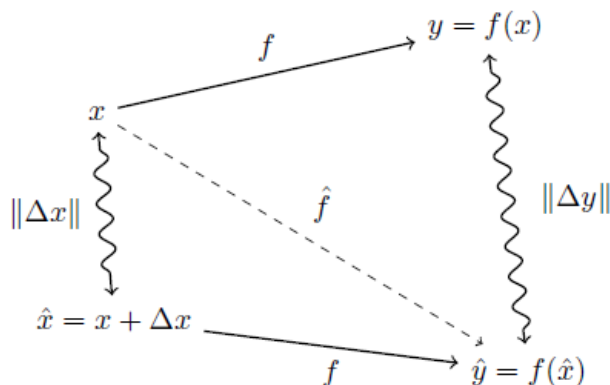
$$\delta(t) : = \dot{u}(t) - f(u, t) \text{ (II)}$$

Αρχικά πρέπει να υπολογιστεί η ποσότητα αυτή για να μπορέσουμε να υπολογίσουμε ένα φράγμα για το **global error** $\| y(t) - u(t) \|$, όπου $y(t)$ είναι η ακριβής λύση του συστήματος (I) και $u(t)$ είναι ένας εκτιμητής που προκύπτει από την αριθμητική λύση της εξίσωσης $y_n = u(t_n)$.

Global error : Το **global error** του εκτιμητή $u(t)$ της αριθμητικής λύσης του συστήματος (I) είναι η διαφορά $E(t) = y(t) - u(t)$ ανάμεσα στην ακριβή λύση $y(t)$ και του εκτιμητή. Σε κάποιες περιπτώσεις αναφέρεται ως η νόρμα $\| y(t) - u(t) \|$ της μεταξύ τους διαφοράς.

Αν λύσουμε τη σχέση (II) ως προς $\dot{u}(t) = f(u, t) + \delta(t)$ βλέπουμε ουσιαστικά ότι το υπόλοιπο είναι το ποσό κατά το οποίο η αριθμητική λύση δεν ικανοποιεί την διαφορική εξίσωση (I). Η έννοια αυτή του ελλείματος είναι συνδεδεμένη και με την ιδέα της BEA γιατί το υπόλοιπο είναι το ποσό κατά το οποίο η αριθμητική λύση αποτυγχάνει να ικανοποιήσει τη διαφορική εξίσωση όμως είναι επίσης και η διαφορά μεταξύ της αρχικής εξίσωσης (I) και της εξίσωσης που λύνεται με τη μέθοδο **defect control**.

Η γενική ιδέα της BEA μπορεί να περιγραφεί με τη βοήθεια του παρακάτω σχήματος :



Αρχικά θεωρούμε πως έχουμε ένα συγκεκριμένο x για ένα προκαθορισμένο πρόβλημα f . Έτσι ας είναι y η ακριβής λύση του προβλήματος f και \hat{y} η προσεγγιστική λύση. Καθώς πολλές φορές η ακριβής λύση συνήθως δεν είναι διαθέσιμη, παίρνουμε ένα άλλο \hat{x} και με κάποια μέθοδο παίρνουμε μια προσεγγιστική τιμή \hat{y} . Έτσι προκύπτει το $\|\Delta y\|$ που είναι η απόσταση μεταξύ της ακριβούς λύσης y από την προσεγγιστική λύση \hat{y} .

Forward error (FE) : είναι η διαφορά $\Delta y = \hat{y} - y$

Backward error (BE) : είναι η διαφορά $\Delta x = \hat{x} - x$

Έτσι αν είναι \hat{y} μια προσεγγιστική λύση σε ένα πρόβλημα f για ένα καθορισμένο x , τότε το προς τα πίσω σφάλμα είναι η ποσότητα Δx της οποίας πρέπει να μεταβληθεί η τιμή του χέτσι ώστε το \hat{y} να γίνει η ακριβής λύση του προβλήματος f με είσοδο το $\hat{x} = x + \Delta x$.

Συνήθως θέλουμε το **forward error** να είναι μικρό δεδομένου ότι επιδιώκουμε συνήθως την ακριβή λύση στο συγκεκριμένο πρόβλημα f . Όμως σπάνια είμαστε σε θέση να εκτιμήσουμε το **forward error** άμεσα αφού σε γενικές γραμμές γνωρίζουμε πολύ λίγα για την ακριβή λύση. Έτσι με την BEA εστιάζουμε στο κατά πόσο μεγάλο πρέπει να είναι το Δx για το συγκεκριμένο x ώστε η αριθμητική λύση \hat{y} να είναι η λύση του καθορισμένου προβλήματος f με είσοδο βέβαια το $\hat{x} = x + \Delta x$.

Αντίθετα με το **forward error** το **backward error** μας επιτρέπει να δούμε την προσεγγιστική λύση \hat{y} του προβλήματος f ως την ακριβή λύση ενός άλλου τροποποιημένου προβλήματος \hat{f} . Έτσι λοιπόν η βασική ιδέα της BEA είναι πως αν η ποσότητα $\|\Delta x\|$ είναι μικρή τότε και η αριθμητική λύση είναι η ακριβής λύση σε ένα κοντινό πρόβλημα.

Ένα από τα κύρια πλεονεκτήματα της BEA σε γενικές γραμμές είναι ότι επιτρέπει σε κάποιον να αξιολογήσει την ποιότητα μιας λύσης ενός προβλήματος ακόμη και αν δεν γνωρίζει ποια είναι η ακριβής λύση. Ξέρει πως αν το **backward error** είναι μικρό και οι σχετικές ποσότητες στο πρόβλημα διαφοροποιούνται συνεχώς κάτω από ορισμένες διαταραχές τότε κάποιος έχει μια έγκυρη λύση.

Οι διαφορικές εξισώσεις είναι τα πιο σημαντικά μοντέλα για την περιγραφή διάφορων φυσικών φαινομένων. Η κίνηση υγρών ή στερεών αντικειμένων, η παραμόρφωση ελαστικών αντικειμένων, η ροή θερμότητας, οι χημικές ή πυρηνικές αντιδράσεις διαμορφώνονται από διαφορικές εξισώσεις. Αν μια διαφορική εξίσωση έχει μόνο μία ανεξάρτητη μεταβλητή, αναφέρεται ως συνήθης διαφορική εξίσωση (**ordinary differential equation**). Εάν υπάρχουν περισσότερες από μία ανεξάρτητες μεταβλητές, τότε ονομάζεται μερική διαφορική εξίσωση (**partial differential equation**).

Είναι γνωστό από τη θεωρία των διαφορικών εξισώσεων πως η λύση μιας διαφορικής εξίσωσης μπορεί να οριστεί με μοναδικό τρόπο, μόνο αν επισημανθούν επιπρόσθετες συνθήκες στη λύση. Αυτές οι συνθήκες συνήθως αναφέρονται ως οριακές συνθήκες και στα περισσότερα πρακτικά προβλήματα καθορίζονται σε ένα ή περισσότερα σημεία του διαστήματος στο οποίο απαιτείται η λύση.

Οι οριακές συνθήκες είναι αλγεβρικές συνθήκες σχετικά με την λύση της εξίσωσης ή παραγώγων αυτής. Προκειμένου η λύση να ορισθεί μοναδικά, ο αριθμός των ανεξάρτητων οριακών συνθηκών θα πρέπει να ισούται με την τάξη της διαφορικής εξίσωσης.

Ως τάξη μιας διαφορικής εξίσωσης εννοείται η τάξη της υψηλότερης παραγώγου που εμφανίζεται σε αυτήν. Τα προβλήματα που αφορούν τη λύση διαφορικών εξισώσεων μπορούν να ταξινομηθούν ανάλογα με τον τύπο των οριακών συνθηκών. Τα πιο απλά προβλήματα είναι αυτά όπου ο απαιτούμενος αριθμός οριακών συνθηκών καθορίζεται σε ένα μόνο σημείο. Αυτά τα προβλήματα αναφέρονται ως προβλήματα αρχικών τιμών (**initial value problems**). Από την άλλη, προβλήματα όπου οι οριακές συνθήκες καθορίζονται σε δύο διαφορετικά σημεία αναφέρονται ως προβλήματα **two-point boundary value problems** ή απλούστερα ως προβλήματα οριακών τιμών (**boundary value problems**).

Οι μέθοδοι για την επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών, εκτελούνται γενικά κατά στάδια-βήματα, με την έννοια ότι χρησιμοποιώντας τη τιμή της λύσης τη στιγμή $t \leq t_i$, υπολογίζουμε την τιμή της μια στιγμή αργότερα $t_{j+1} = t_j + h_j$. Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται για $j = 0, 1, 2, \dots$, μέχρι να καλυφθεί το απαιτούμενο εύρος χρόνου.

Αξίζει να σημειωθεί ότι στο πρώτο στάδιο όπου $j = 0$, η λύση δεν είναι γνωστή όπου $t < t_0$, και έτσι μπορούμε μόνο να χρησιμοποιήσουμε τις γνωστές τιμές για $t = t_0$, για να υπολογίσουμε την λύση για t_1 . Έτσι, οι μέθοδοι που απαιτούν περισσότερες από μία προηγούμενες τιμές για τον υπολογισμό της λύσης, χρειάζονται άλλη τεχνική για να παράγουν τον απαιτούμενο αριθμό των αρχικών τιμών. Αυτές οι μέθοδοι αναφέρονται ως μέθοδοι πολλαπλών βημάτων ή αλλιώς **multistep methods**.

Μια απλή μέθοδος για την αριθμητική λύση των διαφορικών εξισώσεων είναι η λεγόμενη μέθοδος της αριθμητικής ολοκλήρωσης (**numerical integration method**). Σε αυτή τη μέθοδο, η απόσταση h , θεωρείται σε διαφορετικά βήματα ότι είναι σταθερή και γι' αυτό έχουμε ως $t_j = t_0 + jh$. Επίσης, η υπολογιζόμενη τιμή της λύσης στο νέο σημείο y_{j+1} εξαρτάται μόνο από ένα σταθερό αριθμό προηγούμενων τιμών. Έτσι μπορούμε να γράψουμε :

$$y_{j+1} = \sum_{k=0}^m a_k y_{j-k} + h \sum_{k=-1}^m b_k y'_{j-k} \quad (4.1)$$

όπου y_j είναι η υπολογιζόμενη λύση και $y'_i = f(t_i, y_i)$ είναι υπολογιζόμενη τιμή της παραγώγου όταν $t = t_i$. Ο συντελεστής h έχει συμπεριληφθεί στον δεύτερο όρο ώστε οι συντελεστές b_k να είναι ανεξάρτητοι του h . Ο παραπάνω τύπος χρησιμοποιεί πληροφορίες για $m+1$ προηγούμενα σημεία.

Κάποιοι από τους συντελεστές a_k , b_k μπορούν να είναι μηδενικοί, αλλά θεωρούμε γενικά πως είτε ο συντελεστής a_m ή b_m είναι μη μηδενικός.

Ακόμη, τουλάχιστον ένας από τους συντελεστές b_k πρέπει να είναι οπωσδήποτε μη μηδενικός διότι αλλιώς η διαφορική εξίσωση δεν θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί.

Αν τώρα $b_{-1} = 0$ τότε ο παραπάνω τύπος εκφράζεται ως γραμμικός συνδυασμός των γνωστών παρελθουσών τιμών του y_{j-k} και των παραγώγων τους, τα οποία μπορούν εύκολα να εκτιμηθούν. Οι τύποι αυτοί ονομάζονται άμεσοι τύποι (**explicit ή forward integration formulas**). Παράδειγμα άμεσου τύπου είναι η γνωστή μέθοδος του Euler: $y_{j+1} = y_j + h y'_j$. Οι άμεσοι τύποι (**explicit**), ουσιαστικά προεκτείνουν την τιμή της λύσης στο επόμενο σημείο, χρησιμοποιώντας τα προηγούμενα υπολογισμένα σημεία και έτσι είναι αρκετά πιθανό να έχουν και μεγαλύτερα σφάλματα.

Αν έχουμε $b_{-1} \neq 0$ τότε η τιμή y_{j+1} εμφανίζεται και στο δεξί μέλος του παραπάνω τύπου, καθώς: $y'_{j+1} = f(t_{j+1}, y_{j+1})$. Επομένως, αυτή η εξίσωση μπορεί να λυθεί μόνο επαναληπτικά, εκτός αν η διαφορική εξίσωση είναι γραμμική. Οι τύποι αυτοί ονομάζονται έμμεσοι τύποι (**implicit formulas**). Σε κάθε λοιπόν βήμα θα πρέπει να λύνουμε ένα σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων που θα απαιτούσε σημαντική προσπάθεια άρα και υπολογιστό κόστος. Ωστόσο, αυτό το κόστος συνήθως αντισταθμίζεται από την ακρίβεια ή την σταθερότητα αυτών των τύπων. Παράδειγμα τέτοιου τύπου είναι ο τραπεζοειδής κανόνας: $y_{j+1} = y_j + \frac{h}{3}(y'_{j+1} + y'_j)$.

Τύποι αριθμητικής ολοκλήρωσης μπορούν να ληφθούν χρησιμοποιώντας αριθμητικής διαφόρισης τύπους ή τύπους ολοκλήρωσης πολυωνύμων παρεμβολής. Επίσης, είναι δυνατή η απόκτηση των τύπων αυτών, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των απροσδιόριστων συντελεστών. Στη μέθοδο αυτή, οι συντελεστές προσδιορίζονται, απαιτώντας ο τύπος να είναι ακριβής όταν η πραγματική λύση είναι ένα πολυώνυμο συγκεκριμένου βαθμού.

Εάν απαιτήσουμε ο παραπάνω τύπος (4.1) να είναι ακριβής για ένα πολυώνυμο βαθμού μικρότερου ή ίσο με r , τότε μπορούμε να πάρουμε $r+1$ εξισώσεις αφήνοντας $y_k = t_k^i$ για $i = 0, 1, \dots, r$. Για να απλουστεύσουμε λίγο τους υπολογισμούς, μπορούμε να υποθέσουμε ότι $t_j = 0$ καθώς μια μετατόπιση δεν θα επηρέαζε τους συντελεστές. Ακόμη, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι παράγοντες του h ακυρώνονται και επομένως μπορούμε να υποθέσουμε ότι $h = 1$. Από τις παραπάνω αυτές απλουστεύσεις [2] έχουμε τις ακόλουθες συνθήκες :

$$\sum_{k=0}^m a_k = 1, (i = 0) \quad (4.2)$$

$$-\sum_{k=0}^m k a_k + \sum_{k=-1}^m b_k = 1, (i = 1) \quad (4.3)$$

$$\sum_{k=0}^m (-k)^i a_k + i \sum_{k=-1}^m (-k)^{i-1} b_k = 1, (i = 2, \dots, r) \quad (4.4)$$

Αυτές είναι $(r+1)$ εξισώσεις για $(2m+3)$ συντελεστές.

Ωστόσο, ορισμένοι από τους συντελεστές μπορεί να θεωρηθούν μηδενικοί. Εάν ο αριθμός των συντελεστών είναι $(r+1)$, τότε γενικά μπορεί να λυθεί για όλα τα a_k , b_k . Εάν ο αριθμός των συντελεστών είναι μικρότερος από $(r+1)$, τότε θα έχουμε κάποιες ελεύθερες παραμέτρους που μπορούν βέβαια να χρησιμοποιηθούν για την επίτευξη άλλων στόχων. Για παράδειγμα, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτές τις παραμέτρους για να κάνουμε τον συντελεστή του σφάλματος μικρό ή για να βελτιώσουμε την σταθερότητα ενός τύπου.

Δεδομένου ότι οι αριθμητικές μέθοδοι ολοκλήρωσης, προσεγγίζουν μια συνεχή λειτουργία με ένα διακριτό άθροισμα, αναγκαστικά θα υπάρχει κάποιο σφάλμα αποκοπής (truncation error). Εάν η τιμή y_k είναι γνωστή για προηγούμενα σημεία, τότε το σφάλμα αποκοπής είναι ουσιαστικά το σφάλμα στην ολοκλήρωση κατά το τελευταίο βήμα, το οποίο μπορεί εύκολα να εκτιμηθεί.

Για παράδειγμα , χρησιμοποιώντας τη σειρά Taylor , γνωρίζουμε ότι το σφάλμα αποκοπής στη μέθοδο Euler , είναι : $\frac{1}{2}h^2 y''(\xi)$. Αυτό το σφάλμα αποκοπής αναφέρεται ως τοπικό σφάλμα αποκοπής (local truncation error) . Σε γενικές γραμμές , το τοπικό σφάλμα αποκοπής αναμένεται να είναι της μορφής : $ch^{r+1}y^{(r+1)}(\xi)$, όπου r είναι η τάξη του τύπου. Ο συντελεστής c στον τύπο του σφάλματος αποκοπής είναι δυνατό να εκτιμηθεί με τη μέθοδο των απροσδιόριστων συντελεστών.

Αν οι δύο πρώτες εξισώσεις της σχέσης (4.2) ικανοποιούνται , τότε η αντίστοιχη μέθοδος αριθμητικής ολοκλήρωσης λέμε ότι είναι συνεπής (consistent) . Η συνέπεια είναι ισοδύναμη με τη διασφάλιση ότι ο τύπος είναι ακριβής για γραμμικές συναρτήσεις. Αν ο τύπος δεν είναι συνεπής τότε το σφάλμα αποκοπής πάνω από το δεδομένο πεπερασμένο διάστημα μπορεί να μην τείνει στο μηδέν , ακόμη και αν το h τείνει στο μηδέν. Για παράδειγμα, η αριθμητική μέθοδος ολοκλήρωσης : $y_{j+1} = y_j + 2hy'_j$ δεν είναι συνεπής , παρότι το τοπικό σφάλμα αποκοπής της τείνει στο μηδέν καθώς το h τείνει στο μηδέν.

Οι μερικές (partial) διαφορικές εξισώσεις είναι επίσης βασικά εργαλεία για τη μοντελοποίηση διάφορων φυσικών φαινομένων. Η αριθμητική λύση όμως των μερικών διαφορικών εξισώσεων απαιτεί ένα μεγάλο μέρος του χρόνου και της μνήμης του υπολογιστή , κατά συνέπεια έχουμε μεγάλη δαπάνη υπολογιστικού κόστους. Αυτή η δυσκολία έγκειται στο γεγονός ότι η αριθμητική λύση των μερικών διαφορικών εξισώσεων παράγει τεράστιο όγκο δεδομένων.

Μια διαφορική εξίσωση μπορεί να ταξινομηθεί σύμφωνα με διάφορες ιδιότητες [2]. Μερικές από τις πιο χαρακτηριστικές είναι : η τάξη της , όπου αναφερόμαστε στην υψηλότερη παράγωγο που εμφανίζεται στην εξίσωση καθώς και η διάσταση της όπου είναι ο αριθμός των ανεξάρτητων μεταβλητών στην εξίσωση.

Μερικές φορές για προβλήματα αρχικών τιμών , η διάσταση αναφέρεται στον αριθμό των μεταβλητών του χώρου , ενώ ο χρόνος δεν μετράται.

Η πλειονότητα των προβλημάτων στην επιστήμη αλλά και στη μηχανική εμπίπτουν συνήθως σε μία από τις τρεις παρακάτω κατηγορίες : προβλήματα ισορροπίας , προβλήματα ιδιοτιμών και προβλήματα εξέλιξης.

Τα προβλήματα ισορροπίας περιγράφουν μία σταθερή κατάσταση στην οποία η διαμόρφωση ισορροπίας ενός συστήματος πρόκειται να προσδιοριστεί με την επίλυση μιας διαφορικής εξίσωσης υπό ορισμένες οριακές συνθήκες , που συνήθως καθορίζονται σε μια κλειστή καμπύλη που περικλείει την περιοχή πάνω από την οποία απαιτούμαι τη λύση.

Τα προβλήματα ιδιοτιμών μπορούν να θεωρηθούν ως μια ομοιογενής εκδοχή προβλημάτων οριακών τιμών. Τέτοια προβλήματα περιγράφονται στον συντονισμό ηλεκτρικών κυκλωμάτων ή την ακουστική καθώς και στην σταθερότητα υγρών ή ελαστικών αντικειμένων.

Σε αντίθεση με τα προβλήματα ισορροπίας , τα προβλήματα εξέλιξης περιγράφουν τον υπολογισμό μιας ασταθούς κατάστασης , όπου δίνεται η αρχική διαμόρφωση και πρέπει να βρούμε πώς εξελίσσεται το σύστημα χρονικά. Τυπικά παραδείγματα τέτοιων προβλημάτων περιλαμβάνουν την κίνηση των υγρών , τη παραμόρφωση σε ελαστικά αντικείμενα καθώς και τη διάδοση της θερμότητας.

Σκοπός της παρούσας διατριβής αλλά και η έρευνα η οποία έγινε , είναι η κατασκευή γρηγορότερων αλλά και πιο αξιόπιστων αλγορίθμων για την λύση της εξίσωσης Schrödinger καθώς και συναφή προβλημάτων.

Πάρα πολλά μαθηματικά μοντέλα στη θεωρητική φυσική , χημεία , επιστήμες των υλικών , κβαντική μηχανική , κβαντική χημεία , ηλεκτρονική κλπ μπορούν να εκφραστούν μέσω προβλημάτων της μορφής :

$$y'' = f(x, y) , y(x_0) = y_0 , y'(x_0) = y'_0 \quad (4.5)$$

Στην υποενότητα που ακολουθεί δείχνουμε πως και η εξίσωση **Schrödinger** με την οποία ασχοληθήκαμε μπορεί να εκφραστεί με την παραπάνω μορφή.

Οι μέθοδοι για την προσέγγιση της λύσης της εξίσωσης **Schrödinger** αλλά και σχετικών προβλημάτων μπορούν να χωριστούν σε δύο κύριες κατηγορίες :

- Μέθοδοι με σταθερούς συντελεστές
- Μέθοδοι με συντελεστές ανάλογους με τη συχνότητα του προβλήματος

Κύριο αποτέλεσμα της έρευνας μας είναι η ανάπτυξη αποτελεσματικότερων πολυβηματικών μεθόδων για την αριθμητική επίλυση συστημάτων συνήθων διαφορικών εξισώσεων με ταλαντωτικές ή περιοδικές λύσεις.

Εξίσωση Schrödinger

Στις αρχές του εικοστού αιώνα, πειραματικά στοιχεία υποδηλώνουν ότι τα ατομικά σωματίδια έχουν συμπεριφορά παρόμοια με τα κύματα στην φύση. Για παράδειγμα, βρέθηκε ότι τα ηλεκτρόνια δίνουν πρότυπα περίθλασης όταν περνούν μέσω μιας διπλής σχισμής με παρόμοιο τρόπο με τα φωτεινά κύματα. Ως εκ τούτου, ήταν λογικό να υποτεθεί ότι μια εξίσωση κύματος θα μπορούσε να εξηγήσει τη συμπεριφορά των ατομικών σωματιδίων.

Ο Schrödinger ήταν ο πρώτος που κατέγραψε μια τέτοια εξίσωση κύματος. Πολλές συζητήσεις στη συνέχεια επικεντρώθηκαν σε αυτό που σήμαινε η ουσιαστικά η εξίσωση. Οι ιδιοτιμές της εξίσωσης των κυμάτων αποδείχθηκαν ίσες με τα επίπεδα ενέργειας του κβαντικού μηχανικού συστήματος και η καλύτερη δοκιμή της εξίσωσης ήταν όταν χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση των ενεργειακών επιπέδων του ατόμου υδρογόνου και τα επίπεδα ενέργειας βρέθηκαν να συμφωνούν με το νόμο του Rydberg .

Στα καθαρά μαθηματικά, η εξίσωση Schrödinger και οι παραλλαγές της είναι μια από τις βασικές εξισώσεις που μελετήθηκαν στο πεδίο των μερικών διαφορικών εξισώσεων και έχει εφαρμογές στη γεωμετρία, τη φασματική θεωρία, τη θεωρία σκέδασης και την κβαντομηχανική.

Υπάρχουν στην πραγματικότητα δύο (στενά συνδεδεμένες) παραλλαγές της εξίσωσης Schrödinger, η εξαρτώμενη από το χρόνο εξίσωση Schrödinger και ο ανεξάρτητη από το χρόνο εξίσωση Schrödinger .

Καθώς η εξίσωση Schrödinger μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να περιγράψει την κβαντική δυναμική πολλών σωματιδίων υπό την επίδραση μιας ποικιλίας δυνάμεων, για απλότητα θεωρούμε απλά ένα μεμονωμένο σωματίδιο με κάποια μάζα σε διάστατο χώρο που κινείται υπό την επίδραση ενός δυναμικού, που για εμάς θα είναι μια συνάρτηση .

Από τη σκοπιά της αριθμητικής ανάλυσης, το πρόβλημα της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger για ένα σώμα μάζας m μη σχετικιστικό (δηλαδή ο λόγος της μάζας του σώματος προς την ακτίνα του είναι πολύ μικρότερος της μονάδας $\ll 1$), χωρίς spin, το οποίο κινείται, υπό την επίδραση ενός στατικού δυναμικού πεδίου, σε μία διάσταση είναι η επίλυση απλών διαφορικών εξισώσεων ιδιοτιμών με συνοριακές συνθήκες [3].

Η κυματοσυνάρτηση, η οποία συνήθως συμβολίζεται με το ελληνικό γράμμα Ψ , είναι η συνάρτηση που ικανοποιεί την εξίσωση **Schrödinger** και ουσιαστικά περιγράφει ένα κύμα. Σε αυτή περιέχεται και η πληροφορία για την κίνηση ενός σωματιδίου στο χώρο το οποίο συμπεριφέρεται σαν ένα κύμα με μήκος $\lambda = \frac{h}{p}$, όπου h είναι η σταθερά δράσεως του Πλανκ, και p το μέτρο της ορμής του. Ισοδύναμα, η σχέση αυτή μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει του κυματιριθμού k και της ανηγμένης σταθερά του Πλανκ \hbar ως $p = \hbar k, \hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Η εξίσωση **Schrödinger** έχει δύο μορφές, μία στην οποία ο χρόνος εμφανίζεται ρητά και έτσι περιγράφει πως η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου εξελίσσεται χρονικά και αναφέρεται ως χρονικά εξαρτώμενη από το χρόνο εξίσωση κύματος **Schrödinger**. Η άλλη μορφή είναι αυτή στην οποία η εξάρτηση του χρόνου δεν υπάρχει και ως εκ τούτου αναφερόμαστε σε αυτή ως τη χρονοανεξάρτητη εξίσωση **Schrödinger**. Αν και αναφερόμαστε σε αυτές ως δύο ξεχωριστές μορφές, παρόλ' αυτά η χρονοανεξάρτητη εξίσωση μπορεί εύκολα να εξαχθεί από την εξαρτημένη, εκτός εάν το δυναμικό εξαρτάται από το χρόνο [3].

Σε γενικές γραμμές, οι λύσεις για την εξαρτώμενη από τον χρόνο εξίσωση **Schrödinger** περιγράφουν τη δυναμική συμπεριφορά του σωματιδίου, με παρόμοιο τρόπο όπου ο Νεύτωνας περιγράφει με την εξίσωση $F = ma$, τη δυναμική ενός σωματιδίου στην κλασική φυσική.

Ωστόσο, υπάρχει μια σημαντική διαφορά. Με την επίλυση της εξίσωσης του Νεύτωνα μπορούμε να προσδιορίσουμε τη θέση του σωματιδίου ως συνάρτηση του χρόνου, ενώ με την επίλυση της εξίσωσης **Schrödinger** παίρνουμε μια κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$, η οποία μας δίνει τη πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου σε κάποια περιοχή η οποία εξαρτάται από τον χρόνο.

Η εξίσωση Schrödinger είναι η :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.6)$$

όπου $\psi(x)$ οι κυματοσυναρτήσεις που αναπαριστούν τις ιδιοκαταστάσεις ενέργειας , μαζί με τη συνθήκη κανονικοποίησης :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x) dx = 1. \quad (4.7)$$

Ο τελεστής \hat{H} που θα χρησιμοποιήσουμε παρακάτω δίνεται από την σχέση :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x}). \quad (4.8)$$

Η εξίσωση (4.6) είναι λοιπόν μια εξίσωση ιδιοτιμών :

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.9)$$

η οποία έχει ως λύσεις ένα διακριτό σύνολο από πραγματικές συναρτήσεις $\psi_n^*(x) = \psi_n(x)$ τέτοιες ώστε $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$.

Οι ιδιοκαταστάσεις $\psi_n(x)$ αποτελούν μια ορθοκανονική βάση , έτσι ώστε οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση $\phi(x)$ να δίνεται από το γραμμικό συνδυασμό :

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (4.10)$$

Έχουμε πως για οποιαδήποτε κατάσταση , η συνάρτηση :

$$p_\phi(x) = |\phi(x)|^2 = \phi^*(x)\phi(x) \quad (4.11)$$

είναι η πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του σωματιδίου στη θέση x , δηλαδή η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στο διάστημα $[x_1, x_2]$, και δίνεται από τον τύπο :

$$P_\phi(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \phi^*(x)\phi(x) dx \quad (4.12)$$

Έτσι από τη σκοπιά της αριθμητικής ανάλυσης, το πρόβλημα ιδιοτιμών (4.6) ουσιαστικά ανάγεται στη λύση μιας διαφορικής εξίσωσης δεύτερης τάξης όπως θα δείξουμε παρακάτω. Οι ουσιαστικές διαφοροποιήσεις σε σχέση με άλλες διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης είναι ότι αντί να έχουμε πρόβλημα αρχικών τιμών [3], έχουμε πρόβλημα συνοριακών τιμών (δηλαδή τιμές της συνάρτησης ή της παραγώγου σε δύο σημεία), καθώς επίσης ότι η ιδιοτιμή (ενέργεια) είναι άγνωστη και πρέπει να προσδιοριστεί ως μέρος της λύσης.

Η ποσότητα E , που έχουμε εντοπίσει ως ενέργεια του σωματιδίου, είναι μια ελεύθερη παράμετρος στην εξίσωση. Με άλλα λόγια, σε κανένα στάδιο δεν έχει τεθεί κανένας περιορισμός για τις πιθανές τιμές του E .

Έτσι, αν θέλουμε να καθορίσουμε τη συνάρτηση κύματος για ένα σωματίδιο για κάποια συγκεκριμένη τιμή του E που κινείται με την παρουσία ενός δυναμικού $V(x)$, το μόνο που πρέπει να κάνουμε είναι να εισάγουμε αυτήν την τιμή του E στην εξίσωση με το κατάλληλο δυναμικό $V(x)$, και να επιλύσουμε την αντίστοιχη εξίσωση κύματος.

Για να είναι φυσικά αποδεκτή, η συνάρτηση κύματος πρέπει να ικανοποιεί δύο συνθήκες, πρώτον ότι η συνάρτηση του κύματος πρέπει να είναι κανονικοποιησιμη και δεύτερον, ότι η συνάρτηση κύματος και η παράγωγος της πρέπει να είναι συνεχείς.

Λόγω του ότι είναι βέβαιο γεγονός ότι θα βρούμε ένα σωματίδιο που μελετούμε κάπου στο χώρο, θα πρέπει η συνολική πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο σε ολόκληρο το χώρο να ισούται με μονάδα. Μαθηματικά, αυτό μεταφράζεται για να είναι φυσικά αποδεκτή μια κυματοσυνάρτηση πρέπει να ικανοποιεί την συνθήκη κανονικοποίησης δηλαδή :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1. \quad (4.13)$$

Καθώς το ολοκλήρωμα πρέπει να είναι πεπερασμένο, πρέπει $\psi(x) \rightarrow 0$ καθώς το $x \rightarrow \infty$ έτσι ώστε το ολοκλήρωμα να συγκλίνει σε μια πεπερασμένη τιμή. Το σημαντικό εδώ είναι ότι πρέπει να ελέγχουμε αν η λύση της κυματοσυνάρτησης $\psi(x)$ για συγκεκριμένη τιμή του E ικανοποιεί ή όχι την συνθήκη κανονικοποίησης.

Έτσι στην πραγματικότητα, μόνο για ορισμένες τιμές της ενέργειας E παίρνουμε αποδεκτές κυματοσυναρτήσεις. Έχουμε δηλαδή την αντιστοιχία μιας επιτρεπόμενης ενέργειας και της κανονικοποίησης της κυματοσυνάρτησης.

Τελικά οι επιτρεπόμενες ενέργειες ενός σωματιδίου που κινείται σε ένα δυναμικό $V(x)$ περιορίζονται σε ορισμένες μόνο διακριτές τιμές, οι οποίες καθορίζονται από τη φύση του δυναμικού. Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό ως η ποσοτικοποίηση της ενέργειας, αποτέλεσμα της κβαντικής μηχανικής που έχει τεράστια σημασία για τον καθορισμό της δομής των ατόμων, ή ακόμα περισσότερο, τις ιδιότητες της ύλης συνολικά.

Η ποσοτικοποίηση της ενέργειας, δηλαδή ότι η ενέργεια είναι κβαντισμένη σε ορισμένα συστήματα, σημαίνει ότι το σύστημα μπορεί να έχει μόνο ορισμένες ενέργειες και όχι μια συνεχή ενέργεια. Δηλαδή είναι σαν να έχουμε μόνο ορισμένες ταχύτητες στις οποίες ένα αυτοκίνητο μπορεί να ταξιδέψει επειδή η κινητική του ενέργεια μπορεί να έχει μόνο ορισμένες τιμές.

Για να φέρουμε την εξίσωση στην επιθυμητή μορφή προβλημάτων αρχικών τιμών δεύτερης τάξης επιλέγουμε μια χαρακτηριστική κλίμακα μήκους L στο πρόβλημα (4.6) και θέτουμε ως $\tilde{x} = x/L$.

Τότε έχουμε ως $\tilde{\psi}(\tilde{x}) = \psi(x)\tilde{\psi}'(\tilde{x}) = d\psi(x)/d\tilde{x} = Ld\psi(x)/dx$ και έτσι ο τύπος (4.6) γίνεται :

$$\tilde{\psi}''(x) + \frac{2mL^2}{\hbar^2}(E - V(\tilde{x}L))\tilde{\psi}(\tilde{x}) = 0 \quad (4.14)$$

Αν τέλος ορίσουμε ως $v(\tilde{x}) = 2mL^2V(x)/\hbar^2 = 2mL^2V(\tilde{x}L)/\hbar^2$ και ως $\epsilon = 2mL^2E/\hbar^2$ και κάνουμε αλλαγή συμβόλων ως $\tilde{x} \rightarrow x, \tilde{\psi} \rightarrow \psi$, θα έχουμε:

$$\psi''(x) = -(\epsilon - v(x))\psi(x) \quad (4.15)$$

Προφανώς, οι λύσεις της εξίσωσης (4.6) μπορούν εύκολα να εξαχθούν από τις λύσεις της εξίσωσης (4.15) αν χρησιμοποιήσουμε τις αντικαταστάσεις:

$$x \rightarrow \frac{x}{L}, \quad E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\epsilon, \quad V(x) = \frac{\hbar^2}{2mL^2}v(x/L).$$

Παρατηρούμε λοιπόν πως η εξίσωση (4.6), μετασχηματίζεται στην εξίσωση (4.15) η οποία μας παραπέμπει σε προβλήματα αρχικών τιμών της μορφής (3.1):

$$y'' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = y'_0$$

Προβλήματα αρχικών τιμών της μορφής (3.1) έχουν γίνει αντικείμενο μελέτης πολλών ερευνητών τα τελευταία έτη. Η ενασχόληση με την επίλυση προβλημάτων της μορφής (3.1) σχετίζεται με δύο κατηγορίες. Η πρώτη αφορά προβλήματα αρχικών τιμών των οποίων η συχνότητα της περιοδικής λύσης είναι εκ των προτέρων γνωστή. Η δεύτερη κατηγορία, έχει να κάνει με προβλήματα αρχικών τιμών των οποίων δεν έχουμε γνώση της συχνότητας της περιοδικής τους λύσης.

Έτσι όπως θα δούμε και από την ανασκόπηση σχετικών ερευνών παρακάτω, έχουμε αριθμητικές μεθόδους για την επίλυση των προβλημάτων αυτών, για τις οποίες η γνώση της συχνότητας είναι αναγκαία (ή εστω μια προσέγγιση αυτής), καθώς υπάρχουν και μέθοδοι οι οποίες δεν χρησιμοποιούν καθόλου την συχνότητα της περιοδικής λύσης του προβλήματος.

Ανασκόπηση σχετικών ερευνών

Στην υποενότητα αυτή κάνουμε μια σύντομη αναδρομή στη μέχρι τώρα έρευνα σε ότι αφορά την αριθμητική επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών δεύτερης τάξης της μορφής (3.1). Ξεκινώντας με μεθόδους οι οποίες χρειάζονται την συχνότητα, δηλαδή της πρώτης κατηγορίας, αρχικά οι Murray και Brock [4] εργάστηκαν για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων με εκθετικές λύσεις όπως και οι Mise και Urabe [6] ασχολήθηκαν με την κατασκευή μεθόδου για την αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων.

Στις εργασίες των Lyche [8] και Gautschi [7] κατασκευάζονται μέθοδοι ολοκλήρωσης τριγωνομετρικών πολυωνύμων συγκεκριμένης τάξης. Μάλιστα ο Lyche αναπτύσσει μεθόδους όπου επιτυγχάνει την ολοκλήρωση συνόλου γραμμικά ανεξάρτητων συναρτήσεων όπου οι συντελεστές έχουν εξάρτηση από το βήμα της μεθόδου. Σε ότι αφορά τις τριγωνομετρικές εξισώσεις, μελέτη έγινε από τους Stiefel, Bettis [10] και Salzer [9].

Συνεχίζοντας την εργασία του Lyche [8], οι Raptis και Allison [12] κατασκεύασαν μια μέθοδο τύπου Nymeron η οποία ολοκληρώνει ένα σύνολο ανεξάρτητων γραμμικά εκθετικών και τριγωνομετρικών συναρτήσεων επιτυγχάνοντας καλύτερα αποτελέσματα από τη μέθοδο Numeron. Τη μέθοδο αυτή χρησιμοποίησαν οι Vander Berghe et.al [14] με ένα τύπο παρεμβολής και την εφάρμοσαν σε διάφορα προβλήματα.

Στην ίδια κατηγορία, αναπτύχθηκαν μέθοδοι Runge-Kutta, πολυβηματικές μέθοδοι, μέθοδοι πρόβλεψης - διόρθωσης από τους: Van De Vyver [52],[59],[61],[65],[50],[71], Simos [51],[54], Psihoyios, Simos [55],[56],[58],[60], Simos, Anastassi, [62],[64], Tang, Wang, Yan [49], Tang, Zhang, Yan [57], Tocino, Aguaiar [53], Van Daele, Vanden Berghe, Van De Vyver [63].

Οι Jain και Ananthakrishnaiah [66] στηριζόμενοι στην εργασία των Bettis και Stiefel, [10] ανέπτυξαν P-stable μεθόδους και οι Sommeijer et.al.[67] βασισμένοι στην εργασία του Gautschi [7] δημιούργησαν μεθόδους οι οποίες κάνουν χρήση για τη συχνότητα ενός διαστήματος της μορφής $[c_{min}, c_{max}]$. Παρόμοιες μεθόδους συναντάμε και στην εργασία των Van der Houwen, Sommeijer [68].

Σχετικά με την περιοδική ευστάθεια των λύσεων των αριθμητικών μεθόδων έχουν συμβάλει τα τελευταία χρόνια οι : Gonzalez - Pinto, Perez - Rodriguez, Rojas - Bello [69], οι Li - Wu [70], οι Wang - Chen [77], οι Zhao - Wang - Dai [79], οι Franco - Gomez [81], ο Coleman [82] και ο Paternoster [83] καθώς και εργασίες που αναφέρονται στη βιβλιογραφία : [71] - [76].

Παραμένοντας στην ίδια κατηγορία, όπου η συχνότητα των προβλημάτων που ασχολούμαστε, είναι εκ των προτέρων γνωστή, ο Hajj [99] δημιούργησε για την επίλυση της δισδιάστατης εξίσωσης Schrödinger έναν τύπο των πέντε σημείων. Για το ίδιο πρόβλημα συναντάμε μια γενίκευση της μεθόδου Numerov [13], των Avdelas - Konguetsof και Simos [100] η οποία είναι αποδοτικότερη αριθμητικά συγκριτικά με την μέθοδο του Hajj.

Στην βιβλιογραφία σχετικά με την πρώτη κατηγορία όπου η γνώση της συχνότητας είναι απαραίτητη από την αρχή, σημαντική κατηγορία μεθόδων, είναι οι μέθοδοι phase-fitted όπως αναφέρονται. Αυτές οι μέθοδοι, χρησιμοποιούν κάποιον από τους συντελεστές της μεθόδου ως ελεύθερη παράμετρο, η οποία υπολογίζεται έτσι ώστε να επιτευχθεί η τάξη της φάσης υστέρησης να είναι άπειρη. Τέτοιες μέθοδοι αναπτύχθηκαν στις εργασίες των Raptis-Simos [47] και Simos [89]-[98],[100]-[109]. Phase-fitted μέθοδοι παρουσιάζονται επίσης από τον Van De Vyver [225],[226].

Στις εργασίες των Avdelas - Kelafidis - Simos [102] , Kalogiratos - Simos [101] , Simos - Williams [103] και Aguiar - Simos [104] , αναπτύσσονται μέθοδοι *exponentially fitted* . Σχετικά με την ολοκλήρωση των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel-Neumann αναφέρονται οι μέθοδοι των Raptis - Cahs [19] , Simos - Raptis [87] , Simos [89],[90] όπως και οι μέθοδοι Bessel-Neumann - fitted από τον Simos [104]-[105].

Πολλές είναι οι μέθοδοι για την αριθμητική επίλυση των *Shrödinger* εξισώσεων και παρόμοιων προβλημάτων , όπως η *minimal phase-lag* μέθοδος των Chawla - Rao [136] και η συμμετρική έκτης τάξης μέθοδος του Henrici [13]. Ακόμη έχουν αναπτυχθεί μέθοδοι εκθετικά προσαρμοσμένες για την αριθμητική επίλυση των προβλημάτων αυτών από τους Kalogiratos-Simos [250] , Anastasi-Simos [62],[64],[229] .

Τελευταία έχει παραχθεί μια νέα κατηγορία μεθόδων οι οποίες δεν έχουν την ιδιότητα της συμμετρίας, είναι μη συμμετρικές. Τέτοιες μέθοδοι δημιουργήθηκαν πρόσφατα από τους Simos [108] , Tsitouras [110] , [111] , William -Simos [121] , Konguetsof - Simos [113], Papageorgiou - Tsitouras - Famelis [112]. Ένας τύπος δημιουργίας (γεννήτορες) τέτοιων μη συμμετρικών μεθόδων παρουσιάζεται στην εργασία των Avdelas - Simos [114] . Κλείνοντας την πρώτη κατηγορία προβλημάτων και σχετικά με τις μη συμμετρικές μεθόδους τελευταία έχουν συμβάλει με τις εργασίες τους οι : Simos [118],[119],[123],[124],[125], Vigo - Aguiar - Ramos [120] , Huang-Chang-Xiao [122] .

Συνεχίζουμε την ιστορική διαδρομή με την δεύτερη κατηγορία προβλημάτων για τα οποία η γνώση της συχνότητας δεν είναι αναγκαία. Στη δεύτερη αυτή κατηγορία ανήκουν και οι περισσότερες μέθοδοι για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων της μορφής (3.1).

Απαραίτητη ιδιότητα η οποία πρέπει να έχουν οι μέθοδοι για την επίλυση προβλημάτων της μορφής (3.1) είναι αυτή της φάσης υστέρησης (**phase-lag**) η οποία εξηγείται σε επόμενο κεφάλαιο. Την ιδιότητα αυτή παρουσίασαν πρώτοι οι **Brusa - Nigro** [145] και με βάση την ιδιότητα αυτή οι **Chawla - Rao** [134] ανέπτυξαν μια μέθοδο τύπου **Numerov** έκτης τάξης φάσης υστέρησης.

Πολυβηματικές μέθοδοι με πεπερασμένο διάστημα περιοδικότητας καθώς και ελάχιστη φάση υστέρησης δίνονται από τους **Chawla** [131]-[133], **Gladwell - Thomas** [146], **Van der Houwen - Sommeijer** [147]. Σημαντική είναι η συμβολή των **Lambert - Watson** [1] οι οποίοι πρώτοι όρισαν την ιδιότητα του διαστήματος περιοδικότητας καθώς και την ιδιότητα **P-stability** για την κατηγορία των μεθόδων όπου η συχνότητα είναι άγνωστη από την αρχή.

Ακόμη μεγάλη είναι η συμβολή των **Dahlquist** [126], **Hairer** [127], **Costabile** [128], **Chawla** [131]-[138], **Cash** [129],[130], **Thomas** [140]-[143], **Coleman** [144], **Voss - Serbin** [139] με τις εργασίες τους.

Επίσης για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων της μορφής (3.1) συναντάμε μεθόδους όπως του **Coleman** [160], όπου αναφέρονται οι συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται ώστε οι μέθοδοι να παρουσιάζουν την ιδιότητα της **P-stability**. Ακόμη μελετήσαμε τις μεθόδους των **Meneguetta** [161], **Ananthakrishnaiah** [163] και των **Twizell - Khaliq** [162] οι οποίοι ανέπτυξαν μεθόδους με ελάχιστη φάση υστέρησης καθώς και μεθόδους με πεπερασμένο διάστημα περιοδικότητας και τέλος οι μέθοδοι των **Van der Houwen** [164] - [166].

Μέθοδοι μεταβλητού βήματος για την δεύτερη κατηγορία προβλημάτων παρουσιάζονται στις εργασίες των **Simos** [194]-[196], **Simos - Avdelas** [193]. Σχετικά με τη μονοδιάστατη εξίσωση **Schrödinger** υπό το πρίσμα επίλυσης των ιδιοτιμών της έχουμε αρκετές μεθόδους από τους : **Simos** [200],[204], **Simos -**

Williams [203] , Simos - Aguiar [206] , Simos - Dimas - Sideridis [207].

Μέθοδοι με φάση υστέρησης (phase-lag) είναι επίσης αρκετές, όπως των: Panopoulos - Anastassi - Simos [300],[294] , Kalogiratou - Monovasilis - Simos [151], Simos [152]-[154],[157],[220] , Konguetsof - Simos [156] , Sakas -Simos [222] , Tsitouras [110].

Στη βιβλιογραφία συναντήσαμε μεθόδους με μη μηδενικό διάστημα περιοδικότητας όπως των : Simos - Mousadis [174] , Simos - Tougelidis [175] , Simos [179]-[189] , Allison - Rapti -Simos [177] όπου συναντάμε άμεσες αλλά και έμμεσες μεθόδους με σταθερούς συντελεστές . Πολυβηματικές μέθοδοι με σταθερούς συντελεστές πρόσφατα έχουμε από τους : Van der Vyver [223] , Vigo - Aguiar - Simos [220] , Sakas - Simos [222] , Panopoulos - Anastassi - Simos [294],[300] , Wang [219].

Για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Schrödinger υπάρχουν εκθετικά προσαρμοσμένες μέθοδοι όπως των : Tang - Zhang - Yan [212] , Simos [209],[213] , Liu - Ding [214] , Van der Vyver [210] ,Psihoyios - Simos [211] , Vigo - Aguiar - Simos [218] , Ixaru - Paternoster [216] .

Τέλος πρόσφατες μέθοδοι για την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger αριθμητικά με χρήση Runger-Kutta μεθόδων έχουμε στις εργασίες των : Anastassi - Simos [229],[232],[234] , Simos - Famelis - Tsitouras [236] , Van der Vyver [231],[233],[237], Simos [230].

Πολυβηματικές Γραμμικές Μέθοδοι

Στο κεφάλαιο Πολυβηματικές Γραμμικές Μέθοδοι αρχικά παρουσιάζουμε τη θεωρία των πολυβηματικών μεθόδων σχετικά με το πότε μια πολυβηματική μέθοδος θα έχει μονοσήμαντη λύση, για το πότε είναι συνεπής και πότε είναι σταθερή. Επίσης παραθέτουμε ένα θεώρημα το οποίο αναφέρει πότε μια πολυβηματική μέθοδος συγκλίνει συνδυάζοντας την έννοια της συνέπειας και την έννοια της σταθερότητας για την μέθοδο αυτή.

Αναφέρουμε τη βασική θεωρία γύρω από το διάστημα περιοδικότητας των πολυβηματικών μεθόδων καθώς και των συμμετρικών πολυβηματικών μεθόδων. Το διάστημα περιοδικότητας μιας πολυβηματικής μεθόδου αντιπροσωπεύει όπως θα δούμε ουσιαστικά το συγκεκριμένο εκείνο διάστημα όπου μια πολυβηματική μέθοδος έχει μια περιοδική ιδιότητα όταν το αποτέλεσμα του βήματος και της γωνιακής συχνότητας βρίσκονται στο διάστημα αυτό.

Στις μεθόδους απλού βήματος, όπου προσεγγίζεται η τιμή της παραγώγου, βασική ιδέα είναι η ανάπτυξη της λύσης σε μια σειρά Taylor [314]. Επίσης, με χρήση της αριθμητικής ολοκλήρωσης, μπορούμε να δημιουργήσουμε μεθόδους απλού βήματος για την αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Με την διαδικασία βέβαια της αριθμητικής ολοκλήρωσης μπορούμε να δημιουργήσουμε και μεθόδους πολλαπλού βήματος ή πολυβηματικές μεθόδους.

Ονομάστηκαν πολυβηματικές μέθοδοι, διότι για την προσέγγιση μιας τιμής y_{n+1} απαιτούν περισσότερες από μία προηγούμενες τιμές $y_{n-i}, i = 0, 1, 2, \dots$. Μια από τις πιο σημαντικές κατηγορίες γραμμικών μεθόδων πολλαπλών βημάτων είναι της μορφής:

$$\sum_{j=0}^m a_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^m b_j f(t_{n+j}, y_{n+j}) \quad (5.1)$$

η οποία προσδιορίζεται από τις παραμέτρους $\{a_j\}_{j=0}^m$, $\{b_j\}_{j=0}^m$ και καθώς είναι μοναδικοί συνήθως τυπικά έχουμε ως $a_m = 1$. Επιπλέον έχουμε πως αν $b_m = 0$ η μέθοδος ονομάζεται άμεση (**explicit**), διαφορετικά ονομάζεται έμμεση (**implicit**).

Οι προϋποθέσεις ύπαρξης και μονοσήμαντης λύσης σχετικά με το πρόβλημα (3.1) που ασχολούμαστε δίνονται από το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα 3.1 : Έστω ότι η συνάρτηση $f(x, y)$ ικανοποιεί τις παρακάτω συνθήκες :

- Η $f(x, y)$ είναι πραγματική συνάρτηση
- Η $f(x, y)$ είναι συνεχής και ορίζεται για κάθε $x \in [x_0, x_n]$ και για κάθε $y \in (-\infty, +\infty)$ αντίστοιχα
- Υπάρχει σταθερά L έτσι ώστε $\forall x \in [x_0, x_n]$ και για οποιουδήποτε αριθμούς y_1, y_2 ισχύουν: $|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq |y_1 - y_2|$ όπου L είναι η σταθερά Lipschitz.

Έτσι για οποιοδήποτε y_0 το πρόβλημα αρχικών τιμών (3.1), $\forall x \in [x_0, x_n]$ έχει μονοσήμαντη λύση $y(x)$. Για να επιτύχουμε την αριθμητική επίλυση του προβλήματος αρχικών τιμών (3.1), εφαρμόζουμε την παρακάτω πολυβηματική μέθοδο m βημάτων μήκους h :

$$\sum_{i=0}^m a_i q_{n+i} = h^2 \sum_{i=0}^m \beta_i f_{n+i}(x_{n+i}, q_{n+i}), m \geq 2 \quad (5.2)$$

όπου τα σημεία $\{x_i\}_{i=0}^m \in [A, B]$ διαμερίζουν σε ισομήκη διαστήματα το $[A, B]$ μήκους $h = |x_{i+1} - x_i|, i = 0(1)m - 1$ και a_i, β_i είναι σταθερές.

Συνέπεια - Σταθερότητα

Για τις πολυβηματικές μεθόδους παρότι η έννοια της σύγκλισης είναι παρόμοια με αυτή των μεθόδων ενός βήματος, πρέπει να ορίσουμε λίγο διαφορετικά τις έννοιες σταθερότητα και συνέπεια. Αυτό συμβαίνει διότι οφείλουμε να λάβουμε υπόψη μας το γεγονός πως οι πολυβηματικές μέθοδοι χρειάζονται αρχικές τιμές οι οποίες υπολογίζονται χρησιμοποιώντας άλλη μέθοδο. Ακόμη πρέπει να είναι σαφές πως ενώ η σύγκλιση συνεπάγεται την συνέπεια, η συνέπεια δεν εξασφαλίζει την σύγκλιση μιας μεθόδου [315].

Έτσι, όπως θα αναφερθούμε και παρακάτω, θα λέμε πως μια πολυβηματική μέθοδος είναι συνεπής αν το δικό της σφάλμα αποκοπής τείνει στο μηδέν καθώς

το βήμα αυτής τείνει στο μηδέν, αλλά ακόμη εάν η μέθοδος ενός βήματος που χρησιμοποιεί για τον υπολογισμό των αρχικών τιμών είναι επίσης συνεπής.

Επίσης θα λέμε πως μια μέθοδος m -βημάτων είναι σταθερή, εάν υπάρχει σταθερά k , τέτοια ώστε για οποιοδήποτε ζεύγος τιμών y_k, z_k της μεθόδου, με βήμα h , από διαφορετικά σύνολα αρχικών τιμών $\{y_0, y_1, \dots, y_{m-1}\}$ και $\{z_0, z_1, \dots, z_{m-1}\}$ να ισχύει :

$$|y_n - z_n| \leq k \max_{0 \leq j \leq m-1} |y_j - z_j| \quad (5.3)$$

καθώς το $h \rightarrow 0$.

Αναλυτικότερα για την σταθερότητα, για να ορίσουμε το πολυώνυμο σταθερότητας - ευστάθειας μιας γραμμικής πολυβηματικής μεθόδου, θα ονομάσουμε πρώτο πολυώνυμο και δεύτερο πολυώνυμο αντίστοιχα τα παρακάτω:

$$\rho(\xi) = \sum_{j=0}^m a_j \xi^j, \sigma(\xi) = \sum_{j=0}^m \beta_j \xi^j \quad (5.4)$$

με την χρήση των οποίων μπορούμε να συμβολίσουμε πλέον τη πολυβηματική μέθοδο (5.2) ως (ρ, σ) [316].

Το πολυώνυμο σταθερότητας-ευστάθειας της γραμμικής πολυβηματικής μεθόδου (5.2) ορίζεται [1] ως :

$$\pi(\xi; H^2) = \rho(\xi) + H^2 \sigma(\xi) \quad (5.5)$$

όπου $H = \lambda h$. Οι ρίζες ξ_i από το χαρακτηριστικό πολυώνυμο (5.5) είναι γενικά πολύπλοκες και η περιοχή της απόλυτης σταθερότητας ορίζεται ως η περιοχή του πολύπλοκου H -επιπέδου ώστε οι ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου (5.5) να βρίσκονται στο μοναδιαίο κύκλο όταν το H βρίσκεται στο εσωτερικό της περιοχής. Αν δηλώσουμε την περιοχή της απόλυτης σταθερότητας ως R και όριο το ∂R , τότε η θέση του ∂R δίνεται από :

$$H(\theta) = \rho(e^{i\theta}) / \sigma(e^{i\theta}), 0 \leq \theta \leq 2\pi \quad (5.6)$$

Συνδέουμε την γραμμική πολυβηματική μέθοδο (5.2) , για τη διαφορική εξίσωση (3.1) , με το γραμμικό τελεστή L ο οποίος ορίζεται ως

$$L[q(x); h] = \sum_{j=0}^m [a_j q(x + jh) - h^2 \beta_j q''(x + jh)] \quad (5.7)$$

όπου $q(x)$ είναι μια αυθαίρετη και συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση για οποιοδήποτε διάστημα $[x_0, \bar{x}]$ υποσύνολο του $[A, B]$.

Αν θεωρήσουμε ότι η συνάρτηση $y(x)$ έχει υψηλής τάξης παραγώγους όπως άλλωστε απαιτήθηκε , τότε από το ανάπτυγμα Taylor γύρω από το σημείο x , έχουμε :

$$L[q(x); h] = C_0 q(x) + C_1 h q'(x) + C_2 h^2 q''(x) + \dots + C_r h^r q^{(r)}(x) + \dots \quad (5.8)$$

όπου :

$$C_0 = \sum_{j=0}^m a_j, C_1 = \sum_{j=0}^m j a_j, C_r = \sum_{j=0}^m \frac{j^r}{r!} a_j - \sum_{j=0}^m \frac{j^{r-2}}{(r-2)!} \beta_j, r \geq 2 \quad (5.9)$$

Ο γραμμικός τελεστής (5.7) και η σχετιζόμενη με αυτόν πολυβηματική μέθοδος (5.2) λέμε ότι είναι τάξης r αν ισχύει ότι $C_0 = C_1 = C_2 = \dots = C_{r+1} = 0, C_{r+2} \neq 0$.

Η μέθοδος θεωρείται λοιπόν συνεπής (consistent) αν έχει τάξη τουλάχιστον $r = 1$, δηλαδή έχουμε $C_0 = C_1 = C_2 = 0$. Ο αριθμός C_{r+2} καλείται σταθερά σφάλματος της μεθόδου και αν για την αυθαίρετη συνάρτηση δοκιμής $q(x)$ ισχύει :

$$\sum_{j=0}^m a_j q(x + jh) - h^2 \sum_{j=0}^m \beta_j q''(x + jh) = C_{r+2} h^{r+2} q^{(r+2)}(x) + O(h^{r+3}) \quad (5.10)$$

λέμε ότι η τάξη της μεθόδου είναι r .

Η μέθοδος (ρ, σ) λέγεται ότι συγκλίνει υπό τις προϋποθέσεις [1]:

- (P*i*) $a_m = 1, |a_0| + |\beta_0| \neq 0, \sum |\beta_j| \neq 0$
- (P*ii*) Τα πολυώνυμα ρ και σ δεν έχουν κοινούς παράγοντες
- (P*iii*) Ικανή και αναγκαία συνθήκη για να είναι η μέθοδος τουλάχιστον πρώτης τάξης πρέπει $\rho(1) = \rho'(1) = 0$ και $\rho''(1) = 2\sigma(1)$ και
- (P*iv*) Όλες οι ρίζες του πρώτου πολυωνύμου ρ να βρίσκονται εντός του μοναδιαίου κύκλου, εκτός αν βρίσκονται πάνω στο μοναδιαίο κύκλο όπου οι ρίζες τότε δεν πρέπει να έχουν πολλαπλότητα μεγαλύτερη του 2.

Η σταθερότητα εξασφαλίζει πως οι αριθμητικές λύσεις παραμένουν οριοθετημένες καθώς εμείς μετακινούμαστε πιο μακριά από το σημείο εκκίνησης. Στην αριθμητική ανάλυση, μια μέθοδος λέμε πως είναι σταθερή αν για κάποιο σφάλμα το οποίο προέκυψε από οποιαδήποτε πηγή (στρογγυλοποίηση, περικοπή κλπ) δεν επιτρέπεται να αναπτυχθεί κατά την ακολουθία της αριθμητικής διαδικασίας καθώς ο υπολογισμός προχωρά από το ένα βήμα προς το επόμενο.

Από τον ορισμό της σύγκλισης μιας αριθμητικής μεθόδους εξασφαλίζετε πως η αριθμητική λύση τείνει στην ακριβή λύση όταν το μήκος του βήματος τείνει στο μηδέν. Τέλος η αριθμητική μέθοδος θεωρείται συνεπής εάν μειώνοντας κανείς το μέγεθος του βήματος το σφάλμα αποκοπής (LTE) προσεγγίζει το μηδέν και έτσι η προσεγγιστική λύση προσεγγίζει την πραγματική λύση.

Οι ρίζες του πολυωνύμου ρ συμβολίζονται ως $\rho_k, k = 1, 2, \dots, m$ όπου $\rho_1 = \rho_2 = +1$ είναι οι αρχικές ρίζες και οι δευτερεύουσες ρίζες συμβολίζονται ως $\rho_k, k = 3, 4, \dots, m$.

Παραπάνω ονομάσαμε ως :

$$\rho(\xi) = \sum_{j=0}^m a_j \xi^j \quad (5.11)$$

πρώτο πολυώνυμο της πολυβηματικής μεθόδου (5.2). Καθώς το χαρακτηριστικό πολυώνυμο αυτό είναι m -ιστού βαθμού, θα έχει m ρίζες. Αν αυτές οι ρίζες είναι διακεκριμένες, ας τις συμβολίσουμε ως $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_m$, τότε η γενική μορφή της λύσης του :

$$\sum_{j=0}^m a_j x_{k+j} = 0 \quad (5.12)$$

είναι :

$$x_k = c_1 \rho_1^k + c_2 \rho_2^k + \dots + c_m \rho_m^k \quad (5.13)$$

για σταθερές c_1, c_2, \dots, c_m οι οποίες προσδιορίζονται από τις αρχικές τιμές των x_0, \dots, x_m .

Από τον Germund Dahlquist [126], έχουμε τα παρακάτω τρία θεωρήματα όπου δίνεται ο ορισμός μιας **zero - stable** πολυβηματικής μεθόδου, η σύνδεση του ορισμού αυτού με την σύγκλιση της μεθόδου καθώς και πως σχετίζεται η ιδιότητα **zero - stable** με το σφάλμα αποκοπής :

Θεώρημα 5.1.1 Μια γραμμική πολυβηματική μέθοδος είναι μηδενικά-σταθερή (**zero-stable**) για ένα πρόβλημα αρχικών τιμών όταν ικανοποιεί την συνθήκη των ριζών (**root condition**) :

- όλες οι ρίζες του πολυωνύμου $\rho(\xi) = 0$, ικανοποιούν τη σχέση $|\xi| \leq 1$
- κάθε ρίζα για την οποία ισχύει $|\rho| = 1$ έχει πολλαπλότητα 1

Το θεώρημα που ακολουθεί, μας δίνει τις συνθήκες σύμφωνα με τις οποίες μία πολυβηματική μέθοδος συγκλίνει συνδυάζοντας την συνέπεια και την σταθερότητα της μεθόδου αυτής.

Θεώρημα 5.1.2 Ας θεωρήσουμε μια πολυβηματική μέθοδο m βημάτων , η οποία εφαρμόζεται σε ένα πρόβλημα αρχικών τιμών σε διάστημα $[t_0, t_{final}]$ με συνεπείς αρχικές τιμές :

$$x_k \rightarrow x(t_k), t_k = t_0 + hk, k = 0, \dots, m-1 \quad (5.14)$$

καθώς $h \rightarrow 0$.

Η παραπάνω μέθοδος συγκλίνει , $x_{[t-t_0/h]} \rightarrow x_t$, για όλα τα $t \in [t_0, t_{final}]$ καθώς $h \rightarrow 0$ αν και μόνο αν η μέθοδος είναι συνεπής και zero-stable .

Ακόμη σύμφωνα με το τρίτο θεώρημα του G. Dahlquist , έχουμε τη μέγιστη τάξη σύγκλισης μιας zero-stable m βημάτων πολυβηματικής μεθόδου.

Θεώρημα 5.1.3 Μια zero-stable m βημάτων πολυβηματική μέθοδος θα έχει σφάλμα αποκοπής (truncation error) , όχι καλύτερο από :

- $O(h^{m+1})$ εάν m είναι περιττός
- $O(h^m)$ εάν m είναι άρτιος

Αν εφαρμόσουμε τώρα τη μέθοδο (5.2) στην εξίσωση δοκιμής :

$$y'' = -\lambda^2 y \quad (5.15)$$

η οποία έχει γενική λύση $y(x) = A \cos \lambda x + B \sin \lambda x$ περιοδική , με περίοδο $2\pi/\lambda$, για όλα τα A και B , εκτός της περίπτωσης όπου $A = B = 0$, τότε λαμβάνουμε την παρακάτω εξίσωση διαφορών :

$$\sum_{j=0}^m (a_j + H^2 b_j) y_{n+j} = 0, H = \lambda h. \quad (5.16)$$

Η παραπάνω εξίσωση διαφορών έχει γενική λύση :

$$y_n = \sum_{j=1}^m A_j \xi_m^n \quad (5.17)$$

όπου $\xi_j, j = 1, 2, \dots, m$, είναι οι διακεκριμένες ρίζες του πολυωνύμου :

$$\pi(\xi; H^2) = \rho(\xi) + H^2\sigma(\xi). \quad (5.18)$$

Οι ρίζες ξ_j του παραπάνω πολυωνύμου είναι ουσιαστικά διαταράξεις των ριζών ρ_j του ρ . Ιδιαίτερα , πρέπει να θεωρήσουμε τις ρίζες ξ_1 και ξ_2 ως διαταράξεις των κυρίαρχων - αρχικών ριζών του ρ .

Αν θεωρήσουμε πως :

$$y_n = \sum_{j=1}^m A_j \xi_j^n \quad (5.19)$$

είναι η γενική λύση της εξίσωσης διαφορών (5.16) ,τότε είναι βολικό, οι προσεγγίσεις των ριζών της λύσης (5.19) να διαχωριστούν συμβολικά από τις προσεγγίσεις των αρχικών ριζών ξ_1 και ξ_2 και από τις προσεγγίσεις των υπολοίπων ριζών $\xi_i, i = 3, 4, \dots, m$ όπως παρακάτω :

$$y_n = (y_n)_F + (y_n)_S, (y_n)_F = \sum_{i=1}^2 A_i \xi_i^n, (y_n)_S = \sum_{i=3}^m A_i \xi_i^n \quad (5.20)$$

Η παραπάνω λύση y_n κυριαρχείται από την $(y_n)_F$ για αρκετά μικρές αρχικές τιμές. Γενικά θέλουμε η λύση (5.19) να είναι περιοδική με περίοδο όπως η θεωρητική λύση , δηλαδή $2\pi/\lambda$ όταν εφαρμόζουμε τη μέθοδο (ρ, σ) στην εξίσωση δοκιμής $y'' = -\lambda^2 y$. Βέβαια αυτό στην πράξη αποδεικνύεται αδύνατο καθώς καμία μέθοδος της μορφής (5.2) με $m > 2$, δεν ικανοποιεί την απαίτηση αυτή. Έτσι αυτό που προσπαθούμε είναι η ποσότητα $(y_n)_F$ να είναι περιοδική και με κατάλληλες αρχικές συνθήκες , η ποσότητα $(y_n)_S$ να είναι φραγμένη.

Διάστημα Περιοδικότητας

Προκειμένου να οριστεί το διάστημα περιοδικότητας μιας μεθόδου, η ανάλυση της περιοδικής σταθερότητας αυτής της μεθόδου είναι πολύ σημαντική. Το διάστημα περιοδικότητας ουσιαστικά ορίζει το μέγεθος βήματος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί προκειμένου η προσέγγιση της λύσης των προβλημάτων με υψηλή ταλαντωτική ή περιοδική λύση να είναι της ίδιας τάξης με την αλγεβρική τάξη της μεθόδου. Όταν έχουμε ένα μεγάλο διάστημα περιοδικότητας, μπορούμε να έχουμε ένα μεγάλο βήμα για την ίδια ακρίβεια.

Η επιθυμία η αριθμητική λύση να μιμείται τη συμπεριφορά της πραγματικής λύσης όσο το δυνατόν στενότερα δίνει το κίνητρο για να χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση των Lambert και Watson, δηλαδή να ικανοποιείται η συνθήκη περιοδικότητας που παρουσιάζεται παρακάτω.

Η ακριβής λύση της εξίσωση δοκιμής :

$$y'' = -\lambda^2 y \quad (5.21)$$

ούτε διασπάται, ούτε αποσβένει καθώς το x τείνει στο άπειρο, αλλά ταλαντεύεται. Παρόμοια συμπεριφορά θα θέλαμε και για την αριθμητική λύση όταν το n τείνει στο άπειρο καθώς το h διατηρείται σταθερό [317]. Έτσι οι J.D.Lambert και I.A.Watson εισήγαγαν την έννοια του διαστήματος περιοδικότητας μιας μεθόδου (ρ, σ) .

Ορισμός 3.2.1 Η μέθοδος (ρ, σ) λέγεται ότι έχει διάστημα περιοδικότητας της μορφής $(0, H_0^2)$, αν για κάθε $H^2 \in (0, H_0^2)$ οι ρίζες ξ_i του πολυωνύμου $\pi(\xi, H)$ που ορίζεται από την σχέση (5.5) ικανοποιούν :

$$\xi_1 = e^{i\phi(H)}, \xi_2 = e^{-i\phi(H)}, |\xi_i| \leq 1, i = 3, 4, \dots, m \quad (5.22)$$

όπου $\phi(H) \in \mathbb{R}$.

Δηλαδή, το διάστημα περιοδικότητας είναι η μεγαλύτερη τιμή του h , για το οποίο όλες οι ρίζες της εξίσωσης

$$\rho(\xi) + H^2\sigma(\xi) = 0 \quad (5.23)$$

βρίσκονται εντός του μοναδιαίου κύκλου.

Εκτός του διαστήματος περιοδικότητας, η λύση αυξάνεται εκθετικά οπότε είναι ασταθής.

Ο παραπάνω συλλογισμός επιβεβαιώνεται από το θεώρημα [1] που ακολουθεί το οποίο μας δείχνει πως εάν επιλέξουμε ένα βήμα τέτοιο ώστε το H_0^2 να βρίσκεται εντός κάποιου διαστήματος περιοδικότητας, τότε πρώτον η ποσότητα $(y_n)_F$ όπως ορίστηκε από τη σχέση (5.20) θα έχει περίοδο η οποία θα προσεγγίζει αυτή της θεωρητικής λύσης και δεύτερον για αρκετά ακριβείς αρχικές τιμές η ποσότητα $(y_n)_F$ υπερτερεί υπερ της ποσότητας $(y_n)_S$ της (5.20).

Θεώρημα 3.2.1 Δηλώνοντας ως :

$$y(x) = E_1 e^{i\lambda(x-a)} + E_2 e^{-i\lambda(x-a)} \quad (5.24)$$

τη θεωρητική λύση του προβλήματος αρχικών τιμών :

$$y'' = -\lambda^2 y, \quad y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = y'_0 \quad (5.25)$$

και εφαρμόζοντας τη μέθοδο (ρ, σ) στο παραπάνω πρόβλημα (5.25) με βήμα $h \neq 0$ τέτοιο ώστε το $H = h\lambda$ να βρίσκεται μέσα στο διάστημα περιοδικότητας της μεθόδου (ρ, σ) (το οποίο μάλιστα θεωρούμε πως δε μηδενίζεται) και με αρχικές τιμές $y_v = y(x_v) + O(h^{q+1}), v = 0, 1, \dots, m-1$, τότε :

(i) για τις ρίζες ξ_1 και ξ_2 που δίνονται από τη σχέση (5.22) θα είναι $\phi(H) = H + O(H^{r+1})$ και

(ii) οι συντελεστές A_i που ορίζονται από τη σχέση (5.20) θα ικανοποιούν τις σχέσεις :

$$A_i = E_i + O(h^{\bar{r}+1}), i = 1, 2, A_i = O(h^{\bar{r}+1}), i = 3, 4, \dots, m \quad (5.26)$$

όπου $\bar{r} = \min(q, r)$ και r είναι η τάξη της μεθόδου (ρ, σ) .

Απόδειξη

i) Αν στην σχέση (5.10) αντικαταστήσουμε την αυθαίρετη συνάρτηση δοκιμής με $e^{i\lambda x}$, η οποία μάλιστα ορίζει και την τάξη της μεθόδου (ρ, σ) , η εξίσωση γίνεται :

$$\sum_{j=0}^m (a_j + H^2 \beta_j) e^{i\lambda(x+jh)} = O(H^{r+2}), H = h\lambda \quad (5.27)$$

Αν διαιρέσουμε τώρα με τον όρο $e^{i\lambda x}$, έχουμε :

$$\pi(e^{iH}; H^2) = O(H^{r+2}) \quad (5.28)$$

Επιπρόσθετα μπορούμε να γράψουμε :

$$\pi(\xi; H^2) = (a_m + H^2 \beta_m) \prod_{s=1}^m (\xi - \xi_s) \quad (5.29)$$

Εάν το H^2 κινείται σε ένα διάστημα περιοδικότητας της μεθόδου (ρ, σ) και οι ρίζες είναι $\xi_1 = e^{i\phi(H)}$ και $\xi_2 = e^{-\phi(H)}$ τότε έχουμε :

$$(e^{i\phi(H)} - \xi_1)(e^{iH} - \xi_2) 2e^{iH} (\cos H - \cos \phi(H)). \quad (5.30)$$

Τώρα για $s = 3, 4, \dots, m$, έχουμε $\xi_s = \zeta_s + O(H)$ οπότε :

$$\prod_{s=3}^m (e^{iH} - \xi_s) = \prod_{s=3}^m (1 - \zeta_s + O(H)) \quad (5.31)$$

Από τις προϋποθέσεις που πρέπει να πληρεί μια μέθοδος (ρ, σ) για να συγκλίνει και συγκεκριμένα από την υπόθεση (Πiv) είναι $\zeta_s \neq 1, s = 3, 4, \dots, m$ οπότε από τις παραπάνω δυο σχέσεις θα έχουμε ότι :

$$\cos H - \cos \phi(H) = O(H^{r+2}) \quad (5.32)$$

άρα τελικά όντως έχουμε για τις ρίζες ξ_1, ξ_2 ότι :

$$\phi(H) = H + O(H^{r+1}) \quad (5.33)$$

ii) Γνωρίζουμε πως αν εφαρμόσουμε τη μέθοδο (ρ, σ) στο πρόβλημα (5.25), τότε η λύση της εξίσωσης διαφορών δίνεται από την σχέση (5.19). Οι δοσμένες αρχικές τιμές υποδηλώνουν ότι τα $A_s, s = 1, 2, \dots, m$ ικανοποιούν :

$$\sum_{s=1}^m A_s \xi_s^v = E_1 e^{ivH} + E_2 e^{-ivH} + O(h^{q+1}), v = 0, 1, \dots, m-1 \quad (5.34)$$

Από το (i) παραπάνω αποδείξαμε ήδη ότι για τις ρίζες έχουμε $\xi_1 = e^{iv} + O(h^{r+1})$ και $\xi_2 = e^{-iv} + O(h^{r+1})$, άρα :

$$A_1 e^{ivH} + A_2 e^{-ivH} + \sum_{s=3}^m A_s \xi_s^v = E_1 e^{ivH} + E_2 e^{-ivH} + O(h^{\hat{r}+1}), v = 0, 1, \dots, m-1 \quad (5.35)$$

όπου $\hat{r} = \min(q, r)$.

Χρησιμοποιώντας τώρα το γεγονός πως για $s = 3, 4, \dots, m$ δεν είναι δυνατόν το ξ_s να τείνει στο +1 καθώς το $h \rightarrow 0$, παίρνουμε με άμεσο υπολογισμό ότι :

$$A_s = E_s + O(h^{\hat{r}+1}), s = 1, 2; A_s = O(h^{\hat{r}+1}), s = 3, 4, \dots, m \quad (5.36)$$

το οποίο θέλαμε να αποδείξουμε.

Συμμετρικές Μέθοδοι

Στην υποενότητα αυτή παραθέτουμε τους ορισμούς σχετικά με το πότε μια μέθοδος καλείται συμμετρική (ΣΜ), πότε ένα πολυώνυμο είναι συντηρητικό και πότε συμμετρικό, αναφερόμαστε στο πλήθος των βημάτων μιας συμμετρικής μεθόδου καθώς και στην τάξη αυτής [1].

Ένα πολυώνυμο της μορφής :

$$\phi(\xi) = \sum_{j=0}^m a_j \xi^j, \xi \in \mathbb{R}, a_j \in \mathbb{C}, j = 0, 1, \dots, m \quad (5.37)$$

λέγεται ότι είναι συμμετρικό όταν $a_j = a_{m-j}, j = 0, 1, \dots, m$ και $a_0 \neq 0$.

Ορισμός 3.3.1 Λέμε ότι το πολυώνυμο $\phi(\xi)$ το οποίο έχει n_1 ρίζες εντός του μοναδιαίου κύκλου, n_2 ρίζες πάνω στο μοναδιαίο κύκλο, n_3 ρίζες εκτός του μοναδιαίου κύκλου, υπολογίζοντας και την πολλαπλότητα της κάθε ρίζας, είναι της τάξης (n_1, n_2, n_3) και τη συμβολίζουμε ως $\phi \in P(n_1, n_2, n_3)$. Ειδικότερα λέμε πως αν είναι $\phi \in P(0, m, 0)$, τότε το πολυώνυμο ϕ καλείται συντηρητικό.

Λήμμα 3.3.1 Αν είναι ξ μια ρίζα του πολυωνύμου ϕ και το πολυώνυμο είναι συμμετρικό, τότε και το $1/\xi$ θα είναι επίσης ρίζα του πολυωνύμου ϕ .

Η απόδειξη είναι προφανής και προκύπτει αν στο πολυώνυμο (5.37) αντικαταστήσουμε όπου ξ το $1/\xi$.

Λήμμα 3.3.2 Ας υποθέσουμε πως η μέθοδος (ρ, σ) ικανοποιεί τις προϋποθέσεις (Πi) έως (Πiv). Τότε έχουμε πως το ρ είναι συμμετρικό \Leftrightarrow το ρ είναι συντηρητικό.

Απόδειξη

(Ευθύ) Ας υποθέσουμε ότι το ρ είναι συμμετρικό. Τότε έχουμε πως $a_0 = a_m \neq 0$ άρα από την προϋπόθεση (Πiv) και το Λήμμα 3.3.1 πρέπει το ρ να είναι

συντηρητικό.

(Αντίστροφο) Ας υποθέσουμε πως είναι το ρ συντηρητικό. Τότε έχουμε από την προϋπόθεση (Πiii) ότι το ρ έχει παράγοντα της μορφής $(\xi - 1)^2$ και από την προϋπόθεση (Πiv) οι παράγοντες που μένουν μπορούν να πάρουν τη μορφή $(\xi - e^{i\phi})(\xi - e^{-i\phi}), 0 < \phi < 2\pi$, καθώς και τη μορφή $(\xi + 1)^n, n = 0, 1, 2$. Αφού λοιπόν οι παραπάνω παράγοντες είναι συμμετρικά πολυώνυμα του ξ άρα συμπεραίνουμε πως το ρ είναι συμμετρικό.

Ορισμός 3.3.2 Θα λέμε πως η μέθοδος (ρ, σ) είναι συμμετρική αν ισχύουν $a_j = a_{m-j}, \beta_j = \beta_{m-j}, j = 0, 1, \dots, m$.

Αξίζει να σημειωθεί πως αν η μέθοδος (ρ, σ) συμμετρική, τότε εφόσον $a_0 = a_m \neq 0$ θα είναι και το ρ συμμετρικό. Βέβαια είναι πιθανόν, αν έχουμε $\beta_0 = \beta_1 = \dots = \beta_{m-k+1} = \beta_{m-k+2} = \dots = \beta_m = 0$ και $\beta_k = \beta_{m-k} \neq 0$, όπου έχουμε $0 \leq k \leq m-k \leq m$ αν m άρτιος και έχουμε $0 \leq k < m-k \leq m$ αν είναι m περιττός. Τότε το σ ενδέχεται σύμφωνα με τον Ορισμό 3.3.2 να μην είναι συμμετρικό.

Λήμμα 3.3.3 Μια συμμετρική μέθοδος δεν μπορεί να έχει περιττό αριθμό βημάτων.

Απόδειξη

Ας υποθέσουμε πως έχουμε μια μέθοδο (ρ, σ) και a ς είναι m περιττός αριθμός το πλήθος των βημάτων. Τότε πρέπει :

$$\rho(\xi) = \sum_{j=0}^m a_j \xi^j = \sum_{j=0}^{(m-1)/2} a_j \xi^j (\xi^{m-2j} + 1) \quad (5.38)$$

και

$$\sigma(\xi) = \sum_{j=0}^m \beta_j \xi^j = \sum_{j=0}^{(m-1)/2} \beta_j \xi^j (\xi^{m-2j} + 1) \quad (5.39)$$

όπου είναι $0 \leq k < m-k \leq m$. Αυτό όμως σημαίνει πως το ρ και το σ θα έχουν κοινό παράγοντα το $(\xi + 1)$, το οποίο είναι άτοπο λόγω της προϋπόθεσης (Πii).

Λήμμα 3.3.4 Κάθε συμμετρική μέθοδος έχει άρτια τάξη.

Απόδειξη

Αν στη σχέση (5.7) αναπτύξουμε το δεξί μέλος γύρω από το $(x + h/2)$ και χρησιμοποιώντας το παραπάνω λήμμα 3.3.3 παίρνουμε ότι είναι άρτια η τάξη της μεθόδου.

Λήμμα 3.3.5 Ας υποθέσουμε πως η μέθοδος $\rho(\xi), \sigma(1/\xi)$ γράφεται με τη μορφή $\sum_{j=-m}^m B_j \xi^j$. Τότε αν η μέθοδος (ρ, σ) είναι συμμετρική αν ισχύει ότι $B_j = B_{-j}, j = 0, 1, \dots, m$.

Απόδειξη

Ας υποθέσουμε ότι :

$$\rho(\xi)\sigma(1/\xi) = \sum_{j=-m}^m B_j \xi^j, B_j = B_{-j}, j = 0, 1, \dots, m \quad (5.40)$$

Τότε είναι :

$$B_{-m+j} = a_0 \beta_{m-j} + a_1 \beta_{m-j+a} + \dots + a_j \beta_m, j = 0, 1, \dots, m \quad (5.41)$$

και

$$B_{m-j} = \beta_0 a_{m-j} + \beta_1 a_{m-j+1} + \dots + \beta_j a_m, j = 0, 1, \dots, m \quad (5.42)$$

Έχουμε όμως $a_m \neq 0$ από την προϋπόθεση (Πi) άρα συνεπάγεται πως :

$$a_0 = 0 \Rightarrow B_{-m} = 0 \Rightarrow B_m = 0 \Rightarrow \beta_0 = 0 \quad (5.43)$$

το οποίο όμως πάλι έρχεται σε αντίθεση με την προϋπόθεση (Πii) αφού πρέπει $|a_0| + |\beta_0| \neq 0$. Έτσι παίρνουμε πως το ρ έχει m μη μηδενικές ρίζες. Βέβαια είναι δυνατόν πως κάποιες από ρίζες του σ να μηδενίζονται.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι :

$$\beta_m = \beta_{m-1} = \dots = \beta_{m-\kappa+1} = 1, \beta_{m-\kappa} \neq 0 \quad (5.44)$$

$$\beta_0 = \beta_1 = \dots = \beta_{w-1} = 0, \beta_w \neq 0, 0 \leq w \leq m - \kappa \leq m. \quad (5.45)$$

Από τις σχέσεις (5.41) , (5.42) συνεπάγεται :

$$B_{-m} = B_{-m+1} = \dots = B_{-m+\kappa+1} = 0, B_{-m+\kappa} = a_0 \beta_{m-\kappa} \neq 0 \quad (5.46)$$

$$B_m = B_{m-\kappa} = \dots = B_{m-\kappa+1} = 0, B_{m-\kappa} = \beta_w a_m \neq 0 \quad (5.47)$$

Όσο έχουμε ότι $B_{-j} = B_j, j = 0, 1, \dots, m$ θα είναι και $w = \kappa$ άρα μπορούμε να έχουμε ότι :

$$\sigma(\xi) = \sum_{j=\kappa}^{m-\kappa} \beta_j \xi^j = \xi^\kappa T(\xi) \quad (5.48)$$

όπου είναι :

$$T(\xi) = \sum_{j=0}^{m-2\kappa} \beta_{\kappa+j} \xi^j, \beta_\kappa \neq 0, \beta_{m-\kappa} \neq 0. \quad (5.49)$$

Άρα τελικά είναι :

$$\xi^{m-\kappa} \rho(\xi) \sigma(1/\xi) = R(\xi) = \xi^{m-2\kappa} \rho(\xi) T(1/\xi). \quad (5.50)$$

Το πολυώνυμο $R(\xi)$ έχει ως κύριο συντελεστή τον $a_m \beta_\kappa \neq 0$, ο σταθερός του όρος είναι ο $a_0 \beta_{m-\kappa}$ και είναι ένα πολυώνυμο βαθμού $2m - 2\kappa$. Οι m ρίζες του ρ και οι $(m - 2\kappa)$ αντίστροφες ρίζες του σ αποτελούν τις $(2m - 2\kappa)$ μη μηδενικές ρίζες του πολυωνύμου R . Από τις προϋποθέσεις συνεπάγεται πως το R είναι συμμετρικό. Από την υπόθεση (Πiv) έχουμε $\rho \in P(n, m - n, 0)$.

Ας είναι ξ μια ρίζα του ρ , τότε θα είναι ρίζα και του R που βρίσκεται μέσα στο μοναδιαίο κύκλο. Από το Λήμμα 3.3.1 η ρίζα $1/\xi$ η οποία βρίσκεται εκτός του μοναδιαίου κύκλου είναι επίσης ρίζα του πολυωνύμου R . Εφόσον όμως η ρίζα $1/\xi$ δεν είναι ρίζα του ρ , οφείλει να είναι η αντίστροφη μιας μη μηδενικής ρίζας του σ . Άρα παίρνουμε πως τα ρ και σ μοιράζονται την ίδια ρίζα ξ , το οποίο όμως έρχεται σε αντίθεση με την προϋπόθεση (Πii).

Έτσι καταλήγουμε στο συμπέρασμα πως το ρ είναι υποχρεωτικά συντηρητικό και από το λήμμα 3.3.2 είναι και συμμετρικό. Αυτό σημαίνει ότι από τις σχέσεις (5.41) , (5.42) είναι $\beta_j = \beta_{m-j}, j = 0, 1, \dots, m$ και επομένως η μέθοδος (ρ, σ) θα είναι συμμετρική όπως θέλαμε να αποδείξουμε.

Διάστημα Περιοδικότητας (ΣΜ)

Με τα δύο θεωρήματα που ακολουθούν συνδέουμε την έννοια του διαστήματος περιοδικότητας μιας μεθόδου με την συμμετρικότητα της μεθόδου και εξασφαλίζουμε τις απαραίτητες συνθήκες σύμφωνα με τις οποίες μια μέθοδος (ρ, σ) θα έχει διάστημα περιοδικότητας μη μηδενικό [1].

Θεώρημα 3.4.1 Ας υποθέσουμε ότι η μέθοδος (ρ, σ) έχει διάστημα περιοδικότητας το οποίο δεν μηδενίζεται. Τότε η μέθοδος (ρ, σ) είναι συμμετρική.

Απόδειξη

Έστω ότι η μέθοδος (ρ, σ) έχει ως διάστημα περιοδικότητας ένα διάστημα της μορφής $(0, H_0^2), H_0^2 > 0$. Είναι τότε για κάθε $H^2 \in (0, H_0^2)$:

$$0 = \pi(e^{i\phi(H)}; H^2) = \rho(e^{i\phi(H)}) + H^2 \sigma(e^{i\phi(H)}) \quad (5.51)$$

από όπου συνεπάγεται ότι :

$$\rho(e^{i\phi(H)})\sigma(e^{-i\phi(H)}) = -H^2\sigma(e^{i\phi(H)})\sigma(e^{-i\phi(H)}) = \text{πραγματικός} \quad (5.52)$$

οπότε από το λήμμα 3.3.5 θα έχουμε :

$$\text{Im} \sum_{j=-m}^m B_j e^{ij\phi(H)} = \sum_{j=0}^m (B_j - B_{-j}) \eta \mu(j\phi(H)) = 0, \forall H^2 \in (0, H_0^2). \quad (5.53)$$

Επομένως θα είναι $B_j = B_{-j}, j = 0, 1, \dots, m$ και από το λήμμα 3.3.5 συμπεραίνουμε εύκολα ότι η μέθοδος (ρ, σ) είναι συμμετρική.

Το παρακάτω πόρισμα μας δίνει τη θέση όλων των ριζών του πολυωνύμου $\pi(\xi; H^2)$ σε σχέση με τον μοναδιαίο κύκλο. Έχουμε λοιπόν:

Πόρισμα 3.4.1 Ας υποθέσουμε ότι μια μέθοδος (ρ, σ) έχει διάστημα περιοδικότητας $(0, H_0^2)$, $H_0^2 > 0$, τότε για όλα τα $(0, H_0^2)$, $H_0^2 > 0$, όλες οι ρίζες του πολυωνύμου $\pi(\xi; H^2)$ ανήκουν πάνω στον μοναδιαίο κύκλο.

Απόδειξη

Για όλα τα $H^2 \in (0, H_0^2)$ γνωρίζουμε πως για τη μέθοδο (ρ, σ) το πολυώνυμο $\pi(\xi; H^2)$ είναι συμμετρικό όπως επίσης συμμετρική είναι και η ίδια η μέθοδος. Υποθέτουμε πως μια ρίζα βρίσκεται μέσα στο μοναδιαίο κύκλο, οπότε σύμφωνα και με το Λήμμα 3.3.1 θα υπάρχει αντίστοιχα και μια ρίζα έξω από τον μοναδιαίο κύκλο, το οποίο βέβαια έρχεται σε αντίθεση με τον ορισμό του διαστήματος περιοδικότητας. Έτσι έχουμε πως το πολυώνυμο $\pi(\xi; H^2)$ είναι συντηρητικό $\forall H^2 \in (0, H_0^2)$.

Σύμφωνα με το παραπάνω πόρισμα η συνθήκη $|\xi_s| \leq 1, s = 3, 4, \dots, m$ στον Ορισμό 3.2.1 μπορεί να αντικατασταθεί από το $|\xi_s| = 1, s = 3, 4, \dots, m$. Έτσι όταν το H^2 βρίσκεται μέσα σε ένα διάστημα περιοδικότητας τότε τα πολυώνυμα $(y_n)_s, (y_n)_F$ είναι περιοδικά, χωρίς να έχουν βέβαια την ίδια περίοδο μεταξύ τους. Μάλιστα μόνο το πολυώνυμο $(y_n)_F$ προσεγγίζει την περίοδο της θεωρητικής λύσης $y(x) = A \cos \lambda x + B \sin \lambda x$ (θεώρημα 3.2.1).

Όταν αναφερόμαστε στα διαστήματα περιοδικότητας αυτά δεν πρέπει να συγχέονται με τα διαστήματα απόλυτης ευστάθειας (η περιοχή όπου μια μέθοδος είναι απόλυτα ευσταθής ονομάζεται το διάστημα απόλυτης ευστάθειας). Για παράδειγμα υπάρχουν μέθοδοι όπου εφόσον δεν είναι συμμετρικές, έχουν μηδενικά διαστήματα περιοδικότητας ενώ έχουν διαστήματα απόλυτης ευστάθειας που δεν μηδενίζονται, όπως οι μέθοδοι *Störmer – Cowell* για $m > 2$.

Θεώρημα 3.4.2 Ας υποθέσουμε ότι η μέθοδος (ρ, σ) είναι συμμετρική και πως εκτός της αρχικής ρίζας το πολυώνυμο ρ δεν έχει άλλες διπλές ρίζες οι οποίες να βρίσκονται πάνω στον μοναδιαίο κύκλο. Τότε η (ρ, σ) μέθοδος θα έχει διάστημα περιοδικότητας μη μηδενικό [1].

Απόδειξη

Χρησιμοποιώντας κανείς τον μετασχηματισμό $\xi = (1 + \nu)/(1 - \nu)$ χαρτογραφεί τον κύκλο $|\xi| = 1$ στην ευθεία $Re(\nu) = 0$ και την περιοχή $|\xi| \leq 1$ στην $Re(\nu) \leq 0$. Από το Λήμμα 3.3.3 έχουμε πως το m είναι άρτιος και όταν η μέθοδος (ρ, σ) είναι συμμετρική προκύπτει εύκολα ότι :

$$(1 - \nu)^m \rho\left(\frac{1 + \nu}{1 - \nu}\right) = R(\tau), (1 - \nu)^m \sigma\left(\frac{1 + \nu}{1 - \nu}\right) = S(\tau), \tau = \nu^2 \quad (5.54)$$

με $R(\tau)$ και $S(\tau)$ να είναι πολυώνυμα $\frac{m}{2}$ ου βαθμού ως προς τ .

Εφόσον το m είναι άρτιος και από το Λήμμα 3.3.2 το ρ είναι συντηρητικό, δεν γίνεται το πολυώνυμο ρ να έχει ως ρίζα το -1. Το ρ θα έχει μία διπλή ρίζα στο +1 και οι υπόλοιπες $m - 2$ διακεκριμένες μιγαδικές ρίζες θα βρίσκονται πάνω στο μοναδιαίο κύκλο ως ζεύγη συζυγών μιγαδικών. Έτσι συνεπάγεται πως το πολυώνυμο $R(\tau)$ θα έχει $\frac{m}{2}$ ρίζες πραγματικές και διακεκριμένες $\tau_k, k = 1, 2, \dots, \frac{m}{2}$, οι οποίες θα ικανοποιούν την σχέση :

$$0 = \tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \dots > \tau_{\frac{m}{2}} > -\infty \quad (5.55)$$

Ακόμη επειδή οι ρίζες ενός πολυωνύμου είναι συνεχείς συναρτήσεις των συντελεστών του, τότε για πολύ μικρό H^2 οι ρίζες του πολυωνύμου :

$$P(\tau; H^2) = R(\tau) + H^2 S(\tau) \quad (5.56)$$

είναι επίσης διακεκριμένες και πραγματικές.

Ειδικότερα, υπάρχει H_1^2 τέτοιο ώστε $\forall H^2 \in (0, H_1^2)$, το $P(\tau; H^2)$ θα έχει $\frac{m}{2}$ πραγματικές διακεκριμένες ρίζες $t_k, k = 1, 2, \dots, \frac{m}{2}$ που θα ικανοποιούν :

$$0 = t_1 > t_2 > t_3 > \dots > t_{\frac{m}{2}} > -\infty \quad (5.57)$$

Βέβαια αυτό δεν σημαίνει πως η ρίζα t_1 είναι μη θετική, πρέπει να το εξετάσουμε. Αφού ο συντελεστής του $\tau^{\frac{m}{2}}$ στο $R(\xi)$ είναι ο $\rho(-1) \neq 0$ συμπεραίνουμε πως υπάρχει H_2^2 τέτοιο ώστε $\forall H^2 \in (0, H_2^2)$ να ισχύει :

$$\operatorname{sgn}[P(\tau, H^2), \tau \rightarrow \infty] = \operatorname{sgn}[R(\tau), \tau \rightarrow \infty] = \operatorname{sgn}\left[\frac{dR}{d\tau}\right]_{\tau=\infty} \quad (5.58)$$

Υποθέτουμε τώρα πως το $R(\tau)$ έχει μια ρίζα του, έστω την t_1 του $P(\tau; H^2)$ θετική. Τότε θα είναι :

$$\operatorname{sgn}[P(0, H^2)] = -\operatorname{sgn}[P(\tau; H^2), \tau \rightarrow \infty] = -\operatorname{sgn}\left[\frac{dR}{d\tau}\right]_{\tau=0} \quad (5.59)$$

Όμως :

$$\begin{aligned} \frac{dR}{d\tau} &= \frac{1}{2v} \frac{d}{dv} [(1-v)^m \rho\left(\frac{1+v}{1-v}\right)] \\ &= \frac{1}{2v} [-m(1-v)^{m-1} \rho\left(\frac{1+v}{1-v}\right) + 2(1-v)^{m-2} \rho'\left(\frac{1+v}{1-v}\right)] \end{aligned} \quad (5.60)$$

Οπότε έχουμε :

$$\begin{aligned} \frac{dR}{d\tau}\Big|_{\tau=0} &= \lim_{v \rightarrow 0} \frac{1}{2v} \left[-\frac{m}{v} \rho\left(\frac{1+v}{1-v}\right) + \rho'\left(\frac{1+v}{1-v}\right) \right] \\ &= \lim_{\xi \rightarrow 1} \frac{\xi+1}{\xi-1} \left[-\frac{m}{2} \rho(\xi) + \rho'(\xi) \right] \\ &= 2\rho''(1) \quad (\rho(1) = \rho'(1) = 0) \\ &= 4\sigma(1) \quad (\text{Πiii}) \\ &= 4S(0) \quad (R(0) = 0) \\ &= \frac{4}{H^2} P(0; H^2) \end{aligned} \quad (5.61)$$

το οποίο έρχεται σε αντίθεση με την σχέση (5.59) , άρα αυτό σημαίνει πως για κάθε $H^2 \epsilon(0, H_0^2), H_0 = \min(H_1^2, H_2^2) > 0$, το πολυώνυμο $P(\tau; H^2)$ θα έχει $\frac{m}{2}$ πραγματικές διακεκριμένες ρίζες και μάλιστα όλες μη θετικές. Αντίστοιχα λοιπόν , όλες οι ρίζες του $\pi(\xi; H^2)$ θα βρίσκονται πάνω στο μοναδιαίο κύκλο οπότε και η μέθοδος (ρ, σ) θα έχει διάστημα περιοδικότητας το $(0, H_0^2), H_0^2 > 0$.

Το θεώρημα 3.4.1 μας δίνει μια αναγκαία συνθήκη ώστε μια μέθοδος (ρ, σ) να έχει ένα μη μηδενικό διάστημα περιοδικότητας και αντίστοιχα το θεώρημα 3.4.2 μας δίνει μια ικανή συνθήκη για να έχει η μέθοδος μη μηδενιζόμενο διάστημα περιοδικότητας. Κανένα βέβαια από τα παραπάνω δεν μας δίνει μια ικανή αλλά ταυτόχρονα και αναγκαία συνθήκη ώστε να εξασφαλίζεται για μια μέθοδο ένα μη μηδενικό διάστημα περιοδικότητας. Αξίζει να σημειωθεί πως η απόδειξη του παραπάνω θεωρήματος είναι κατασκευαστική υπό την έννοια ότι έχει αποδειχθεί πως ο αποτελεσματικότερος τρόπος υπολογισμού του διαστήματος περιοδικότητας μιας δεδομένης μεθόδου είναι να εξετασθούν οι συνθήκες υπό τις οποίες όλες οι ρίζες του πολυωνύμου $P(\tau; H^2)$ είναι πραγματικές , διακεκριμένες και μη θετικές. Πρέπει να αναφέρουμε πως το διάστημα περιοδικότητας μιας έμμεσης μεθόδου είναι μεγαλύτερο από το διάστημα περιοδικότητας της αντίστοιχης άμεσης μεθόδου.

Ορισμός 3.4.1 Άμεση (explicit) ή λελυμένης μορφής καλείται μια μέθοδος της οποίας η τιμή y_{n+m} της αγνώστου συναρτήσεως εκφράζεται συναρτήσει των τιμών της στα σημεία $x_{n+i}, i = -m^*, \dots, m^* - 1$, όπου $2m^*$ είναι ο αριθμός των βημάτων της μεθόδου.

Ορισμός 3.4.2 Έμμεση (implicit) ή πεπλεγμένης μορφής καλείται μια μέθοδος της οποίας η τιμή y_{n+m} της αγνώστου συναρτήσεως εκφράζεται συναρτήσει των τιμών της στα σημεία $x_{n+i}, i = -m^*, \dots, m^*$, όπου $2m^*$ είναι ο αριθμός των βημάτων της μεθόδου.

Αλγοριθμική Απόσβεση - Φάση Υστέρησης

Υπάρχουν πολλές αριθμητικές μέθοδοι για την ολοκλήρωση βήμα προς βήμα των συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Μόνο μερικές από αυτές, ωστόσο, επωφελούνται από ειδικές ιδιότητες της λύσης που μπορεί να είναι γνωστές εκ των προτέρων. Ασχολούμαστε λοιπόν με την περίπτωση περιοδικών ή ταλαντευτικών λύσεων όπου η συχνότητα ή κάποιο κατάλληλο υποκατάστατο μπορεί να εκτιμηθεί εκ των προτέρων.

Σε οποιοδήποτε πρόβλημα με περιοδική λύση, ακόμη και αν η συχνότητα του προβλήματος είναι αρχικά άγνωστη, έχουμε μεθόδους με σταθερούς συντελεστές. Οι μέθοδοι αυτής της κατηγορίας πρέπει να είναι **P-stable**, και αυτό ισχύει ιδιαίτερα στην περίπτωση προβλημάτων με εξαιρετικά ταλαντωτικές λύσεις. Η ιδιότητα **P-stability** εισήχθη για πρώτη φορά από τους **Lambert** και **Watson** [1].

Σημαντική συμβολή για τις **P-stable** μεθόδους είναι η εργασία του **Hairer** [127] στην οποία έχουν αναπτυχθεί μέθοδοι **P-stable** χαμηλότερης τάξης. Οι **Bruca** και **Nigro** [145] εισήγαγαν τη στρέβλωση της συχνότητας ως σημαντική ιδιότητα των μεθόδων για την επίλυση ειδικών προβλημάτων αρχικών τιμών δεύτερης τάξης. Για την στρέβλωση-παραμόρφωση της συχνότητας, άλλοι συγγραφείς χρησιμοποιούν τους όρους της χρονικής φάσης υστέρησης, του σφάλματος φάσης ή της διασποράς.

Εάν μια καλή εκτίμηση της περιόδου ή της κυρίαρχης συχνότητας είναι γνωστή εκ των προτέρων, τότε είναι δυνατόν να κατασκευαστούν αριθμητικές μέθοδοι με μηδενική φάση υστέρησης (**phase-lag**). Οι **Brusa** και **Nigro** [145] εισήγαγαν την ιδιότητα της φάσης υστέρησης ως εργαλείο για την ανάλυση της συμπεριφοράς της μεθόδου για την αριθμητική λύση προβλημάτων αρχικών τιμών με ταλαντωτικές λύσεις.

Σε τέτοια προβλήματα οι συντελεστές της μεθόδου εξαρτώνται από την παράμετρο όπου είναι η εκτιμώμενη συχνότητα του προβλήματος. Αυτή η τεχνική είναι καλύτερα γνωστή ως “τοποθέτηση φάσης” (**phase-fitted**), μια ιδέα που εισήχθη από τους **Raptis** και **Simos** [47]. Κύριοι τομείς εφαρμογής αυτών των μεθόδων είναι προβλήματα για τα οποία είναι δυνατή η παραπάνω απαίτηση, όπως η εξίσωση **Schrödinger**.

Είναι επιθυμητό η αριθμητική λύση να μιμείται την περιοδική συμπεριφορά της αριθμητικής λύσης. Το πλάτος της αριθμητικής λύσης διατηρείται όταν οι ρίζες της χαρακτηριστικής εξίσωσης βρίσκονται στον μοναδιαίο κύκλο . Αυτή η ιδιότητα είναι ισοδύναμη με το γεγονός ότι οι συντελεστές βρίσκονται στο διάστημα περιοδικότητας .

Για πολύ καιρό η ιδιότητα της μηδενικής απόκλισης θεωρούνταν ότι είναι πρωταρχικού ενδιαφέροντος για την επίλυση περιοδικών προβλημάτων αρχικών τιμών. Για παράδειγμα, στην ουράνια μηχανική είναι επιθυμητό οι αριθμητικές τροχιές να μην σπείρουν προς τα μέσα ή προς τα έξω . Οι Simos και Williams [41] έδειξαν ότι μια μεγάλη τάξη της φάσης υστέρησης είναι πιο σημαντική ιδιότητα από τη μηδενική απόκλιση .

Ο Simos [27] το 1993 παρουσίασε μια νέα ιδέα : να διατηρηθεί μία ελεύθερη παράμετρος στη μέθοδο έτσι ώστε η μέθοδος να μπορεί να προσαρμοστεί σε ένα ταλαντωτικό στοιχείο της θεωρητικής λύσης , παρόμοια με την εκθετική προσαρμογή που προτείνουν οι Liniger , Willoughby και Van der Houwen για τη λύση των εξισώσεων πρώτης τάξης.

Έχουν προταθεί αρκετές μέθοδοι με ελάχιστη φάση υστέρησης για συγκεκριμένες κατηγορίες προβλημάτων αλλά παραμένουν ορισμένα ερωτήματα. Είναι χρήσιμο να έχουμε υψηλή τάξη διασποράς ή ακόμη είναι λογικό να θυσιάσουμε κάτι άλλο για να το πετύχουμε ;

Σαφώς για προβλήματα αρχικών τιμών με εξίσωση δοκιμής της μορφής $y'' = -\omega^2 y$, μια υψηλή τάξη διασποράς είναι μια καλή ιδιότητα αλλά για πραγματικά προβλήματα η απάντηση δεν είναι τόσο προφανής.

Από την ανάλυση αρκετών αριθμητικών μεθόδων έχουμε πως :

- 1) καθώς το μήκος του βήματος μειώνεται τελικά η αλγεβρική τάξη δεσπόζει
- 2) οι μέθοδοι με υψηλή τάξη φάσης υστέρησης μπορεί να είναι ακριβέστερες για μεγαλύτερα μήκη βήματος ή ισοδύναμα , μπορεί να δώσουν μια πιο μέτρια ακρίβεια με ακόμη μεγαλύτερο μήκος βήματος , αλλά αυτό δεν έχει ακόμη ποσοτικοποιηθεί.

Στην ενότητα αυτή θα ασχοληθούμε με την ανάλυση της αλγοριθμικής απόσβεσης μιας συμμετρικής πολυβηματικής γραμμικής μεθόδου καθώς και τις συνθήκες σύμφωνα με τις οποίες μια γραμμική πολυβηματική μέθοδος δεν έχει αλγοριθμική απόσβεση. Επίσης γίνεται μελέτη σχετικά με την υστέρηση της φάσης (*phase – lag*) των συμμετρικών μεθόδων , δίνεται το ανάπτυγμα της φάσης υστέρησης και παρουσιάζεται ο άμεσος τύπος υπολογισμού της τάξης της φάσης υστέρησης μιας μεθόδου.

Αλγοριθμική Απόσβεση

Ασχολούμαστε με το ειδικό πρόβλημα δεύτερης τάξης της μορφής :

$$y'' = f(x, y) \quad , \quad x \in [0, X] \quad (6.1)$$

με αρχικές συνθήκες :

$$y(0) = y_0 \quad , \quad y'(0) = y'_0 \quad (6.2)$$

Για την ανάλυση καθώς και τη σύγκριση μεθόδων , χρησιμοποιούμε την εξίσωση δοκιμής :

$$y'' = -\lambda^2 y \quad (6.3)$$

με λύση την :

$$y(x) = A_c e^{i\lambda x} + \bar{A}_c e^{-i\lambda x} \quad (6.4)$$

όπου ο συντελεστής A_c εξαρτάται και υπολογίζεται από τις αρχικές τιμές.

Επειδή η παραπάνω λύση είναι ταλαντωτική επιθυμούμε και η αριθμητική λύση που προσεγγίζει την πραγματική να είναι ταλαντωτική, αποσβένοντας όμως τους υπόλοιπους όρους.

Η αλγοριθμική απόσβεση είναι γνωστή από τους αλγορίθμους ολοκλήρωσης του χρόνου (time integration algorithms) στις εξισώσεις κίνησης. Αυτή η μορφή απόσβεσης είναι εξαρτώμενη από την συχνότητα και μειώνει τα πλάτη σε υψηλές συχνότητες. Η απόσβεση αυτή στις υψηλές συχνότητες είναι χρήσιμη για να μειωθούν οι ταλαντώσεις που είναι μη φυσικές και οφείλονται μόνο στη διακριτοποίηση του χρόνου και του χώρου. Με τη διαδικασία της αλγοριθμικής απόσβεσης έχουν ασχοληθεί οι Hilber, Hughes [240] και Wood [241] όπως και αρκετοί ακόμη ερευνητές.

Οι Gladwell και Thomas [146] έχουν αναλύσει τις συνθήκες που εξασφαλίζουν μια ταλαντωτική αριθμητική λύση. Παρατήρησαν πως οι συμμετρικές γραμμικές μέθοδοι πολλαπλών βημάτων που προτείνονται από τους Lambert και Watson παρότι δεν παρουσιάζουν αλγοριθμική απόσβεση δεν επιδρούν καλά σε προβλήματα με υψηλές συχνότητες. Ακόμη επισήμαναν πως οι μέθοδοι με ελάχιστη στρέβλωση συχνότητας (frequency distortion) της φάσης υστέρησης έχουν καλύτερη απόδοση από μεθόδους χωρίς αλγοριθμική απόσβεση.

Ο παρακάτω ορισμός μας δίνει τις συνθήκες σύμφωνα με τις οποίες διασφαλίζεται ότι η αριθμητική λύση y_n , όταν εφαρμόζουμε μια μέθοδος m βημάτων της μορφής (5.2) στην εξίσωση δοκιμής (6.3) με βήμα $h \neq 0$ και $H = \lambda h$, δε χαρακτηρίζεται από αλγοριθμική απόσβεση.

Ορισμός 4.1.1 Η γραμμική πολυβηματική μέθοδος (5.2) δεν έχει αλγοριθμική απόσβεση [146] για κάποια τιμή του $H = \lambda h$, αν και μόνο αν για το πολυώνυμο ευστάθειας (5.5) οι πρώτες ρίζες είναι ζευγάρι συζυγών μιγαδικών οι οποίες βρίσκονται επί του μοναδιαίου κύκλου ($|\xi_{1,2}| = 1$) ενώ οι υπόλοιπες ρίζες θα βρίσκονται είτε εντός είτε επί της περιμέτρου του μοναδιαίου κύκλου ($|\xi_s| \leq 1$). Ακόμη δεν θα υπάρχουν ρίζες με πολλαπλότητα μεγαλύτερη από 1 για τις οποίες να ισχύει $|\xi_s| = 1, s = 3, \dots, m$.

Η ιδιότητα της μη αλγοριθμικής απόσβεσης στην πράξη δεν είναι πάντα επιθυμητή. Ταλαντώσεις της ειδικής περίπτωσης όπου αντιστοιχούν σε μικρό $H = \lambda h$ δεν χρειάζονται την αλγοριθμική απόσβεση. Παρότι η απόσβεση των υψηλών ταλαντωτικών όρων (για μεγάλα $H = \lambda h$) είναι θεμιτή, δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί από μεθόδους χωρίς αλγοριθμική απόσβεση για όρους με μικρό $H = \lambda h$.

Όπως απέδειξε και ο Smith [242], μέθοδοι χωρίς αλγοριθμική απόσβεση δεν είναι κατάλληλες για προβλήματα με χαρακτηριστικά υψηλής συχνότητας, καθώς ενδέχεται οι παράγοντες οι οποίοι δεν εξαλείφονται, αναπαραγόμενοι από την αριθμητική μέθοδο να επικρατήσουν τελικά στη λύση.

Σύμφωνα με τους Lambert και Watson [1], μια γραμμική πολυβηματική μέθοδος με διάστημα περιοδικότητας $(0, H_0^2)$, για το πολυώνυμο ευστάθειας (5.2) θα ισχύει για όλες τις ρίζες του ότι $|\xi_s| = 1$. Από τον Ορισμό 3.2.1 έχουμε πως μια μέθοδος η οποία δεν παρουσιάζει αλγοριθμική απόσβεση, έχει διάστημα περιοδικότητας $(0, H_0^2)$.

Έτσι για τους Ορισμούς 3.2.1 και 4.1.1 δεν μπορεί να ισχύει $|\xi_s| < 1, s = 3, \dots, m$ και $|\xi_s| \leq 1$, οπότε πρέπει αυτά να αντικατασταθούν αντίστοιχα με $|\xi_s| = 1, s = 3, \dots, m$. Άρα έχουμε πως με τη χρήση της μεθόδου αυτής, τα όποια

σφάλματα εμφανίζονται από την αρχή, δεν αποσβένουν αλλά τελικά παραμένουν σε όλη τη διαδικασία.

Μια συμμετρική μέθοδος όμως έχεις ρίζες ξ_s με $|\xi_s| = 1$ για όλα τα $H = \lambda h$ το οποίο είναι μια μη επιθυμητή συνέπεια αριθμητικά που παρουσιάζουν τελικά οι συμμετρικές μέθοδοι με μη αλγοριθμική απόσβεση. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη μη διατήρηση της ταλαντωτικής φύσης για τους όρους χαμηλής συχνότητας, αποσβένοντας έτσι τους όρους με υψηλή συχνότητα.

Φάση υστέρησης

Αν η αριθμητική λύση της εξίσωσης δοκιμής :

$$y'' = -\lambda^2 y \quad (6.5)$$

παραμένει σε κυκλική τροχιά, η πραγματική λύση και η αριθμητική λύση μπορεί να διαφέρουν μόνο στην φάση (phase) [254].

Όταν ο όρος e^{iH} προσεγγίζεται από τον $e^{i\theta(H)}$, τότε η διαφορά φάσης είναι $\phi(H) = H - \theta(H)$. Οι Brusa και Nigro [145] ονόμασαν αυτή τη διαφορά, παραμόρφωση συχνότητας (frequency distortion). Η τάξη της παραμόρφωσης (ή phase-lag order) λέμε ότι είναι q εάν :

$$\phi(H) = O(H^{q+1}), H \rightarrow 0. \quad (6.6)$$

Οι Gladwell και Thomas [146] όπως έχουμε αναφέρει παραπάνω ανέλυσαν τις συνθήκες οι οποίες εξασφαλίζουν πότε έχουμε μια ταλαντωτική αριθμητική λύση. Επεσήμαναν πως οι συμμετρικές γραμμικές μέθοδοι πολλαπλών βημάτων που προτείνονται από τους Lambert και Watson παρότι δεν παρουσιάζουν αλγοριθμική απόσβεση δεν επιδρούν καλά σε προβλήματα όπου παρουσιάζονται

κόμβοι υψηλής συχνότητας. Έτσι ανέφεραν ότι οι μέθοδοι με ελάχιστη φάση υστέρησης (**minimal phase-lag**) σφάλματος έχουν καλύτερη απόδοση σε σχέση με μεθόδους χωρίς αλγοριθμική απόσβεση (**algorithmic damping**).

Επίσης θεώρησαν μία γενικότερη εξίσωση δοκιμής της μορφής :

$$y'' + \lambda^2 y = v e^{i\omega t} \quad (6.7)$$

ώστε να εξάγουν τις συνθήκες σύμφωνα με τις οποίες η αριθμητική εξαναγκασμένη ταλάντωση να βρίσκεται σε φάση με την πραγματική εξαναγκασμένη ταλάντωση.

Αργότερα ο Thomas καθόρισε τα σφάλματα της φάσης υστέρησης για διάφορες P-stable μεθόδους που προτείνονταν από τους Lambert , Watson [1], Cash [129],[130] και Chawla[131],[136]. Μετά τους Gladwell , Thomas , Chawla [134],[136] και οι Rao [134],[136], Ananthkrishnaiah [66],[163] ανέπτυξαν μεθόδους δύο βημάτων με ελάχιστη φάση υστέρησης σφάλματος.

Όταν εφαρμόζει κανείς μια συμμετρική μέθοδο δύο βημάτων στην εξίσωση δοκιμής (6.3) , λαμβάνει την εξίσωση διαφορών [1] της μορφής :

$$A(H)y_{n+1} - 2B(H)y_n + A(H)y_{n-1} = 0 \quad (6.8)$$

όπου $H = \lambda h$. Από την παραπάνω εξίσωση παίρνουμε το αντίστοιχο χαρακτηριστικό πολυώνυμο :

$$\pi(\xi, H) = \xi^2 - 2R(H)\xi + 1, R(H) = B(H)/A(H) \quad (6.9)$$

από όπου παίρνουμε τελικά την χαρακτηριστική εξίσωση της μορφής :

$$\xi^2 - 2R(H)\xi + 1 = 0. \quad (6.10)$$

Έτσι έχουμε τον επόμενο ορισμό σχετικά με τη φάση υστέρησης.

Ορισμός 4.2.1 Η φάση υστέρησης (**phase-lag**) μια αριθμητικής μεθόδου ορίζεται ως η απόλυτη τιμή του κυρίαρχου όρου του αναπτύγματος :

$$\left| \frac{\phi(H) - H}{H} \right| \quad (6.11)$$

όπου τα πολυώνυμα $A(H), B(H)$ προσδιορίζονται από το αντίστοιχο χαρακτηριστικό πολυώνυμο.

Η μελέτη των Brusa και Nigro [145] σχετικά με την ακρίβεια του σφάλματος αποκοπής του $\exp(i\lambda h)$ μας δίνει πως η προσέγγιση του όρου $e^{i\lambda h}$ δίνεται από τη σχέση :

$$\text{appr}\{e^{iH}\} = e^{(-\gamma(H)+i\delta(H))H}, H = \lambda h \quad (6.12)$$

όπου $\gamma(H)$ και $\delta(H)$ πραγματικές συναρτήσεις. Για $\gamma(H)=0$ και $\delta(H)=1$ έχουμε τον εκθετικό όρο e^{iH} οπότε η στρέβλωση της συχνότητας (frequency distortion) ή **phase-lag** και η αλγοριθμική απόσβεση εξαρτώνται από το μέγεθος των $|\gamma(H)|$ και $|\delta(H)-1|$.

Με βάση τον Ορισμό 3.2.1 και τον υπολογισμό της φάσης υστέρησης (**phase-lag**) έχουμε :

$$\begin{aligned} i\phi(H) &= (-\gamma(H) + i\delta(H))H \Rightarrow i\phi(H) = -\gamma(H)H + i\delta(H)H \\ \Rightarrow \phi(H) &= \delta(H)H \quad (\gamma(H) = 0) \end{aligned} \quad (6.13)$$

Από τους Lambert & Watson [1] γνωρίζουμε πως η μέθοδος (ρ, σ) έχει διάστημα περιοδικότητας της μορφής $(0, H_0^2)$, αν για κάθε $H^2 \in (0, H_0^2)$ οι ρίζες ξ_i του πολυωνύμου $\pi(\xi, H)$ ικανοποιούν τις συνθήκες :

$$\xi_1 = e^{i\phi(H)}, \xi_2 = e^{-i\phi(H)}, |\xi_i| \leq 1, i = 3, 4, \dots, m \quad (6.14)$$

όπου $\phi(H) \in \mathbb{R}$. Επίσης από τους ίδιους έχουμε και τον παρακάτω ορισμό.

Ορισμός 4.2.2 Μία μέθοδος η οποία έχει διάστημα περιοδικότητας $(0, \infty)$ ονομάζεται **P-stable**.

Η ιδιότητα **P-stability** είναι μια πολύ σημαντική ιδιότητα που συνήθως απαιτείται για την αριθμητική λύση δύσκαμπτων ταλαντωτικών προβλημάτων αρχικών τιμών δεύτερης τάξης. Η ιδιότητα **P-stability** επίσης εξασφαλίζει την διατήρηση της ιδιότητας της περιοδικότητας για όλα τα μήκη βήματος h , ανεξάρτητα από την τιμή της συχνότητας ω στην εξίσωση δοκιμής (όπως ορίζεται για μεθόδους που βασίζονται σε πολυώνυμα).

Η μέγιστη τάξη μίας **P-stable** μεθόδου είναι δύο (Dahlquist [126]: αν και η απόδειξη για αυτό το συμπέρασμα των Lambert και Watson δεν δημοσιεύθηκε ποτέ). Στο εσωτερικό του διαστήματος περιοδικότητας η λύση είναι εγγυημένη ότι είναι περιοδική (ή **quasiperiodic**).

Το παρακάτω θεώρημα μας δίνει τη συνθήκη σύμφωνα με την οποία μια μέθοδος με χαρακτηριστικό πολυώνυμο $\pi(\xi, H) = \xi^2 - 2R(H)\xi + 1$ έχει συγκεκριμένο διάστημα περιοδικότητας.

Θεώρημα 4.2.1 Μία μέθοδος με χαρακτηριστικό πολυώνυμο (6.9) έχει διάστημα περιοδικότητας $(0, H_0^2)$ αν για όλα τα $H^2 \in (0, H_0^2)$ ισχύει $|R(H)| < 1$.

Απόδειξη

Αν θέσουμε στη σχέση (6.10) όπου $\xi = \frac{1+v}{1-v}$ έχουμε :

$$\begin{aligned} (1+v)^2 - 2(1+v)(1-v)R(H) + (1-v)^2 &= 0 \\ \Leftrightarrow 2v^2 + 2R(H)v^2 - 2R(H) + 2 &= 0 \\ \Leftrightarrow 2[1 + R(H)]v^2 + 2[1 - R(H)] &= 0 \end{aligned} \quad (6.15)$$

με διακρίνουσα $\Delta = -16(1 - R^2(H))$. Είναι :

$$\Delta > 0 \Leftrightarrow -16(1 - R^2(H)) > 0 \Leftrightarrow 1 - R^2(H) < 0 \Leftrightarrow |R(H)| > 1 \quad (6.16)$$

οπότε έχουμε μιγαδικές ρίζες για την εξίσωση $2[1 + R(H)]v^2 + 2[1 - R(H)] = 0$ όταν :

$$\Delta < 0 \Leftrightarrow -16(1 - R^2(H)) < 0 \Leftrightarrow 1 - R^2(H) > 0 \Leftrightarrow |R(H)| < 1 \quad (6.17)$$

το οποίο θέλαμε να αποδείξουμε.

Πολλές φορές η φάση υστέρησης (phase-lag) δίνεται από την έκφραση :

$$phl = \frac{H - \theta(H)}{H} = \frac{H - \cos^{-1}[R(H)]}{H} \quad (6.18)$$

όπου σχετίζεται με το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 4.2.2 Μία μέθοδος η οποία έχει ως διάστημα περιοδικότητας το διάστημα $(0, H_0^2)$ τότε θα ισχύει $R(H) = \cos(\phi(H))$, $H^2 \in (0, H_0^2)$.

Απόδειξη

Αν ως ρίζες στην εξίσωση (6.10) βάλουμε τις ρίζες $\xi_1 = e^{i\phi(H)}$, $\xi_2 = e^{-i\phi(H)}$ από τον Ορισμό 3.2.1 τότε θα πάρουμε :

$$\begin{aligned} e^{i\phi(H)} - 2R(H) + e^{-i\phi(H)} &= 0 \\ \Rightarrow 2\cos(\phi(H)) - 2R(H) &= 0 \\ \Rightarrow R(H) &= \cos(\phi(H)) \end{aligned} \quad (6.19)$$

Από τους Van der Houwen και Sommeijer [165] έχουμε άλλον έναν ορισμό για τη φάση υστέρησης.

Ορισμός 4.2.3 Κάθε μέθοδος η οποία έχει χαρακτηριστική εξίσωση της μορφής (6.10) , ο κύριος όρος του αναπτύγματος :

$$phl = H - \phi(H) = H - \cos^{-1}[R(H)] \quad (6.20)$$

ονομάζεται υστέρηση φάσης ή phase-lag.

Σχετικά τώρα με την τάξη της φάσης υστέρησης από τη μελέτη των Van der Houwen, Sommeijer [165] καθώς και του Coleman [160] έχουμε πως καθώς το $H \rightarrow 0$ αν ισχύει $phl = O(H^{r+1})$, τότε η τάξη της φάσης υστέρησης θα είναι r . Έτσι έχουμε την παρακάτω σημείωση από τον Coleman.

Αν για την τάξη του phase-lag έχουμε ότι $r = 2z$ ώστε :

$$phl = kH^{2z+1} + O(H^{2z+3}) \quad (6.21)$$

όπου k σταθερά, τότε έχουμε διαδοχικά :

$$\begin{aligned} \cos(H) - R(H) &= \cos(H) - \cos(\phi(H)) = \cos(H) - \cos(H - phl) = \\ &= \cos(H) - \cos(H - kH^{2z+1} - O(H^{2z+3})) = \\ &= kH^{2z+2} + O(H^{2z+4}). \end{aligned} \quad (6.22)$$

Σύμφωνα με τους Quinlan και Tremaine [266] η τάξη μιας έμμεσης μεθόδου σύγκλισης k -βημάτων δεν μπορεί να είναι μεγαλύτερη από $(k+2)$. Οι ίδιοι πιστεύουν πως η μέγιστη τάξη μιας συγκλίνουσας άμεσης μεθόδου είναι k , αν και δεν έχει αποδειχθεί κάτι τέτοιο.

Οι Lambert και Watson [1] απέδειξαν πως μια συγκλίνουσα πολυβηματική μέθοδος με μη μηδενιζόμενο διάστημα περιοδικότητας πρέπει να είναι συμμετρική μέθοδος και πρέπει να έχει ζυγή τάξη. Ακόμη είδαμε πως μία μέθοδος λέγεται ότι είναι **P-stable** εάν το διάστημα περιοδικότητάς της είναι $(0, \infty)$.

Να σημειωθεί πως αν χρησιμοποιηθεί υπερβολικά μεγάλο βήμα, τότε μια μέθοδος πολλαπλών σταδίων μπορεί να είναι ασταθής, με αποτέλεσμα μια ξαφνική αύξηση σφάλματος να καθιστά τη λύση άνευ σημασίας.

Τέλος δίνεται ένας επιπλέον ορισμός σχετικά με τη φάση υστέρησης μιας συμμετρικής μεθόδου δύο βημάτων με χαρακτηριστική εξίσωση της μορφής (6.10), όπου η φάση υστέρησης ορίζεται ως ο πρωτεύων όρος της παράστασης:

$$\frac{[R(H) - \cos(H)]}{H^2}. \quad (6.23)$$

Έχουν προταθεί αρκετές μέθοδοι με **minimum phase-lag** για συγκεκριμένες κατηγορίες προβλημάτων. Η υψηλή τάξη της φάσης υστέρησης μιας μεθόδου είναι επιθυμητή ιδιότητα, αλλά παραμένουν ερωτήματα όπως [254], είναι χρήσιμο να υπάρχει υψηλή τάξη της φάσης υστέρησης ή είναι λογικό να θυσιάσουμε κάτι άλλο για να επιτύχουμε αυτή την ιδιότητα; Όταν πάντως έχουμε ελάχιστη φάση υστέρησης, τα αριθμητικά αποτελέσματα διαφόρων μεθόδων δείχνουν ότι καθώς μειώνεται το μέγεθος του βήματος τελικά η αλγεβρική τάξη της μεθόδου κυριαρχεί. Επίσης μέθοδοι με υψηλή τάξη φάσης υστέρησης είναι πιο ακριβείς για μεγαλύτερα μεγέθη βήματος.

Φάση υστέρησης (ΣΜ)

Προκειμένου να ορισθεί το διάστημα περιοδικότητας μια μεθόδου είναι πολύ σημαντικό να μελετηθεί η περίοδος σταθερότητας της μεθόδου. Το διάστημα περιοδικότητας προσδιορίζει το βήμα που πρέπει να χρησιμοποιηθεί ώστε η προσέγγιση της λύσης του προβλήματος με υψηλή ταλαντωτική ή περιοδική λύση να είναι της ίδιας τάξης με την αλγεβρική τάξη της μεθόδου.

Όταν έχουμε ένα μεγάλο διάστημα περιοδικότητας τότε μπορούμε να έχουμε και ένα μεγάλο βήμα για να επιτύχουμε την ίδια επιθυμητή ακρίβεια. Για να διερευνήσουν τις ιδιότητες σταθερότητας των μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων της μορφής (3.1), οι Lambert και Watson εισήγαγαν την εξίσωση δοκιμής (5.15).

Όταν μια συμμετρική $2m$ -βημάτων μέθοδος, για $i = -m(1)m$, εφαρμόζεται στην εξίσωση δοκιμής (5.15), τότε παίρνουμε την εξίσωση διαφορών :

$$A_m(H)y_{n+m} + \dots + A_1(H)y_{n+1} + A_0(H)y_n + A_1(H)y_{n-1} + \dots + A_m(H)y_{n-m} = 0 \quad (6.24)$$

όπου $H = \lambda h$, h είναι το μήκος βήματος και $A_0(H), A_1(H), \dots, A_m(H)$ είναι πολυώνυμα του H .

Η χαρακτηριστική εξίσωση η οποία σχετίζεται με την (6.24) είναι η :

$$A_m(H)s^m + \dots + A_1(H)s + A_0(H) + A_1(H)s^{-1} + \dots + A_m(H)s^{-m} = 0 \quad (6.25)$$

Ακόμη από τους Lambert και Watson [1] έχουμε τους παρακάτω δύο ορισμούς όπως και το θεώρημα 4.3.1 του οποίου η απόδειξη έγινε από τους Simos και Williams[244].

Ο Ορισμός 4.3.1 μας δίνει τις συνθήκες σύμφωνα με τις οποίες εξασφαλίζουμε πως μια συμμετρική πολυβηματική μέθοδος θα έχει ένα μη μηδενιζόμενο διάστημα περιοδικότητας της μορφής $(0, H_0^2)$.

Ορισμός 4.3.1 Μια συμμετρική $2m$ -βημάτων μέθοδος με χαρακτηριστική εξίσωση (6.25) λέμε ότι έχει διάστημα περιοδικότητας $(0, H_0^2)$ αν για όλα τα $H \in (0, H_0^2)$, οι ρίζες $\xi, i = 1(1)2m$ της εξίσωσης (6.25) ικανοποιούν :

$$\xi_1 = e^{i\phi(H)}, \xi_2 = e^{-i\phi(H)}, |\xi| \leq 1, i = 3(1)2m \quad (6.26)$$

όπου $\phi(H)$ πραγματική συνάρτηση ως προς H .

Από τον Ορισμό 4.3.2 μπορούμε να προσδιορίσουμε την τάξη της φάσης υστέρησης μια μεθόδου για την οποία έχουμε το ανάπτυγμα του **phase-lag**.

Ορισμός 4.3.2 Για κάθε μέθοδο που αντιστοιχίζεται στην χαρακτηριστική εξίσωση (6.25) η φάση υστέρησης ορίζεται ως ο κύριος όρος του αναπτύγματος

$phl = H - \phi(h)$, όπου έχουμε αν $phl = O(H^{r+1})$ καθώς το $H \rightarrow \infty$, τότε η τάξη της φάσης υστέρησης είναι r .

Τέλος, έχουμε την απόδειξη των Simos και Williams [244] για τον άμεσο τύπο υπολογισμού της φάσης υστέρησης μιας συμμετρικής μεθόδου.

Θεώρημα 4.3.1 Συμμετρική μέθοδος $2m$ -βημάτων με αντίστοιχη χαρακτηριστική εξίσωση (6.25) έχει τάξη φάσης υστέρησης r και σταθερά c που δίνονται από τον τύπο :

$$-cH^{r+2} + O(H^{r+4}) = \frac{2A_k(H)\cos(kH) + \dots + 2A_j(H)\cos(jH) + \dots + A_0(H)}{2k^2 A_k(H) + \dots + 2j^2 A_j(H) + \dots + 2A_1(H)} \quad (6.27)$$

Απόδειξη

Η εξίσωση (6.25) για $s = e^{i\phi(H)}$ γίνεται :

$$2A_k(H)\cos(k(H)) + \dots + 2A_j(H)\cos(j\phi(H)) + \dots + A_0H = 0 \quad (6.28)$$

Για το phase-lag έχουμε :

$$phl = H - \cos(\phi(H)) = cH^{r+1} + O(H^{r+1}) \quad (6.29)$$

όπου r η τάξη του phase-lag και c σταθερά. Εφόσον είναι $\phi(H) = H - phl$ αναπτύσσουμε τα :

$$\cos(\phi(H)) = \cos(H - phl) = \cos(H) + cH^{r+2} + O(H^{r+3}) \quad (6.30)$$

$$\sin(\phi(H)) = \sin(H - phl) = \sin(H) - cH^{r+1} + O(H^{r+2})$$

οπότε αντίστοιχα έχουμε :

$$\cos(j\phi(H)) = \cos((j-1)\phi(H))\cos\phi(H) - \sin((j-1)\phi(H))\sin\phi(H) \quad (6.31)$$

$$\sin(j\phi(H)) = \sin((j-1)\phi(H))\cos\phi(H) - \cos((j-1)\phi(H))\sin\phi(H)$$

όπου προκύπτει :

$$\cos(j\phi(H)) = \cos(jH) + cj^2H^{r+2} + O(H^{r+3}) \quad (6.32)$$

$$\sin(j\phi(H)) = \sin(jH) - cj^2H^{r+1} + O(H^{r+2})$$

Αντικαθιστώντας τώρα τις σχέσεις της (6.32) στην εξίσωση (6.28) , για $j = 1, 2, \dots, k$ αποδεικνύεται το θεώρημα. Για το αντίστροφο θέλουμε να αποδείξουμε πως αν ισχύει η σχέση (6.27) , τότε η μέθοδος θα παρουσιάζει **phase-lag** με τάξη r όπου θα ισχύει :

$$phl = H - \phi(H) = gH^{q+1} + O(H^{q+3}) \quad (6.33)$$

Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα :

$$\cos(j\phi(H)) = \cos(jH) + gj^2H^{q+2} + O(H^{q+3}) \quad (6.34)$$

στη σχέση (6.27) παίρνουμε :

$$-2gH^{q+1} \sum_{j=0}^k A_j j^2 = -2cH^{r+1} \sum_{j=0}^k A_j j^2 + O(H^{r+2}) \quad (6.35)$$

όπου προφανώς προκύπτει ότι $q = r$ και $g = c$, οπότε αποδείξαμε και το αντίστροφο του θεωρήματος.

Κατασκευή EPCM μέθοδου

Στο κεφάλαιο αυτό θα κατασκευάσουμε ένα ζευγάρι νέων τύπων , γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων πρόβλεψης και διόρθωσης για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών της μορφής (3.1). Η κατασκευή των μεθόδων αυτών γίνεται ώστε να επιλύεται αριθμητικά τόσο η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger με χρήση του δυναμικού Wood-Saxon αλλά και οποιοδήποτε πρόβλημα με ταλαντωτικές ή περιοδικές λύσεις.

Αρχικά παρ2θέτουμε τη μεθοδολογία και το θεωρητικό υπόβαθρο που χρησιμοποιήσαμε για την κατασκευή αυτών των νέων τύπων πρόβλεψης – διόρθωσης. Έπειτα αναφερόμαστε στο τρόπο κατασκευής μιας νέας άμεσης μεθόδου που θα λειτουργήσει ως μέθοδος πρόβλεψης. Έστερα αναπτύσσουμε τον τρόπο κατασκευής μια νέας έμμεσης μεθόδου που θα χρησιμοποιήσουμε ως μέθοδο διόρθωσης.

Ακόμη , στην επόμενη παράγραφο , γίνεται εκτενής αναφορά στον τρόπο κατασκευής της νέας ενσωματωμένης πολυβηματικής μεθόδου πρόβλεψης και διόρθωσης που εφαρμόζουμε για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης **Schrödinger**. Ο υπολογισμός των συντελεστών της νέας αυτής μεθόδου έγινε με στόχο να έχουμε μεγαλύτερη αλγεβρική τάξη , να έχει εξαφανισθεί η φάση υστέρησης και να έχουμε εξαλείψει την πρώτη παράγωγο της φάσης υστέρησης.

Προκειμένου να αποδείξουμε την αποτελεσματικότητα της νέας μεθόδου , θα μελετήσουμε το σφάλμα της και θα την εφαρμόσουμε για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων όπως : 1) Ανομοιογενής εξίσωση , 2) Τροχιακό πρόβλημα των **Stiefel ,Bettis** , 3) Το πρόβλημα των N-σωμάτων , 4) Τροχιακό πρόβλημα των **Franco , Palacios** , 5) Της ακτινικής εξίσωσης **Schrödinger** , 6) Της **Duffing** εξίσωσης, 7) Μη γραμμικής εξίσωσης και 8) Των δύο-διαστάσεων πρόβλημα **Kepler** . Επίσης θα διερευνήσουμε τη σταθερότητα της νέας αυτής μεθόδου και θα υπολογίσουμε το διάστημα περιοδικότητά της.

Σκοπός μας είναι η βελτιστοποίηση της αποτελεσματικότητας μιας αριθμητικής μεθόδου για την καλύτερη προσέγγιση της λύσης προβλημάτων της μορφής (3.1). Η νέα αυτή μέθοδος συγκρίνεται με ήδη υπάρχουσες αριθμητικές μεθόδους και στη τελευταία παράγραφο δίνουμε τα συμπεράσματα μας σχετικά με την νέα αυτή μέθοδο.

Μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης

Η κατασκευή γραμμικών μεθόδων πολλών βημάτων πρόβλεψης-διόρθωσης ξεκινάει με τον γενικό τύπο των Lambert-Watson [1] για γραμμικές πολυβηματικές μεθόδους m -βημάτων πρόβλεψης-διόρθωσης για προβλήματα αρχικών τιμών της μορφής (3.1) :

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=0}^m a_i^* q_{n+i} &= h \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f_{n+i} \\ \sum_{i=0}^m a_i q_{n+i} &= h \sum_{i=0}^m b_i f_{n+i} \end{aligned} \right\} \quad (7.1)$$

Αν θεωρήσουμε ως p^* την αλγεβρική τάξη της μεθόδου πρόβλεψης, ως p την αλγεβρική τάξη της μεθόδου διόρθωσης και k είναι ο αριθμός που μας δείχνει το πόσες φορές χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος διόρθωσης στη μέθοδο πρόβλεψης, τότε τους αριθμούς αυτούς τους συνδέει η σχέση $k \leq p - p^* - 1$, με $p^* + k$ να είναι η αλγεβρική τάξη της μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης (7.1).

Για την κατασκευή των νέων μεθόδων, θεωρούμε τις γραμμικές πολυβηματικές μεθόδους m -βημάτων της μορφής :

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=0}^m a_i^* q_{n+i} &= h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f_{n+i} \\ \sum_{i=0}^m a_i q_{n+i} &= h^2 \sum_{i=0}^m b_i f_{n+i} \end{aligned} \right\} \quad (7.2)$$

όπου h είναι το μήκος του βήματος, και ισχύουν : $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0| + |b_0| \neq 0$, $b_m^* = 0$, και $b_m \neq 0$.

Ακόμη θεωρούμε $a_m^* = 1$ και $a_m = 1$ χωρίς βλάβη της γενικότητας, και έτσι έχουμε :

$$\left. \begin{aligned} q_{n+m} + \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} &= h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ q_{n+m} + \sum_{i=0}^{m-1} a_i q_{n+i} &= h^2 \left(b_m f(x_{n+m}, q_{n+m}) + \sum_{i=0}^{m-1} b_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) \right) \end{aligned} \right\} (7.3)$$

και ισοδύναμα :

$$\left. \begin{aligned} q_{n+m} &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ q_{n+m} &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i q_{n+i} + h^2 b_m f(x_{n+m}, q_{n+m}) + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) \end{aligned} \right\} (7.4)$$

Για δεύτερου βαθμού προβλήματα αρχικών τιμών, η αριθμητική ολοκλήρωση δίνει το παρακάτω ζευγάρι πολυβηματικών μεθόδων :

$$\left. \begin{aligned} q_{n+m}^* &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ q_{n+m} &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 b_m f(x_{n+m}, q_{n+m}^*) + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) \end{aligned} \right\} (7.5)$$

όπου $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0| + |b_0| \neq 0$ και $b_m \neq 0$.

Γνωρίζουμε πως εάν είναι $a_i^* = a_{m-i}^*$, $b_i^* = b_{m-i}^*$, $a_i = a_{m-i}$ και $b_i = b_{m-i}$, $i = 0(1)[\frac{m}{2}]$ τότε η μέθοδος είναι συμμετρική. Συγκεκριμένα τώρα για $m = 8$ στον τύπο (7.5) παίρνουμε :

$$\left. \begin{aligned} q_4^* &= -(q_{-4} + a_3^*(q_3 + q_{-3}) + a_2^*(q_2 + q_{-2}) + a_1^*(q_1 + q_{-1}) + a_0^* q_0) \\ &\quad + h^2(b_3^*(f_3 + f_{-3}) + b_2^*(f_2 + f_{-2}) + b_1^*(f_1 + f_{-1}) + b_0^* f_0) \\ q_4 &= -(q_{-4} + a_3(q_3 + q_{-3}) + a_2(q_2 + q_{-2}) + a_1(q_1 + q_{-1}) + a_0 q_0) \\ &\quad + h^2(b_4(f_4 + f_{-4}) + b_3(f_3 + f_{-3}) + b_2(f_2 + f_{-2}) + \\ &\quad + b_1(f_1 + f_{-1}) + b_0 f_0) \end{aligned} \right\} (7.6)$$

που είναι ο τύπος των συμμετρικών πολυβηματικών γραμμικών μεθόδων 8 βημάτων πρόβλεψης-διόρθωσης, όπου $q_i = q(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, q(x + ih))$, $i = -4(1)3$, $f_4 = f(x + 4h, q_4^*)$ και h είναι το μέγεθος του βήματος.

Τότε η χαρακτηριστική εξίσωση γράφεται ως :

$$\sum_{i=1}^4 A_i(v)(s^i + s^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (7.7)$$

με $a_4 = a_4^* = 1, b_4^* = 0$.

Σύμφωνα με την παρακάτω μεθοδολογία, θα εξηγήσουμε εκτενώς πώς από το παραπάνω ζεύγος γραμμικών πολυβηματικών συμμετρικών μεθόδων (7.5), θα καταλήξουμε σε ένα νέο ζεύγος, που ονομάζουμε ενσωματωμένες γραμμικές συμμετρικές πολυβηματικές μέθοδοι πρόβλεψης και διόρθωσης, με την έννοια ότι η μέθοδος πρόβλεψης εμπεριέχεται (ή αλλιώς ενσωματώνεται) πλήρως στην μέθοδο διόρθωσης.

Για $a_i = a_i^*$, $i = 0(1)m - 1$ στους τύπους (7.5) έχουμε:

$$\begin{aligned} q_{n+m}^* &= -\Gamma + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ q_{n+m} &= -\Gamma + h^2 b_m f(x_{n+m}, q_{n+m}^*) + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ \Gamma &= \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} \end{aligned} \quad (7.8)$$

όπου $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0^*| + |b_0| \neq 0$ και $b_m \neq 0$.

Αν τώρα ισχύει $a_i^* = a_{m-i}^*$, $b_i^* = b_{m-i}^*$ και $b_i = b_{m-i}$, $i = 0(1)\lfloor \frac{m}{2} \rfloor$ τότε η μέθοδος καλείται συμμετρική. Μπορούμε στην σχέση (7.8) να γράψουμε ως :

$$b_i = b_i + 0 = b_i - b_i^* + b_i^* = (b_i - b_i^*) + b_i^*,$$

όπου $\beta_i = b_i - b_i^*$, $i = 0(1)m - 1$, και τότε θα έχουμε :

$$b_i = \beta_i + b_i^*$$

άρα :

$$\begin{aligned} h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) &= h^2 \sum_{i=0}^{m-1} (\beta_i + b_i^*) f(x_{n+i}, q_{n+i}) = \\ &h^2 \sum_{i=0}^{m-1} \beta_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \end{aligned} \quad (7.9)$$

και τελικά καταλήγουμε :

$$\left. \begin{aligned} q_{n+m}^* &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ q_{n+m} &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 b_m f(x_{n+m}, q_{n+m}^*) \\ &+ h^2 \sum_{i=0}^{m-1} \beta_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \end{aligned} \right\} \quad (7.10)$$

ή ισοδύναμα :

$$\left. \begin{aligned} q_{n+m}^* &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ q_{n+m} &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ &+ h^2 b_m f(x_{n+m}, q_{n+m}^*) + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} \beta_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) \end{aligned} \right\} \quad (7.11)$$

όπου $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0^*| + |\beta_0| \neq 0$ και $b_m \neq 0$. Από την σχέση (7.2) έχουμε πως $b_m^* = 0$ και επίσης $b_m \neq 0$ οπότε αν γράψουμε ως $\beta_m = b_m - b_m^*$, τότε θα έχουμε:

$$\beta_m = b_m - b_m^* = b_m - 0 = b_m \neq 0$$

και για :

$$\beta_i = b_i - b_i^*, i = 0(1)m \quad (7.12)$$

οι τύποι (7.11) γίνονται :

$$\begin{aligned} q_{n+m}^* &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^* f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ q_{n+m} &= q_{n+m}^* + h^2 \sum_{i=0}^m \beta_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) \end{aligned} \quad (7.13)$$

όπου $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0^*| + |\beta_0| \neq 0$.

Το παραπάνω ζευγάρι είναι το νέο ζευγάρι μεθόδων, το οποίο καλούμε ενσωματωμένη ή εμπειρέχουσα μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης, αφού στους τύπους (7.13) ξεκάθαρα η μέθοδος πρόβλεψης ενσωματώνεται πλήρως στη μέθοδο διόρθωσης. Σε επόμενη παράγραφο δείχνουμε πως η παραπάνω μέθοδος υπερτερεί σε σχέση με άλλες μεθόδους καθώς η νέα αυτή μέθοδος έχει μειωμένο υπολογιστικό κόστος. Όπως παραπάνω, σαφώς αν ισχύει $a_i^* = a_{m-i}^*$, $b_i^* = b_{m-i}^*$ και $\beta_i = \beta_{m-i}$, $i = 0(1)\lfloor \frac{m}{2} \rfloor$ τότε η μέθοδος είναι συμμετρική.

Νέα μεθόδος πρόβλεψης

Για την κατασκευή της νέας άμεσης μεθόδου, που θα χρησιμοποιηθεί ως μέθοδος πρόβλεψης, αν στη σχέση (5.2) θέσουμε όπου $a_m = 1$, παίρνουμε :

$$q_{n+m} + \sum_{i=0}^{m-1} a_i q_{n+i} = h^2 \sum_{i=0}^m b_i f(x_{n+i}, q_{n+i}),$$

και ισοδύναμα έχουμε :

$$q_{n+m} = - \sum_{i=0}^{m-1} a_i q_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^m b_i f(x_{n+i}, q_{n+i}) \quad (7.14)$$

Επιπλέον αν ισχύει $a_i = a_{m-i}$ και $b_i = b_{m-i}$, $i = 0(1)\lfloor \frac{m}{2} \rfloor$ τότε η μέθοδος είναι συμμετρική.

Για την κατασκευή της νέας άμεσης μεθόδου πρόβλεψης, αν θέσουμε όπου $m = 8$ και $b_8 = 0$ στο τύπο (7.14) τότε λαμβάνουμε την νέα άμεση συμμετρική μέθοδο :

$$q_4 = -(q_{-4} + a_3(q_3 + q_{-3}) + a_2(q_2 + q_{-2}) + a_1(q_1 + q_{-1}) + a_0 q_0) + h^2(b_3(f_3 + f_{-3}) + b_2(f_2 + f_{-2}) + b_1(f_1 + f_{-1}) + b_0 f_0). \quad (7.15)$$

όπου $q_i = q(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, q(x + ih))$, και h είναι το μέγεθος του βήματος. Έτσι, η χαρακτηριστική εξίσωση (7.7), παίρνει τη μορφή :

$$\sum_{i=1}^4 A_i(v)(s^i + s^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (7.16)$$

όπου $A_i(v) = a_i + v^2 b_i$, $i = 0(1)4$, $a_4 = 1$, $b_4 = 0$. Ο τύπος τώρα (7.15), με :

$$\begin{aligned} a_3 = -2, \quad a_2 = 2, \quad a_1 = -1, \quad a_0 = 0, \\ b_3 = \frac{17671}{12096}, \quad b_2 = -\frac{3937}{2016}, \quad b_1 = \frac{20483}{4032}, \quad b_0 = -\frac{12629}{3024}, \end{aligned} \quad (7.17)$$

είναι η πολυβηματική συμμετρική μέθοδος των Quinlan-Tremaine, 8 βημάτων, 8ης αλγεβρικής τάξης επίσης με phase-lag 8ης τάξης και διάστημα περιοδικότητας $(0, v_0^2)$, όπου $v_0^2 = 0.52$.

Κρατώντας τώρα τους ίδιους συντελεστές a_i του (7.17), για τον προσδιορισμό των νέων συντελεστών $b_0^*, b_1^*, b_2^*, b_3^*$ λύνουμε ένα σύστημα δύο εξισώσεων ως προς b_0^*, b_2^* έχοντας ελεύθερους αγνώστους τους συντελεστές b_1^*, b_3^* . Ο προσδιορισμός των συντελεστών αυτών θα επιτευχθεί αργότερα από την εξαφάνιση της πρώτης παραγώγου της φάσης υστέρησης που παρουσιάζουμε αργότερα.

Εξαφανίζοντας τη φάση υστέρησης από τον τύπο (7.15) και απαιτώντας επιπλέον οι συντελεστές να ικανοποιούν τις σχέσεις (7.15-7.17) παίρνουμε αναλυτικά:

$$\begin{aligned}
 a_3^* &= -2, & a_2^* &= 2, & a_1^* &= -1, & a_0^* &= 0, \\
 b_0^* &= -\frac{3}{2}b_1^* - \frac{5}{24} + \frac{5}{2}b_3^*, & b_2^* &= \frac{125}{48} - \frac{9}{4}b_3^* - \frac{1}{4}b_1^*, \\
 b_1^* &= \frac{A}{B}, & b_3^* &= \frac{C}{D} \\
 A &= 768 \cos(\nu)^6 \nu - 500 \cos(\nu)^4 \nu^3 - 1536 \cos(\nu)^5 \sin(\nu) \\
 &- 192 \cos(\nu)^5 \nu - 1000 \cos(\nu)^3 \nu^3 + 192 \cos(\nu)^4 \sin(\nu) \\
 &- 2400 \cos(\nu)^4 \nu - 595 \cos(\nu)^2 \nu^3 + 2112 \cos(\nu)^3 \sin(\nu) \\
 &+ 100 \cos(\nu) \nu^3 - 288 \cos(\nu)^2 \sin(\nu) + 1980 \cos(\nu)^2 \nu \\
 &+ 195 \nu^3 - 648 \cos(\nu) \sin(\nu) + 192 \cos(\nu) \nu + 168 \sin(\nu) - 348 \nu
 \end{aligned} \tag{7.18}$$

$$\begin{aligned}
 B &= -48 \nu^3 (\cos(\nu)^4 - 2 \cos(\nu)^3 + 2 \cos(\nu) - 1) \\
 C &= 192 \cos(\nu)^5 \nu - 192 \cos(\nu)^4 \sin(\nu) - 288 \cos(\nu)^4 \nu \\
 &- 125 \cos(\nu)^2 \nu^3 + 192 \cos(\nu)^3 \sin(\nu) - 192 \cos(\nu) \nu^3 \\
 &+ 96 \cos(\nu)^2 \sin(\nu) + 324 \cos(\nu)^2 \nu \\
 &+ 65 \nu^3 - 120 \cos(\nu) \sin(\nu) + 24 \sin(\nu) - 36 \nu
 \end{aligned} \tag{7.19}$$

$$D = -48 \nu^3 (\cos(\nu)^4 - 2 \cos(\nu)^3 + 2 \cos(\nu) - 1)$$

όπου $\nu = \omega h$, ω είναι η συχνότητα και h είναι το μέγεθος του βήματος.

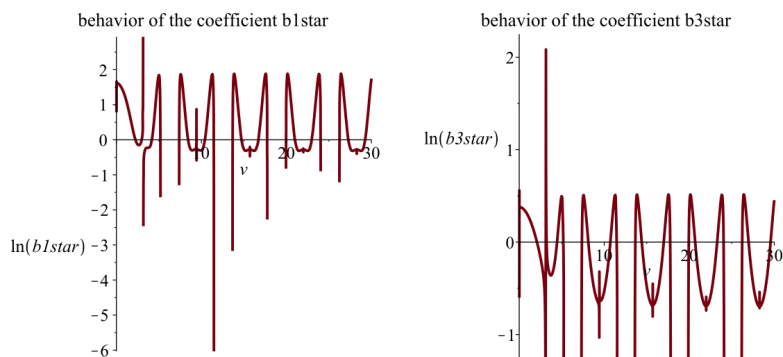
Η μεθοδολογία εξαφάνισης της φάσης υστέρησης καθώς και παραγώγων αυτής, βασίζεται στον άμεσο τύπο υπολογισμού της φάσης υστέρησης για $2k$ -συμμετρικές μεθόδους (6.27).

Για κάποιες τιμές της συχνότητας $|\omega|$, οι παραπάνω τύποι (7.18) υπόκεινται σε σημαντικές διαγραφές όρων, οπότε σε αυτή την περίπτωση πρέπει να

χρησιμοποιηθεί το παρακάτω ανάπτυγμα Taylor :

$$\begin{aligned}
 b_1^* &= \frac{20483}{4032} - \frac{45767}{24192} v^2 + \frac{10476617}{31933440} v^4 - \frac{45578707}{1585059840} v^6 + \frac{1514526707}{1046139494400} v^8 \\
 &\quad - \frac{5016343559}{106706228428800} v^{10} + \frac{19742264573}{17466988776652800} v^{12} - \frac{255770741509}{14986676370368102400} v^{14} \\
 &\quad + \frac{500020227347}{1128088003151344435200} v^{16} + \frac{64892605249859}{4343138812132676075520000} v^{18} \\
 b_3^* &= \frac{17671}{12096} - \frac{45767}{362880} v^2 + \frac{96865}{19160064} v^4 - \frac{21971953}{261534873600} v^6 + \frac{82561}{448345497600} v^8 \\
 &\quad - \frac{17608099}{123122571264000} v^{10} - \frac{1184824691}{75690284698828800} v^{12} - \frac{1864866399161}{1124000727776707680000} v^{14} \\
 &\quad - \frac{1667858950789}{9796553711577464832000} v^{16} - \frac{59358495346543}{3428793799052112691200000} v^{18}
 \end{aligned}$$

Αυτή είναι η άμεση συμμετρική μέθοδος (7.18) 8 βημάτων , 8ης αλγεβρικής τάξης και άπειρης τάξης **phase-lag**. Στον επόμενο Πίνακα(7.1) παρουσιάζουμε τη συμπεριφορά των συντελεστών b_1^* και b_3^* αντίστοιχα.



Πίνακας 7.1: Γράφημα της συμπεριφοράς των συντελεστών της μεθόδου πρόβλεψης της νέας EPCM μεθόδου για διάφορες τιμές του $v = \omega h$

Νέα μεθόδος διόρθωσης

Σχετικά τώρα με την κατασκευή της έμμεσης συμμετρικής μεθόδου, αν στον τύπο (7.14) βάλουμε όπου $m = 8$ παίρνουμε τη μέθοδο :

$$q_4 = -q_{-4} - a_3(q_3 + q_{-3}) - a_2(q_2 + q_{-2}) - a_1(q_1 + q_{-1}) + h^2 \Delta$$

$$\Delta = (b_4(f_4^* + f_{-4}) + b_3(f_3 + f_{-3}) + b_2(f_2 + f_{-2}) + b_1(f_1 + f_{-1}) + b_0 f_0)$$

όπου $q_i = q(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, q(x + ih))$, $f_4^* = f(x + 4h, q_4^*)$ και h είναι το μέγεθος του βήματος. Τότε η χαρακτηριστική εξίσωση (7.7) γίνεται:

$$\sum_{i=1}^4 A_i(v)(s^i + s^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (7.20)$$

όπου :

$$A_i(v) = \alpha_i + v^2 \beta_i, \quad i = 0(1)4, \quad \alpha_4 = 1.$$

Κρατώντας τώρα τους ίδιους συντελεστές a_i του (7.17), για τον προσδιορισμό των νέων συντελεστών b_0, b_1, b_2, b_3, b_4 λύνουμε ένα σύστημα τριών εξισώσεων ως προς b_0, b_2, b_4 έχοντας ελεύθερους αγνώστους τους συντελεστές b_1, b_3 . Ο προσδιορισμός των συντελεστών αυτών θα επιτευχθεί αργότερα από την εξαφάνιση της πρώτης παραγώγου της φάσης υστέρησης που παρουσιάζουμε παρακάτω.

Εξαφανίζοντας τη φάση υστέρησης από τον τύπο (7.20) και απαιτώντας επιπλέον οι συντελεστές να ικανοποιούν τις σχέσεις (7.20-7.17) παίρνουμε αναλυτικά:

$$\begin{aligned}
 a_3 &= -2, & a_2 &= 2, & a_1 &= -1, & a_0 &= 0, \\
 b_0 &= -\frac{12629}{3024} + \frac{35}{32} b_3 - \frac{45}{32} b_1, & b_2 &= -\frac{3937}{2016} - \frac{21}{16} b_3 - \frac{5}{16} b_1, & & & & (7.21) \\
 b_4 &= -\frac{15}{64} b_3 + \frac{1}{64} b_1, & b_1 &= \frac{E}{F}, & b_3 &= \frac{G}{H}
 \end{aligned}$$

όπου :

$$\begin{aligned}
 E &= (88355 \cos(\nu)^5 \nu^3 + 146955 \cos(\nu)^4 \nu^3 + 241920 \cos(\nu)^5 \sin(\nu) \\
 &+ 137088 \cos(\nu)^5 \nu + 209722 \cos(\nu)^3 \nu^3 - 32256 \cos(\nu)^4 \sin(\nu) \\
 &+ 193536 \cos(\nu)^4 \nu + 58858 \cos(\nu)^2 \nu^3 - 330624 \cos(\nu)^3 \sin(\nu) \\
 &- 144144 \cos(\nu)^3 \nu - 86397 \cos(\nu) \nu^3 + 46368 \cos(\nu)^2 \sin(\nu) \\
 &- 234864 \cos(\nu)^2 \nu + 5867 \nu^3 + 100800 \cos(\nu) \sin(\nu) \\
 &+ 7056 \cos(\nu) \nu - 26208 \sin(\nu) + 41328 \nu) \\
 F &= -4032 \nu^3 K \\
 K &= (\cos(\nu)^5 - 3 \cos(\nu)^4 + 2 \cos(\nu)^3 + 2 \cos(\nu)^2 - 3 \cos(\nu) + 1) \\
 G &= (17671 \cos(\nu)^5 \nu^3 + 29391 \cos(\nu)^4 \nu^3 + 48384 \cos(\nu)^5 \sin(\nu) \\
 &- 24192 \cos(\nu)^5 \nu + 129842 \cos(\nu)^3 \nu^3 + 96768 \cos(\nu)^4 \sin(\nu) \\
 &+ 193536 \cos(\nu)^4 \nu + 58274 \cos(\nu)^2 \nu^3 - 169344 \cos(\nu)^3 \sin(\nu) \\
 &- 3024 \cos(\nu)^3 \nu - 56793 \cos(\nu) \nu^3 - 42336 \cos(\nu)^2 \sin(\nu) \\
 &- 214704 \cos(\nu)^2 \nu + 3055 \nu^3 + 84672 \cos(\nu) \sin(\nu) \\
 &+ 27216 \cos(\nu) \nu - 18144 \sin(\nu) + 21168 \nu) \\
 H &= -12096 \nu^3 L \\
 L &= (\cos(\nu)^5 - 3 \cos(\nu)^4 + 2 \cos(\nu)^3 + 2 \cos(\nu)^2 - 3 \cos(\nu) + 1)
 \end{aligned}$$

με $\nu = \omega h$, ω να είναι η συχνότητα και h να είναι το μέγεθος του βήματος.

Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα της σειράς Taylor έχουμε :

$$\begin{aligned}
 b_1 = & \frac{280997}{181440} - \frac{58061}{285120} v^2 + \frac{9763021}{566092800} v^4 - \frac{10173341}{49037788800} v^6 - \frac{206689751}{38109367296000} v^8 \\
 & - \frac{3504837829}{15205637551104000} v^{10} + \frac{726781085}{128457226031726592} v^{12} + \frac{1422084674027}{923286312103034880000} v^{14} \\
 & + \frac{306589643822831}{1728391976256881295360000} v^{16} + \frac{4568432670179219}{254073620509761550417920000} v^{18} \\
 & + \frac{13718357171397169}{7655205189385023337267200000} v^{20} + \frac{27062984023636776889}{150752041993261918324968652800000} v^{22} \\
 & + \frac{58901906167603147250543}{3256244107054457435819322900480000000} v^{24}
 \end{aligned}$$

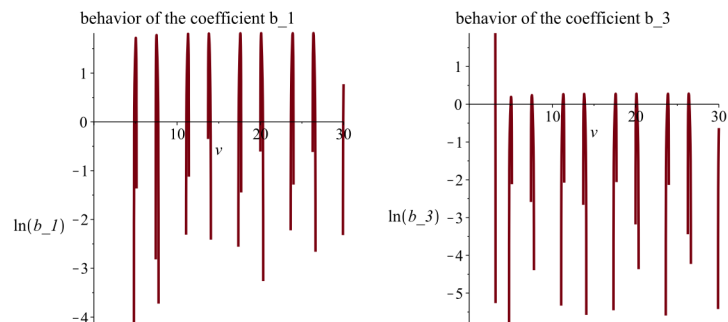
$$\begin{aligned}
 b_3 = & \frac{173531}{181440} - \frac{58061}{1995840} v^2 + \frac{16818071}{43589145600} v^4 - \frac{155117}{3064861800} v^6 - \frac{673284671}{266765571072000} v^8 \\
 & - \frac{4040637329}{21287892571545600} v^{10} - \frac{53420333269}{3211430650793164800} v^{12} - \frac{43018307527}{26166008845025280000} v^{14} \\
 & - \frac{14215306701522463}{84691206836587183472640000} v^{16} - \frac{1147708651952909}{66861479081516197478400000} v^{18} \\
 & - \frac{1030785767178717181}{589450799582646796969574400000} v^{20} - \frac{187445932736169063041}{1055264293952833428274780569600000} v^{22} \\
 & - \frac{58664248899123947704591}{3256244107054457435819322900480000000} v^{24}
 \end{aligned}$$

με $v = \omega h$, ω να είναι η συχνότητα και h να είναι το μέγεθος του βήματος. Αυτή είναι η έμμεση συμμετρική πολυβηματική μέθοδος (7.21) 8 βημάτων, 10ης αλγεβρικής τάξης και άπειρης τάξης φάσης υστέρησης. Στην επόμενη εικόνα (7.2) παρουσιάζουμε τη συμπεριφορά των συντελεστών b_1 και b_3 αντίστοιχα.

Κατασκευή νέας EPCM μεθόδου

Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζουμε αναλυτικά τα βήματα που ακολουθήσαμε για την κατασκευή της νέας όπως ονομάσαμε συμμετρικής πολυβηματικής ενσωματωμένης μεθόδου πρόβλεψης - διόρθωσης (Embedded Predictor-Corrector Method - EPCM).

Σκοπός κατά τη διαδικασία κατασκευής της νέας αυτής μεθόδου ήταν ο προσδιορισμός των συντελεστών της, ώστε η μέθοδος να έχει τη βέλτιστη αλγεβρική



Πίνακας 7.2: Γράφημα της συμπεριφοράς των συντελεστών της μεθόδου διόρθωσης της νέας EPCM μεθόδου για διάφορες τιμές του $\nu = \omega h$

τάξη, να έχει εξαφανισθεί η φάση υστέρησης και τέλος να έχουμε εξαφανίσει οπωσδήποτε την πρώτη παράγωγο της φάσης υστέρησης της μεθόδου.

Ξεκινώντας υποθέτουμε πως οι συντελεστές b_i^* , b_i , $i = 0(1)m$ στο ζευγάρι των συμμετρικών μεθόδων (7.2), εξαρτώνται από το ν ως εξής: ($b_i^* = b_i^*(\nu)$, $b_i = b_i(\nu)$) οπότε από την σχέση (7.12) κάθε β_i μετασχηματίζεται σε: $\beta_i = b_i - b_i^* = b_i(\nu) - b_i^*(\nu) = \beta_i(\nu)$, $i = 0(1)m$.

Έτσι λαμβάνουμε το ενσωματωμένο ζευγάρι πρόβλεψης-διόρθωσης (7.13):

$$\left. \begin{aligned} q_{n+m}^* &= - \sum_{i=0}^{m-1} a_i^* q_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{m-1} b_i^*(\nu) f(x_{n+i}, q_{n+i}) \\ q_{n+m} &= q_{n+m}^* + h^2 \sum_{i=0}^m \beta_i(\nu) f(x_{n+i}, q_{n+i}) \end{aligned} \right\} \quad (7.22)$$

όπου :

$$\begin{aligned} |a_0^*| + |b_0^*(\nu)| &\neq 0, |a_0^*| + |\beta_0(\nu)| \neq 0, \\ \beta_i(\nu) &= b_i(\nu) - b_i^*(\nu), i = 0(1)m, b_m^*(\nu) = 0. \end{aligned} \quad (7.23)$$

Εάν $a_i^* = a_{m-i}^*$, $b_i^*(\nu) = b_{m-i}^*(\nu)$ και $\beta_i(\nu) = \beta_{m-i}(\nu)$, $i = 0(1)\lfloor \frac{m}{2} \rfloor$ τότε η μέθο-

δος είναι συμμετρική.

Από τον τύπο (7.22) και για $m = 8$, παίρνουμε τον τύπο της συμμετρικής ενσωματωμένης μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης (EPCM) , 8 βημάτων :

$$\left. \begin{aligned} q_4^* &= -(q_{-4} + a_3^*(q_3 + q_{-3}) + a_2^*(q_2 + q_{-2}) + a_1^*(q_1 + q_{-1}) \\ &+ a_0^* q_0) + h^2(b_3^*(v)(f_3 + f_{-3}) + b_2^*(v)(f_2 + f_{-2}) \\ &+ b_1^*(v)(f_1 + f_{-1}) + b_0^*(v)f_0) \\ q_4 &= q_4^* + h^2(\beta_4(v)(f_4 + f_{-4}) + \beta_3(v)(f_3 + f_{-3}) \\ &+ \beta_2(v)(f_2 + f_{-2}) + \beta_1(v)(f_1 + f_{-1}) + \beta_0(v)f_0) \end{aligned} \right\} \quad (7.24)$$

με $q_i = q(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, q(x + ih))$, $i = -4(1)3$, $f_4 = f(x + 4h, q_4^*)$ και h το μέγεθος του βήματος.

Ακόμη , η χαρακτηριστική εξίσωση (7.16) γίνεται :

$$\sum_{i=1}^4 A_i(v)(s^i + s^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (7.25)$$

με $A_i(v) = a_i^* + v^2(\beta_i(v) - a_i^* \beta_4(v)) - v^4 b_i^*(v) \beta_4(v)$, $i = 0(1)4$, $a_4^* = 1$, $b_4^*(v) = 0$.

Έτσι λαμβάνουμε τους συντελεστές $\beta_i(v) = b_i(v) - b_i^*(v)$, $i = 0(1)4$ και από τις σχέσεις (7.18) και (7.21) είναι :

$$\beta_0(v) = -\frac{11999}{3024} + \frac{35}{32} b_3 - \frac{45}{32} b_1 + \frac{3}{2} b_1^* - \frac{5}{2} b_3^*,$$

$$\beta_1(v) = b_1(v) - b_1^*(v) = b_1 - b_1^*$$

$$\beta_2(v) = -\frac{9187}{2016} - \frac{5}{16} b_1 - \frac{21}{16} b_3 + \frac{1}{4} b_1^* + \frac{9}{4} b_3^*, \quad (7.26)$$

$$\beta_3(v) = b_3(v) - b_3^*(v) = b_3 - b_3^*$$

$$\beta_4(v) = b_4(v) = b_4 = -\frac{15}{64} b_3 + \frac{1}{64} b_1$$

Ικανοποιώντας τώρα τους τύπους (7.24), (7.18) και (7.26) κατασκευάσαμε την νέα 8 βημάτων συμμετρική ενσωματωμένη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης (EPCM):

$$\left. \begin{aligned}
 q_4^* &= -q_{-4} + 2(q_3 + q_{-3}) - 2(q_2 + q_{-2}) + (q_1 + q_{-1}) \\
 &+ h^2 \left(b_3^*(v)(f_3 + f_{-3}) + \left(\frac{125}{48} - \frac{9}{4} b_3^*(v) - \frac{1}{4} b_1^*(v) \right) (f_2 + f_{-2}) \right. \\
 &\left. + b_1^*(v)(f_1 + f_{-1}) + \left(-\frac{3}{2} b_1^*(v) - \frac{5}{24} + \frac{5}{2} b_3^*(v) \right) f_0 \right) \\
 q_4 &= q_4^* + h^2 \left(\left(-\frac{15}{64} b_3 + \frac{1}{64} b_1 \right) (f_4^* + f_{-4}) \right. \\
 &+ (b_3 - b_3^*)(f_3 + f_{-3}) \\
 &+ \left(-\frac{9187}{2016} - \frac{5}{16} b_1 - \frac{21}{16} b_3 + \frac{1}{4} b_1^* + \frac{9}{4} b_3^* \right) (f_2 + f_{-2}) \\
 &+ (b_1 - b_1^*)(f_1 + f_{-1}) \\
 &\left. + \left(-\frac{11999}{3024} + \frac{35}{32} b_3 - \frac{45}{32} b_1 + \frac{3}{2} b_1^* - \frac{5}{2} b_3^* \right) f_0 \right)
 \end{aligned} \right\} \quad (7.27)$$

όπου είναι $q_i = q(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, q(x + ih))$, $f_4^* = f(x + 4h, q_4^*)$, και

$$b_1^*(v) = \frac{A}{B}, b_3^*(v) = \frac{C}{D}, b_1(v) = -\frac{E}{F}, b_3(v) = -\frac{G}{H} \quad (7.28)$$

με αναλυτικά να είναι :

$$\begin{aligned}
 A &= 768 \cos(v)^6 v - 500 \cos(v)^4 v^3 - 1536 \cos(v)^5 \sin(v) \\
 &- 192 \cos(v)^5 v - 1000 \cos(v)^3 v^3 + 192 \cos(v)^4 \sin(v) \\
 &- 2400 \cos(v)^4 v - 595 \cos(v)^2 v^3 + 2112 \cos(v)^3 \sin(v) \\
 &+ 100 \cos(v) v^3 - 288 \cos(v)^2 \sin(v) + 1980 \cos(v)^2 v \\
 &+ 195 v^3 - 648 \cos(v) \sin(v) + 192 \cos(v) v + 168 \sin(v) - 348 v \\
 B &= -48 v^3 (\cos(v)^4 - 2 \cos(v)^3 + 2 \cos(v) - 1) \\
 C &= 192 \cos(v)^5 v - 192 \cos(v)^4 \sin(v) - 288 \cos(v)^4 v \\
 &- 125 \cos(v)^2 v^3 + 192 \cos(v)^3 \sin(v) - 192 \cos(v) v^3 \\
 &+ 96 \cos(v)^2 \sin(v) + 324 \cos(v)^2 v + 65 v^3 \\
 &- 120 \cos(v) \sin(v) + 24 \sin(v) - 36 v
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D &= -48 v^3 (\cos(v)^4 - 2 \cos(v)^3 + 2 \cos(v) - 1) \\
E &= (88355 \cos(v)^5 v^3 + 146955 \cos(v)^4 v^3 + 241920 \cos(v)^5 \sin(v) \\
&+ 137088 \cos(v)^5 v + 209722 \cos(v)^3 v^3 - 32256 \cos(v)^4 \sin(v) \\
&+ 193536 \cos(v)^4 v + 58858 \cos(v)^2 v^3 - 330624 \cos(v)^3 \sin(v) \\
&- 144144 \cos(v)^3 v - 86397 \cos(v) v^3 + 46368 \cos(v)^2 \sin(v) \\
&- 234864 \cos(v)^2 v + 5867 v^3 + 100800 \cos(v) \sin(v) \\
&+ 7056 \cos(v) v - 26208 \sin(v) + 41328 v) \\
F &= (\cos(v)^5 - 3 \cos(v)^4 + 2 \cos(v)^3 + 2 \cos(v)^2 - 3 \cos(v) + 1) \\
&(-4032 v^3) \\
G &= (17671 \cos(v)^5 v^3 + 29391 \cos(v)^4 v^3 + 48384 \cos(v)^5 \sin(v) \\
&- 24192 \cos(v)^5 v + 129842 \cos(v)^3 v^3 + 96768 \cos(v)^4 \sin(v) \\
&+ 193536 \cos(v)^4 v + 58274 \cos(v)^2 v^3 - 169344 \cos(v)^3 \sin(v) \\
&- 3024 \cos(v)^3 v - 56793 \cos(v) v^3 - 42336 \cos(v)^2 \sin(v) \\
&- 214704 \cos(v)^2 v + 3055 v^3 + 84672 \cos(v) \sin(v) + 27216 \cos(v) v \\
&- 18144 \sin(v) + 21168 v) \\
H &= (\cos(v)^5 - 3 \cos(v)^4 + 2 \cos(v)^3 + 2 \cos(v)^2 - 3 \cos(v) + 1) \\
&(-12096 v^3)
\end{aligned}$$

Για μικρές τιμές του v οι παραπάνω τύποι επιδέχονται αρκετές απαλοιοφές, και σε αυτή τη περίπτωση το ανάπτυγμα της σειράς Taylor για τους συντελεστές b_1^*, b_3^*, b_1, b_3 αντίστοιχα είναι:

$$\begin{aligned}
b_1^* &= \frac{20483}{4032} - \frac{45767}{24192} v^2 + \frac{10476617}{31933440} v^4 - \frac{45578707}{1585059840} v^6 + \frac{1514526707}{1046139494400} v^8 \\
&- \frac{5016343559}{106706228428800} v^{10} + \frac{19742264573}{17466988776652800} v^{12} - \frac{255770741509}{14986676370368102400} v^{14} \\
&+ \frac{500020227347}{1128088003151344435200} v^{16} + \frac{64892605249859}{4343138812132676075520000} v^{18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_3^* &= \frac{17671}{12096} - \frac{45767}{362880} v^2 + \frac{96865}{19160064} v^4 - \frac{21971953}{261534873600} v^6 + \frac{82561}{448345497600} v^8 \\
&\quad - \frac{17608099}{123122571264000} v^{10} - \frac{1184824691}{75690284698828800} v^{12} - \frac{1864866399161}{1124000727776707680000} v^{14} \\
&\quad - \frac{1667858950789}{9796553711577464832000} v^{16} - \frac{59358495346543}{3428793799052112691200000} v^{18} \\
b_1 &= \frac{280997}{181440} - \frac{58061}{285120} v^2 + \frac{9763021}{566092800} v^4 - \frac{10173341}{49037788800} v^6 - \frac{206689751}{38109367296000} v^8 \\
&\quad - \frac{3504837829}{15205637551104000} v^{10} + \frac{726781085}{128457226031726592} v^{12} + \frac{1422084674027}{923286312103034880000} v^{14} \\
&\quad + \frac{306589643822831}{1728391976256881295360000} v^{16} + \frac{4568432670179219}{254073620509761550417920000} v^{18} \\
&\quad + \frac{13718357171397169}{7655205189385023337267200000} v^{20} + \frac{27062984023636776889}{150752041993261918324968652800000} v^{22} \\
&\quad + \frac{58901906167603147250543}{3256244107054457435819322900480000000} v^{24}
\end{aligned}$$

και :

$$\begin{aligned}
b_3 &= \frac{173531}{181440} - \frac{58061}{1995840} v^2 + \frac{16818071}{43589145600} v^4 - \frac{155117}{3064861800} v^6 - \frac{673284671}{266765571072000} v^8 \\
&\quad - \frac{4040637329}{21287892571545600} v^{10} - \frac{53420333269}{3211430650793164800} v^{12} - \frac{43018307527}{26166008845025280000} v^{14} \\
&\quad - \frac{14215306701522463}{84691206836587183472640000} v^{16} - \frac{1147708651952909}{66861479081516197478400000} v^{18} \\
&\quad - \frac{1030785767178717181}{589450799582646796969574400000} v^{20} - \frac{187445932736169063041}{1055264293952833428274780569600000} v^{22} \\
&\quad - \frac{58664248899123947704591}{3256244107054457435819322900480000000} v^{24}
\end{aligned}$$

όπου $v = \omega h$, ω είναι η συχνότητα και h είναι το μέγεθος του βήματος.

Ανάλυση νέας μεθόδου

Εφαρμόζοντας την μέθοδο (7.27) στην εξίσωση δοκιμής (5.15) , μας οδηγεί στην εξίσωση διαφορών (6.24) για $m = 8$. Η χαρακτηριστική εξίσωση τώρα που συνδέεται με την εξίσωση διαφορών (6.24) είναι η εξίσωση (6.25).

Απαιτώντας την εξαφάνιση του phase-lag της μεθόδου και χρησιμοποιώντας τον τύπο (για $m = 8$) των Simos και Williams (6.27) πήραμε το ανάπτυγμα του phase-lag της μεθόδου :

$$\begin{aligned}
 PL = & [8 * \cos(v)^3 * v^2 * b[3] - \cos(v)^2 * v^2 * b[1] - 9 * \cos(v)^2 * v^2 * b[3] \\
 & + 16 * \cos(v)^4 + (125/12) * \cos(v)^2 * v^2 + 2 * \cos(v) * v^2 * b[1] \\
 & - 6 * \cos(v) * v^2 * b[3] - 16 * \cos(v)^3 - v^2 * b[1] + 7 * v^2 * b[3] - 8 * \cos(v)^2 \\
 & - (65/12) * v^2 + 10 * \cos(v) - 2] / (10 + 18 * v^2 * b[3] + 8 * v^2 * (125/48 \\
 & - (9/4) * b[3] - (1/4) * b[1]) + 2 * v^2 * b[1]) \\
 & * [1 / (10 + 18 * v^2 * b[3] + 8 * v^2 * (125/48 - (9/4) * b[3] - (1/4) * b[1])) + \\
 & + 2 * v^2 * b[1]]
 \end{aligned}$$

Ύστερα από την απαίτησή μας να έχουμε εξαφανίσει την πρώτη παράγωγο της φάσης υστέρησης (phase-lag) , αυτό μας οδήγησε στο ανάπτυγμα της πρώτης παραγώγου του phase-lag :

$$\begin{aligned}
 DPL = & [1728 * \cos(v)^2 * v^2 * b[3] * \sin(v) - 144 * \cos(v) * v^2 * b[1] * \sin(v) \\
 & - 1296 * \cos(v) * v^2 * b[3] * \sin(v) - 1152 * \cos(v)^3 * v * b[3] \\
 & + 144 * \cos(v)^2 * v * b[1] + 3600 * \cos(v)^2 * \sin(v) * v^4 * b[3] \\
 & - 300 * \cos(v) * \sin(v) * v^4 * b[1] - 2700 * \cos(v) * \sin(v) * v^4 * b[3] + 180 * v \\
 & + 1296 * \cos(v)^2 * v * b[3] - 288 * \cos(v) * v * b[1] + 864 * \cos(v) * v * b[3] \\
 & - 900 * \cos(v) * v^2 * \sin(v) + 3125 * \cos(v) * \sin(v) * v^4 \\
 & + 144 * \sin(v) * v^2 * b[1] + 9600 * \cos(v)^3 * \sin(v) * v^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -432 * \sin(v) * v^2 * b[3] + 300 * \sin(v) * v^4 * b[1] - 900 * \sin(v) * v^4 * b[3] \\
& -7200 * \cos(v)^2 * \sin(v) * v^2 + 720 * \sin(v) - 4800 * \cos(v)^3 * v \\
& -3900 * \cos(v)^2 * v + 3000 * \cos(v) * v - 3456 * \cos(v)^2 * \sin(v) \\
& -1152 * \cos(v) * \sin(v) + 1500 * \sin(v) * v^2 + 4608 * \cos(v)^3 * \sin(v) \\
& +144 * v * b[1] - 1008 * v * b[3] + 4800 * \cos(v)^4 * v \\
& * [-1/[5 * (25 * v^2 + 12)^2]]
\end{aligned}$$

Λύνοντας τώρα το σύστημα των παραπάνω δύο αναπτυγμάτων του **phase-lag** κατασκευάσαμε τους συντελεστές της νέας μεθόδου (7.28).

Επίσης εκφράσαμε τους όρους $y_{\pm i}$, $i = 1(1)4$ και $f_{\pm j}$, $j = 0(1)4$ με το ανάπτυγμα της σειράς Taylor και τους αντικαταστήσαμε στον τύπο (7.18), για να προσδιορίσουμε την τάξη ώστε να υπολογίσουμε το τοπικό σφάλμα αποκοπής [Local Truncation Error(LTE)].

Με βάση την παραπάνω μεθοδολογία, πήραμε για το LTE το παρακάτω ανάπτυγμα :

$$L.T.E. = \frac{12506213339}{5794003353600} y_n^{(12)} h^{12} + O(h^{14}) \quad (7.29)$$

Έτσι η νέα μέθοδος (7.27) είναι μια **phase-fitted** 8-βημάτων συμμετρική ενσωματωμένη μέθοδος πρόβλεψης- διόρθωσης, 10ης αλγεβρικής τάξης και έχει διάστημα περιοδικότητας $(0, v_0^2)$ όπου $v_0^2 = 3.079$.

Παρατηρώντας κανείς τη φάση υστέρησης της μεθόδου, η νέα μέθοδος (7.27) έχει άπειρη τάξη φάση υστέρησης. Για τον προσδιορισμό των πρώτων 7 προσεγγιστικών βημάτων, χρησιμοποιήσαμε την μέθοδο Rung-Kutta Fehlberg για την κατασκευή της νέας μας μεθόδου (7.27).

Τέλος παρουσιάζουμε την διαδικασία εύρεσης του διαστήματος περιοδικότητας της νέας μεθόδου (7.27). Η εξίσωση δοκιμής στην οποία βασίζουμε την ανάλυση της σταθερότητας και το διάστημα περιοδικότητας είναι της μορφής :

$$q'' = -\gamma^2 q, \gamma \neq \omega. \quad (7.30)$$

Εφαρμόζοντας την νέα EPCM (7.24) στην εξίσωση (7.30) , λαμβάνουμε την ακόλουθη εξίσωση διαφορών :

$$\begin{aligned} & \Phi_4(s, \nu)(q_{n+4} + q_{n-4}) + \Phi_3(s, \nu)(q_{n+3} + q_{n-3}) + \Phi_2(s, \nu)(q_{n+2} + q_{n-2}) \\ & + \Phi_1(s, \nu)(q_{n+1} + q_{n-1}) + \Phi_0(s, \nu)q_n = 0 \end{aligned} \quad (7.31)$$

με αντίστοιχη χαρακτηριστική εξίσωση :

$$\begin{aligned} & \Phi_4(s, \nu)(\lambda^8 + 1) + \Phi_3(s, \nu)(\lambda^7 + \lambda) + \Phi_2(s, \nu)(\lambda^6 + \lambda^2) \\ & + \Phi_1(s, \nu)(\lambda^5 + \lambda^3) + \Phi_0(s, \nu)\lambda^4 = 0 \end{aligned} \quad (7.32)$$

όπου είναι :

$$\begin{aligned} \Phi_4(s, \nu) &= 1, \Phi_3(s, \nu) = a_3^* + s^2(\beta_3 - \alpha_3^*\beta_4) - s^4 b_3^* \beta_4 \\ \Phi_2(s, \nu) &= a_2^* + s^2(\beta_2 - \alpha_2^*\beta_4) - s^4 b_2^* \beta_4 \\ \Phi_1(s, \nu) &= a_1^* + s^2(\beta_1 - \alpha_1^*\beta_4) - s^4 b_1^* \beta_4 \\ \Phi_0(s, \nu) &= s^2 \beta_0 - s^4 b_0^* = \beta_4 \end{aligned} \quad (7.33)$$

όπου είναι $s = \gamma h$ και $\nu = \omega h$.

Από το Πρόγραμμα 3.4.1 γνωρίζουμε πως μια μέθοδος (ρ, σ) έχει διάστημα περιοδικότητας $(0, H_0^2), H_0^2 > 0$, τότε για όλα τα $(0, H_0^2), H_0^2 > 0$, όλες οι ρίζες του πολυωνύμου $\pi(\xi; H^2)$ ανήκουν πάνω στον μοναδιαίο κύκλο. Έτσι έχουμε την εξής παρατήρηση :

Παρατήρηση : Μια μέθοδος EPCM (7.27) θα λέγεται ότι έχει μη κενή (non empty) περιοχή σταθερότητας, αν οι ρίζες της χαρακτηριστικής εξίσωσης

(7.32) ικανοποιούν την ακόλουθη ιδιότητα :

$$|\lambda_j| \leq 1, j = 1, (1), 6 \quad (7.34)$$

η οποία περιοχή σταθερότητας θα καλείται ως $(s-v)$ τομέας ή **domain** .

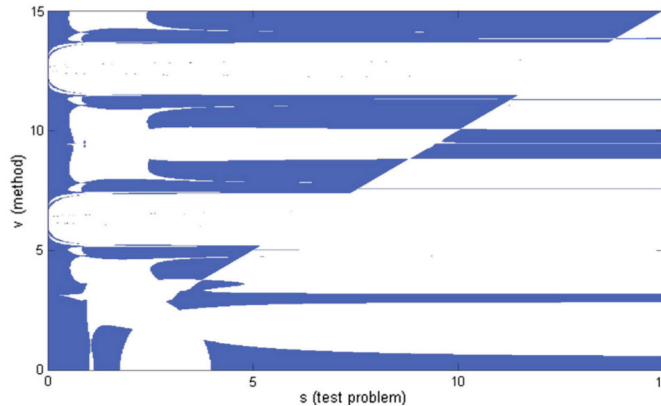
Η γραφική απεικόνιση και ο προσδιορισμός του $(s-v)$ τομέα στηρίχθηκε στον επόμενο αλγόριθμο :

- Προσδιορισμός βρόχου για το $s(1 \leq s \leq N)$ όπου το N καθορίζεται από τον χρήστη. Προσδιορισμός βρόχου για το $v(1 \leq v \leq K)$ όπου το K καθορίζεται επίσης από τον χρήστη.
- Επίλυση της χαρακτηριστικής εξίσωσης (7.32) για κάθε ζεύγος (s, v) που ορίζεται από τους παραπάνω βρόχους.
- Έλεγχος ικανοποίησης των συνθηκών (7.34) για την λύση της εξίσωσης (7.32) για κάθε σύνολο (s, v) από τους παραπάνω βρόχους.
- Αν το αντίστοιχο σημείο (s, v) ικανοποιεί την παραπάνω προϋπόθεση τότε το σημείο αυτό απεικονίζεται.

Στον παραπάνω πίνακα (7.3) εμφανίζονται οι δύο περιοχές του $(s-v)$ τομέα :

- Το χρωματισμένο τμήμα είναι ο τομέας όπου το αριθμητικό ζευγάρι είναι σταθερό ενώ
- Το λευκό τμήμα είναι ο τομέας όπου το αριθμητικό ζευγάρι δεν είναι σταθερό.

Μια σημαντική παρατήρηση σχετικά με τον παρακάτω πίνακα είναι πως για την αριθμητική επίλυση πραγματικών προβλημάτων με $\gamma \neq \omega$ το τμήμα το οποίο



Πίνακας 7.3: Περιοχή Σταθερότητας για την νέα EPCM με εξαφανισμένο το phase-lag και τις πρώτες του παραγώγους - $[(s - \nu)]$ τομέας της νέας μεθόδου EPCM .

θα χρησιμοποιηθεί είναι το χρωματισμένο εξαιρώντας την περιοχή γύρω από την διαγώνιο. Αντίθετα , για πραγματικά προβλήματα όπου $\gamma = \omega$ (όπως για παράδειγμα η εξίσωση Schrödinger και παρόμοια προβλήματα) το τμήμα το οποίο θα χρησιμοποιηθεί από τον πίνακα (7.3) είναι η περιοχή γύρω από την διαγώνιο.

Συγκεκριμένα για τα προβλήματα όπου $\gamma = \omega$, για να βρούμε το διάστημα περιοδικότητας ακολουθούμε τον εξής αλγόριθμο :

- Προσδιορίζουμε τα πολυώνυμα σταθερότητας $\Phi_j(s, \nu)$, $j = 0(1)4$ που δίνονται από τον τύπο (7.33) για κάθε συγκεκριμένο $\gamma = \omega \Leftrightarrow s = \nu$.
- Διερεύνηση και αξιολόγηση της περιοχής γύρω από την κύρια διαγώνιο του $(s - \nu)$ τομέα.

Ακολουθώντας τον παραπάνω αλγόριθμο βρήκαμε πως το διάστημα περιοδικότητας της νέας μας EPCM (7.24) μεθόδου είναι το $(0, \nu_0^2)$ όπου $\nu_0^2 = 3.225616$.

Προβλήματα

Μετρήσαμε την απόδοση της νέας συμμετρικής ενσωματωμένης 8 βημάτων μέθοδο πρόβλεψης - διόρθωσης EPCM (7.24) , συγκρίνοντάς την με οκτώ προβλήματα αρχικών τιμών με ταλαντωτική λύση.

Για τα οκτώ αυτά προβλήματα , για να υπολογίσουμε τη συχνότητά τους ω , χρησιμοποιήσαμε την ακόλουθη μέθοδο :

Για κάθε ένα από τα προβλήματα , προσπαθούμε να το φέρουμε στη μορφή $y'' = Ky + L$, όπου K, L είναι πίνακες και χρησιμοποιούμε την ίδια μέθοδο για να εκτιμήσουμε τη συχνότητα της εξίσωσης Schrödinger .

Όποτε χρησιμοποιήσαμε τη διαδικασία της ολοκλήρωσης τότε ως αρχικό σημείο ολοκλήρωσης χρησιμοποιήσαμε το $x \approx 0.1$.

Τα προβλήματα με τα οποία ασχοληθήκαμε ήταν :

- Μη ομοιογενής εξίσωση
- Το τροχιακό πρόβλημα των Stiefel-Bettis
- Το πρόβλημα των N-σωμάτων
- Το τροχιακό πρόβλημα των Franco , Palacios
- Ακτινικής εξίσωσης Schrödinger
- Εξίσωση Duffing
- Μη γραμμική εξίσωση
- Των δύο-διαστάσεων πρόβλημα Kepler

Σύγκριση νέας μεθόδου

Για να συγκρίνουμε τη νέα μέθοδο EPCM (7.24) , χρησιμοποιήθηκαν οι ακόλουθες μέθοδοι :

- Η 8 βημάτων συμμετρική μέθοδος των Quinlan-Tremaine [266] , 8ης αλγεβρικής τάξης : "*Q-T8step(QT8)*"
- Η 8 βημάτων προσαρμοσμένη συμμετρική ενσωματωμένη μέθοδο πρόβλεψης διόρθωσης των Panopoulos-Simos, [307] 10ης αλγεβρικής τάξης: "*EPCM8stepPF(PS)*"
- Η νέα 8 βημάτων συμμετρική ενσωματωμένη μέθοδος πρόβλεψης διόρθωσης (EPCM) [318], 10ης αλγεβρικής τάξης με εξαφανισμένο το *phase-lag* και τις πρώτες παραγώγους του : "*NewEPCM(EPCMSS)*"

Η ακρίβεια όλων των παραπάνω μεθόδων που θα δοκιμάσουμε εκφράζεται συναρτήσει του χρόνου CPU με μονάδα μέτρησης το δευτερόλεπτο.

Εκφράζουμε την ακρίβεια ως τα δεκαδικά ψηφία για τα οποία η προσεγγιστική λύση συμφωνεί με την ακριβή λύση και υπολογίζεται ως $(-\log_{10})$ του μέγιστου σφάλματος των συναρτήσεων του κάθε προβλήματος για όλα τα βήματα στο διάστημα ολοκλήρωσης.

Μη ομοιογενής εξίσωση

Μια δευτέρου βαθμού γραμμική μη ομοιογενής εξίσωση με σταθερούς συντελεστές είναι της μορφής :

$$a_2 \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + a_1 \frac{dx(t)}{dt} + a_0 x(t) = f(t) \quad (7.35)$$

με γενική λύση :

$$Ax_1(t) + Bx_2(t) + \textit{particular_integral} \quad (7.36)$$

όπου το παραπάνω συγκεκριμένο ολοκλήρωμα που αναφέρεται λαμβάνεται από ειδικές μεθόδους , λύνει την εξίσωση για $f(t) \neq 0$ χωρίς καμία πρόσθετη παράμετρο , ενώ τα A και B λαμβάνονται από τις αρχικές συνθήκες.

Εμείς δοκιμάσαμε συγκεκριμένα την μέθοδό μας στο ακόλουθο πρόβλημα :

$$q'' = -100q + 99 \sin(t), \quad q(0) = 1, \quad q'(0) = 11 \quad t \in [0, 1000\pi]. \quad (7.37)$$

με θεωρητική λύση $q(t) = \sin(t) + \sin(10t) + \cos(10t)$.

Η εκτιμώμενη συχνότητα που πήραμε ήταν : $w = 10$ ([301]).

Stiefel-Bettis πρόβλημα

Το πρόβλημα με το οποίο ασχολήθηκαν οι Stiefel and Bettis [10] , το "περίπου" περιοδικό τροχιακό πρόβλημα , μπορεί να γραφτεί στη μορφή :

$$q'' + q = 0.001 e^{it}, \quad q(0) = 1, \quad q'(0) = 0.9995i, \quad q \in \mathcal{C}, \quad (7.38)$$

ή συγκριτικά με το :

$$\begin{aligned} m'' + m &= 0.001 \cos(t), & m(0) &= 1, & m'(0) &= 0, \\ n'' + n &= 0.001 \sin(t), & n(0) &= 0, & n'(0) &= 0.9995. \end{aligned} \quad (7.39)$$

με θεωρητική λύση :

$$q(t) = m(t) + i n(t), \quad m, n \in \mathcal{R}$$

$$m(t) = \cos(t) + 0.0005 t \sin(t),$$

$$n(t) = \sin(t) - 0.0005 t \cos(t).$$

Το σύστημα των εξισώσεων (7.39) λύθηκε στο διάστημα $t \in [0, 1000\pi]$.

Η εκτιμώμενη συχνότητα που πήραμε ήταν: $w = 1$ (βλέπε [302] και [301]).

Το πρόβλημα των N -σωμάτων

Το πρόβλημα των n -σωμάτων είναι μια προσπάθεια να κατανοήσουμε τις τροχιές που ακολουθούν οι πλανήτες στο ηλιακό μας σύστημα, οι οποίες για παρατεταμένες χρονικές περιόδους, δεν ακολουθούν αυστηρά τους νόμους κίνησης του Kepler. Σήμερα οι αριθμητικές μέθοδοι είναι ο πιο αποτελεσματικός τρόπος για να μοντελοποιηθεί η κίνηση των πλανητών και άλλων αντικειμένων στο ηλιακό σύστημα.

Η επιτάχυνση μιας μάζας η οποία οφείλεται σε $(n-1)$ άλλα σώματα δίνεται από τον τύπο :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = -G \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{m_j}{r_{ji}^3} \mathbf{r}_{ji} \quad (7.40)$$

όπου \mathbf{r}_i είναι το διάνυσμα της θέσης ενός σώματος j , m είναι η μάζα του και G είναι η σταθερά της βαρύτητας.

Στο πρόβλημα των n -σωμάτων, μας ενδιαφέρει η πρόβλεψη της μελλοντικής κίνησης των n -σωμάτων λόγω αυτών των δυνάμεων. Δεν υπάρχει πλήρης και αναλυτική λύση στην εξίσωση αυτού του προβλήματος. Δεδομένων των αρχικών συνθηκών της θέσης και της ταχύτητας του κάθε σώματος, ο παραπάνω τύπος της επιτάχυνσης μπορεί να ενσωματωθεί σε ένα μικρό χρονικό βήμα για να επιτευχθεί η θέση και η ταχύτητα σε μια νέα χρονική στιγμή.

Το 2002 ,E.Hairer et al. [303] μελέτησαν το πρόβλημα των πέντε εξωτερικών πλανητών όπου οι μάζες τους σχετίζονται με τον ήλιο έτσι ώστε ο ήλιος να έχει μάζα ένα. Για τους υπολογισμούς , ο ήλιος μαζί με τους τέσσερις εσωτερικούς πλανήτες μελετήθηκαν ως ένα σώμα , οπότε και η μάζα θεωρείται μεγαλύτερη της μονάδας. Η βαρυτική σταθερά ισούται με $G = 2.95912208286 \cdot 10^{-4}$, ο χρόνος μετράται σε ημέρες της γης και οι αποστάσεις είναι σε αστρονομικές μονάδες.

Εξετάσαμε τον νέο μας αλγόριθμο στο διάστημα $t \in [0, 10^5]$ ώστε να μετρήσουμε την αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου. Χρησιμοποιήσαμε ως συχνότητα τη σταθερή τιμή 0.00145044732989 (βλέπε [304]) , η οποία μάλιστα είναι και η συχνότητα του ταχύτερου σώματος.

Franco , Palacios πρόβλημα

Το "περίπου" περιοδικό τροχιακό πρόβλημα των Franco , Palacios , μπορούμε να το προσαρμόσουμε στην επιθυμητή μορφή :

$$z'' + \omega^2 z = -\varepsilon z \quad (7.41)$$

όπου $\varepsilon = \lambda^2 - \omega^2$ το οποίο υποδεικνύει τον τύπο προσέγγισης για τον οποίο εκτιμάται η κύρια συχνότητα λ από την παράμετρο ω .

Το "σχεδόν" περιοδικό λοιπόν τροχιακό πρόβλημα [269] γράφεται ως :

$$z'' + z = \varepsilon e^{i\varphi t}, \quad z(0) = 1, \quad z'(0) = i, \quad z \in \mathcal{C}, \quad (7.42)$$

ή ισοδύναμα ως :

$$\begin{aligned} m'' + m &= \varepsilon \cos(\varphi t), & m(0) &= 1, & m'(0) &= 0, \\ n'' + n &= \varepsilon \sin(\varphi t), & n(0) &= 0, & n'(0) &= 1, \end{aligned} \quad (7.43)$$

όπου $\varepsilon = 0.001$ και $\varphi = 0.01$.

Η θεωρητική λύση του προβλήματος (7.42) είναι :

$$\begin{aligned} z(t) &= m(t) + i n(t), \quad m, n \in \mathcal{R} \\ m(t) &= \frac{1-\varepsilon-\varphi^2}{1-\varphi^2} \cos(t) + \frac{\varepsilon}{1-\varphi^2} \cos(\varphi t) \\ n(t) &= \frac{1-\varepsilon\varphi-\varphi^2}{1-\varphi^2} \sin(t) + \frac{\varepsilon}{1-\varphi^2} \sin(\varphi t) \end{aligned}$$

Το σύστημα των εξισώσεων (7.43) λύθηκε στο διάστημα $t \in [0, 1000\pi]$.

Η εκτιμώμενη συχνότητα που πήραμε ήταν: $w = 1$ (βλέπε [302] και [301]).

Εξίσωση Schrödinger

Για την αριθμητική επίλυση της χρονικά ανεξάρτητης ακτινικής εξίσωσης Schrödinger, η νέα προτεινόμενη μέθοδος που αναπτύξαμε σε αυτή την εργασία είναι η πιο ακριβής μέθοδος ειδικά για μεγάλες τιμές του $|G| = |V_c - E|$.

Η χρονικά ανεξάρτητη ακτινική εξίσωση Schrödinger είναι της μορφής : $y'' = f(x)y(x)$. Με βάση την εργασία των Ixaru και Rizea [20], η εξίσωση μπορεί να γραφθεί στη μορφή $f(x) = g(x) + D$ όπου $g(x) = V(x) - V_c = d$ και V_c είναι η σταθερά προσέγγισης του δυναμικού και $D = v^2 = V_c - E$.

Υπολογίζουμε τις παραγώγους $y^{(i)}$, $i = 2, 3, 4, \dots$ που είναι όροι των τοπικών τύπων σφάλματος αποκοπής. Οι παράγωγοι αυτοί παρουσιάζονται ως πολυώνυμα του D . Τέλος, αντικαθιστούμε τις εκφράσεις των παραγώγων από το προηγούμενο βήμα, στους τύπους σφαλμάτων τοπικής αποκοπής.

Ακολουθήσαμε την παραπάνω διαδικασία και τους τύπους:

$$\begin{aligned} y_n^{(2)} &= (g(x) + d)y(x) \\ y_n^{(3)} &= \left(\frac{d}{dx}g(x)\right)y(x) + (g(x) + d)\left(\frac{d}{dx}y(x)\right) \\ y_n^{(4)} &= \left(\frac{d^2}{dx^2}g(x)\right)y(x) + 2\left(\frac{d}{dx}g(x)\right)\left(\frac{d}{dx}y(x)\right) + (g(x) + d)\left(\frac{d^2}{dx^2}y(x)\right) \dots \end{aligned}$$

Σχετικά με την ενέργεια E θεωρήσαμε δύο περιπτώσεις :

- 1) Η ενέργεια E να είναι κοντά στο δυναμικό ώστε μόνο οι ελεύθεροι όροι των πολυωνύμων στο D να υπολογίζονται. Έτσι για αυτές τις τιμές του D , οι μέθοδοι είναι συγκρίσιμης ακρίβειας. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι οι ελεύθεροι όροι των πολυωνύμων στο D είναι οι ίδιοι με της κλασσικής μεθόδου όπως και της νέας μεθόδου που αναπτύχθηκε.
- 2) Να είναι $D \gg 0$ ή $D \ll$ δηλαδή να έχουμε $|D|$ έναν μεγάλο αριθμό.

Προκειμένου να εφαρμόσουμε στην ακτινική εξίσωση Schrödinger την νέα μέθοδο, απαιτείται η τιμή της παραμέτρου ν . Για κάθε πρόβλημα της ακτινικής εξίσωσης Schrödinger η παράμετρος ν δίνεται από τον τύπο :

$$\nu = \sqrt{|V(x) - E|}$$

όπου $V(x)$ είναι το δυναμικό και E είναι η ενέργεια.

Χρησιμοποιήσαμε το δυναμικό Wood – Saxon ως :

$$V(x) = \frac{m_0}{1+q} + \frac{m_1 q}{(1+q)^2}$$

με $q = \exp\left(\frac{x-x_0}{a}\right)$, $m_0 = -50$, $a = 0.6$, $x_0 = 7$ και $m_1 = -\frac{k_0}{a}$

Γνωρίζουμε πως η παράμετρος ν δεν δίνεται ως συνάρτηση του x αλλά βασίζεται σε ορισμένα κρίσιμα σημεία που έχουν καθοριστεί για το καθένα δυναμικό. Έτσι για το δυναμικό Wood-Saxon που χρησιμοποιήθηκε, για την απόκτηση αριθμητικών αποτελεσμάτων επιλέγουμε το ν ως :

$$v = \begin{cases} \sqrt{-50 + E} & \text{for } x \in [0, 6.5 - 2h] \\ \sqrt{-37.5 + E} & \text{for } x = 6.5 - 2h \\ \sqrt{-25 + E} & \text{for } x = 6.5 \\ \sqrt{-12.5 + E} & \text{for } x = 6.5 + h \\ \sqrt{E} & \text{for } x \in [6.5 + 2h, 15] \end{cases}$$

Η ακτινική εξίσωση Schrödinger δίνεται από τον τύπο :

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_{eff}(r)] R_{nl}(r) = 0 \quad (7.44)$$

όπου m είναι η μάζα και $V_{eff}(r)$ είναι το "αποτελεσματικό" δυναμικό το οποίο είναι το άθροισμα των φυγόκεντρων $V_{centrifugal}(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ το οποία μπορούν να έρθουν στην μορφή :

$$z''(x) = (W(x) - E) z(x) \quad (7.45)$$

όπου $W(x) = \frac{l(l+1)}{x^2} + V(x)$ είναι το "αποτελεσματικό" δυναμικό. Είναι βολικά να έχουμε $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = 0$ οπότε $\lim_{x \rightarrow \infty} W(x) = 0$.

Θεωρώντας ως $E > 0$ και διαιρώντας το διάστημα $[0, \infty)$ σε υποδιαστήματα της μορφής $[a_i, b_i]$ έτσι ώστε ο όρος $W(x)$ να είναι σταθερός \bar{W}_i λαμβάνουμε την προσέγγιση του προβλήματος (7.45) :

$$z_i'' = (\bar{W} - E) z_i \quad (7.46)$$

με λύση :

$$z_i(x) = C_i \exp(\sqrt{\bar{W} - E} x) + D_i \exp(-\sqrt{\bar{W} - E} x), \quad (7.47)$$

$C_i, D_i \in \mathbb{R}$.

Για $l = 0$ στο διάστημα $[0, 15]$ ολοκληρώνουμε το πρόβλημα (7.45) χρησιμοποιώντας το Woods-Saxon δυναμικό :

$$V(x) = \frac{m_0}{1+q} + \frac{m_1 q}{(1+q)^2}, \quad q = \exp\left(\frac{x-x_0}{a}\right), \quad (7.48)$$

$$m_0 = -50, \quad a = 0.6, \quad x_0 = 7, \quad m_1 = -\frac{m_0}{a}$$

Το δυναμικό Woods-Saxon είναι ένα από τα σημαντικότερα δυναμικά μικρής εμβέλειας στη φυσική. Είναι ένα δυναμικό το οποίο χρησιμοποιείται για να περιγράψει τις δυνάμεις που εφαρμόζονται στα νουκλεόνια (πρωτόνια και νετρόνια) μέσα στον ατομικό πυρήνα. Επιπλέον, το δυναμικό αυτό εφαρμόστηκε σε πολλά προβλήματα, σε πυρηνικά και σωματίδια της φυσικής, της ατομικής φυσικής, της συμπυκνωμένης ύλης και της χημικής φυσικής.

Για ορισμένα δυναμικά, όπως το Woods-Saxon δυναμικό, ο καθορισμός της παραμέτρου $w = \sqrt{|V(x) - E|}$ δεν γίνεται μέσω μιας συνάρτησης ως προς x , αλλά βάση ορισμένων κρίσιμων σημείων που έχουν οριστεί από την έρευνα του κατάλληλου δυναμικού.

Με την οριακή συνθήκη $z(0) = 0$, το δυναμικό $V(x)$ "εξαφανίζεται" πιο γρήγορα από το $\frac{l(l+1)}{x^2}$, ώστε η εξίσωση Schrödinger (7.45) για μεγάλες τιμές του x γίνεται:

$$z''(x) = \left(\frac{l(l+1)}{x^2} - E \right) z(x) \quad (7.49)$$

Η παραπάνω εξίσωση έχει δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις, οι οποίες είναι οι $p_x b_l(p, x)$ και $p_x n_l(p, x)$, όπου b_l και n_l είναι οι εξισώσεις *spherical Bessel* και *Neumann*.

Εάν $x \rightarrow \infty$ παίρνουμε τον ασυμπτωτικό τύπο της λύσης :

$$\begin{aligned} z(x) &\approx A p x b_l(p x) - B p x n_l(p x) \\ &\approx D[\sin(p x - \pi l/2) + \tan(s_l) \cos(p x - \pi l/2)], \end{aligned} \quad (7.50)$$

όπου

$$\tan(s_l) = \frac{z(x_i) S(x_{i+1}) - z(x_{i+1}) S(x_i)}{z(x_{i+1}) C(x_i) - z(x_i) C(x_{i+1})}, \quad (7.51)$$

και s_l καλείται *scattering phase shift*. με $S(x) = k x b_l(k x)$, $C(x) = k x n_l(k x)$ και $x_i < x_{i+1}$.

Η ακρίβεια για το παραπάνω πρόβλημα είναι $\pi/2$ έχοντας ως τιμές για την ενέργεια $E = 341.495874$ και $E = 989.701916$.

Εξίσωση Duffing

Το ακόλουθο σύστημα, το οποίο πήρε το όνομά του από τον **George Duffing**, χρησιμοποιείται για να μοντελοποιήσει την "απόσβεση" ενός ταλαντωτή. Το σύστημα **George Duffing** περιγράφεται από την μη γραμμική διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης :

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \delta \frac{dx}{dt} + \beta x + \alpha x^3 = \gamma \cos(\omega t) \quad (7.52)$$

Για το συγκεκριμένο πρόβλημα χρησιμοποιήσαμε ως :

$$z'' = -z - z^3 + 0.002 \cos(1.01 t), \quad z(0) = 0.200426728067, \quad z'(0) = 0, \quad (7.53)$$

στο διάστημα $t \in [0, 1000\pi]$. Η θεωρητική λύση της παραπάνω εξίσωσης είναι :
 $z(t) = 0.200179477536 \cos(1.01 t) + 2.46946143 \cdot 10^{-4} \cos(3.03 t) + 3.04014 \cdot 10^{-7} \cos(5.05 t) + 3.74 \cdot 10^{-10} \cos(7.07 t) + \dots$

Η εκτιμώμενη συχνότητα που πήραμε ήταν: $\omega = 1$ (βλέπε [301]).

Μη γραμμική εξίσωση

Για το συγκεκριμένο πρόβλημα έχουμε τη μορφή του ως :

$$z'' = -100z + \sin(z), \quad z(0) = 0, \quad z'(0) = 1 \quad t \in [0, 20\pi]. \quad (7.54)$$

Χρησιμοποιήσαμε $z(20\pi) = 3.92823991 \cdot 10^{-4}$ καθώς δεν γνωρίζαμε την θεωρητική του λύση.

Η εκτιμώμενη συχνότητα που πήραμε ήταν: $\omega = 10$ (βλέπε [305]).

Πρόβλημα Kepler

Το πρόβλημα των δύο σωμάτων ουσιαστικά ασχολείται με τον προσδιορισμό των διαδρομών δύο αλληλεπιδρούντων λόγω βαρύτητας σωμάτων, με γνωστές μάζες και γνωστές τις αρχικές τους ταχύτητες. Τα σώματα κινούνται σε τρεις διαστάσεις και δεν επηρεάζονται από άλλες δυνάμεις παρά από την μεταξύ τους βαρυτική δύναμη. Έχουμε μελετήσει αυτό το πρόβλημα ως εξής :

$$z'' = -\frac{z}{(z^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad y'' = -\frac{y}{(z^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (7.55)$$

με $z(0) = 1 - f$, $z'(0) = 0$, $y(0) = 0$, $y'(0) = \sqrt{\frac{1+f}{1-f}}$, $t \in [0, 1000\pi]$, όπου f είναι η εκκεντρότητα. Η θεωρητική λύση του προβλήματος αυτού είναι : $z(t) = \cos(mt) - f$, $y(t) = \sqrt{1-f^2} \sin(mt)$ όπου m η λύση της εξίσωσης $m - f \sin(m) - t = 0$. Για συχνότητα στο παραπάνω πρόβλημα χρησιμοποιήσαμε ως εκτίμηση : $\omega = \frac{1}{(z^2 + y^2)^{\frac{3}{4}}}$. (βλέπε [302] και [301])

Σύγκριση μεθόδου

Στον Πίνακα (7.4) που ακολουθεί, βλέπουμε τη σύγκριση μεταξύ των μεθόδων (7.7). Είναι εύκολο να αντιληφθεί κανείς πως μεταξύ των παραπάνω μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν, η νέα μέθοδος EPCM (7.24) είναι στη πραγματικότητα η πιο αποδοτική. Η ακρίβεια όλων των παραπάνω μεθόδων που δοκιμάστηκαν εκφράζεται συναρτήσει του χρόνου CPU με μονάδα μέτρησης το δευτερόλεπτο.

Συγκεκριμένα στο τροχιακό πρόβλημα των Franco, Palacios, παρατηρούμε πως η ακρίβεια των ψηφίων είναι μεγαλύτερη με τη νέα μέθοδο (7.24). Το μήκος του βήματος ολοκλήρωσης της νέας μεθόδου (7.24) στο πρόβλημα των Stiefel-Bettis είναι εξαπλάσιο σε σχέση με το αντίστοιχο μήκος βήματος της πολυβηματικής γραμμικής μεθόδου των Quinlan - Tremaine. Ο χρόνος στο πρόβλημα των N-σωμάτων είναι ακόμη πιο βελτιωμένος συγκριτικά με την μέθοδο EPCM 8-step PF (PS). Στο πρόβλημα της Μη Ομοιογενής Εξίσωσης παρατηρούμε πως η νέα μας μέθοδος έχει το μικρότερο από τα μέγιστα σφάλματα σε σχέση με τις άλλες δύο μεθόδους.

Το μήκος του βήματος ολοκλήρωσης της νέας μεθόδου (7.24) στην εξίσωση Schrödinger είναι τετραπλάσιο σε σχέση με το αντίστοιχο μήκος βήματος της πολυβηματικής γραμμικής μεθόδου των Quinlan - Tremaine. Στο πρόβλημα της εξίσωσης Duffing η ακρίβεια των ψηφίων είναι μεγαλύτερη με τη νέα μέθοδο (7.24). Από τα μέγιστα σφάλματα και των τριών μεθόδων όπου έγινε η σύγκριση, στο πρόβλημα της Μη Γραμμικής Εξίσωσης η νέα μέθοδος έχει αρκετά μικρότερο σφάλμα. Τέλος ο χρόνος στο πρόβλημα των δύο διαστάσεων Kepler της νέας μεθόδου (7.24) είναι σχεδόν ο μισός σε σχέση με την μέθοδο Q-T 8step.

Test Problem	Method	Accuracy (digits)	CPU Time	Step Length	Maximum Error
Franco - Palacios	Q-T 8step (QT8)	11,20368044	29,8741915	0,0271875	6,25633E-12
	EPCM 8-step PF (PS)	12,4236061	0,5460035	1,74	3,77046E-13
	New EPCM (EPCM SS)	13,0588258	0,5134543	1,92	8,73322E-14
Inhomogeneous Equation	Q-T 8step	8,958918298	213,5029686	0,00375	1,09921E-09
	EPCM 8-step PF (PS)	10,88102537	16,0369028	0,06	1,31515E-11
	New EPCM (EPCM SS)	11,47720663	11,5166478	0,09	3,33268E-12
Stiefel - Bettis	Q-T 8step	8,372245878	14,0244899	0,06	4,24379E-09
	EPCM 8-step PF (PS)	9,320657776	4,1652267	0,24	4,77906E-10
	New EPCM (EPCM SS)	10,27854075	3,3854661	0,36	5,26574E-11
N-body Problem tend = 10^5 earth days	Q-T 8step	9,045867188	2,028013	20	8,99773E-10
	EPCM 8-step PF (PS)	9,509140322	1,3104084	40	3,09642E-10
	New EPCM (EPCM SS)	10,31976303	1,0763452	50	4,78891E-11
Nonlinear Equation	Q-T 8step	6,850936957	1,1388073	0,015625	1,40949E-07
	EPCM 8-step PF (PS)	8,885097388	0,8112052	0,03125	1,30287E-09
	New EPCM (EPCM SS)	10,46624507	0,7234561	0,0625	3,41787E-11
Two-dimensional Kepler Problem e=0.0549	Q-T 8step	8,59401371	60,3879871	0,016	2,54675E-09
	EPCM 8-step PF (PS)	9,692522039	35,6306284	0,032	2,02992E-10
	New EPCM (EPCM SS)	10,34363614	32,5549112	0,064	4,53277E-11
Duffing's Equation	Q-T 8step	10,61523673	14,1492907	0,06	2,42529E-11
	EPCM 8-step PF (PS)	10,46736237	9,0168578	0,12	3,40908E-11
	New EPCM (EPCM SS)	10,62311092	8,1126758	0,24	2,38171E-11
Schrödinger's Equation E=989.701916	Q-T 8step	8,427376708	1,7004109	0,0025	3,73786E-09
	EPCM 8-step PF (PS)	8,585144206	1,248008	0,005	2,5993E-09
	New EPCM (EPCM SS)	8,780627696	1,1921337	0,01	1,65719E-09

Πίνακας 7.4: Σύγκριση CPU Time , Step Length , Maximum Error για όλες τις μεθόδους (7.7)

Επισημαίνουμε λοιπόν πως η νέα μέθοδος έχει μεγαλύτερη ακρίβεια ψηφίων, ο χρόνος του CPU είναι μικρότερος συγκριτικά με τις άλλες δύο μεθόδους, το βήμα είναι μεγαλύτερο από τα βήματα που χρησιμοποιούν οι άλλες μέθοδοι (τουλάχιστον διπλάσιο βήμα από τη μέθοδο (PS) και αρκετά μεγαλύτερο από τη μέθοδο (QT8)) και επίσης σε όλα τα προβλήματα το μέγιστο σφάλμα ήταν το μικρότερο σε σχέση με τις άλλες δύο μεθόδους.

Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάσαμε την ανάπτυξη και την ανάλυση της νέας μεθόδου EPCM (7.24), δηλαδή ένα ζεύγος πεπερασμένων διαφορών πρόβλεψης και διόρθωσης για την αριθμητική ολοκλήρωση προβλημάτων αρχικών τιμών δεύτερης τάξης, με περιοδικές ή ταλαντωτικές λύσεις. Κύριο χαρακτηριστικό της νέας αυτής μεθόδου είναι ότι η μέθοδος πρόβλεψης περιλαμβάνεται πλήρως στη μέθοδο διόρθωσης και για το λόγο αυτό το νέο αυτό ζευγάρι μεθόδων καλείται ενσωματωμένο (**embedded**).

Εφαρμόζοντας τη νέα ενσωματωμένη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης στα προβλήματα που μελετήθηκαν στην προηγούμενη παράγραφο είναι εύκολο να παρατηρήσει κανείς τη μείωση του υπολογιστικού κόστους αλλά και την αύξηση του πλήθους στην ακρίβεια των ψηφίων. Η νέα αυτή μέθοδος έχει εφαρμογή σε πολλούς τομείς όπως είναι η αριθμητική επίλυση όλων των προβλημάτων με περιοδικές ή ταλαντωτικές λύσεις, τα τροχιακά προβλήματα, η εξίσωση **Schrödinger** αλλά και συναφή προβλήματα αρχικών τιμών, για τα οποία βέβαια η συχνότητα είναι γνωστή εκ των προτέρων ή είναι δυνατό να εκτιμηθεί.

Οι ιδιότητες της νέας μεθόδου είναι πως :

- είναι μια συμμετρική μέθοδος
- είναι οκτώ βημάτων
- είναι δέκατης αλγεβρική τάξης
- έχει εξαφανισθεί το **phase-lag** (ή ισοδύναμα έχει απεριόριστη τάξη **phase-lag** ή ισοδύναμα είναι **phase-fitted**)
- έχουν εξαφανισθεί οι πρώτες παράγωγοι του **phase-lag**
- έχει ως διάστημα περιοδικότητας το $(0,3.225616)$.

Τα αποτελέσματα των αριθμητικών πειραμάτων που εφαρμόσαμε , μας οδηγούν στο συμπέρασμα πως η νέα οκτώ βημάτων συμμετρική ενσωματωμένη μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης EPCM (7.24) είναι πολύ πιο αποτελεσματική συγκριτικά με άλλες γνωστές και πρόσφατα αναπτυχθείσες μεθόδους της βιβλιογραφίας.

Κατασκευή EPC2M μέθοδου

Στο κεφάλαιο αυτό θα κατασκευάσουμε επίσης ένα δεύτερο ζευγάρι νέων τύπων, γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων πρόβλεψης και διόρθωσης για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών της μορφής (3.1). Η κατασκευή των μεθόδων αυτών γίνεται ώστε να επιλύεται αριθμητικά τόσο η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger με χρήση του δυναμικού Wood-Saxon αλλά και οποιοδήποτε πρόβλημα με ταλαντωτικές ή περιοδικές λύσεις.

Αρχικά δίνεται όλη η μεθοδολογία και το θεωρητικό υπόβαθρο που χρησιμοποιήσαμε για την κατασκευή αυτών των νέων τύπων πρόβλεψης – διόρθωσης. Έπειτα αναφερόμαστε στον τρόπο κατασκευής μιας νέας άμεσης μεθόδου που θα λειτουργήσει ως μέθοδος πρόβλεψης. Έστερα αναπτύσσουμε τον τρόπο κατασκευής μια νέας έμμεσης μεθόδου που θα χρησιμοποιήσουμε ως μέθοδο διόρθωσης.

Ακόμη, στην επόμενη παράγραφο, γίνεται αναφορά στον τρόπο κατασκευής της νέας ενσωματωμένης πολυβηματικής μεθόδου πρόβλεψης και διόρθωσης που εφαρμόζουμε για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης **Schrödinger**. Ο υπολογισμός των συντελεστών της νέας αυτής μεθόδου έγινε με στόχο να έχουμε μεγαλύτερη αλγεβρική τάξη, να έχει εξαφανισθεί το **phase-lag** και να έχουμε εξαλείψει την πρώτη και τη δεύτερη παράγωγο του **phase-lag**.

Προκειμένου να αποδείξουμε την αποτελεσματικότητα της νέας μεθόδου, θα μελετήσουμε το σφάλμα της και θα την εφαρμόσουμε για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων όπως : 1) Ανομοιογενής εξίσωση, 2) Τροχιακό πρόβλημα των **Stiefel** και **Bettis** , 3) Το πρόβλημα των **N**-σωμάτων, 4) Τροχιακό πρόβλημα των **Franco** και **Palacios** , 5) Της ακτινικής εξίσωσης **Schrödinger** , 6) Της **Duffing** εξίσωσης, 7) Μη γραμμικής εξίσωσης και 8) Των δύο-διαστάσεων πρόβλημα **Kepler** .

Σκοπός μας είναι η βελτιστοποίηση της αποτελεσματικότητας μιας αριθμητικής μεθόδου για την καλύτερη προσέγγιση της λύσης προβλημάτων της μορφής (3.1). Αναπτύσσουμε τη μεθοδολογία εξαφάνισης της φάσης υστέρησης (**phase-lag**) και των παραγώγων αυτής παρουσιάζοντας τη βελτιστοποίηση της συμπεριφοράς της αριθμητικής μεθόδου. Η νέα αυτή μέθοδος συγκρίνεται με ήδη υπάρχουσες αριθμητικές μεθόδους και στη τελευταία παράγραφο δίνουμε τα συμπεράσματά μας σχετικά με την νέα αυτή μέθοδο.

Όπως αναφέραμε παραπάνω , ασχολούμαστε ιδιαίτερα με την αριθμητική επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών δεύτερης τάξης της μορφής :

$$y'' = f(x, y), y(x_0) = \eta, y'(x_0) = \eta' \quad (8.1)$$

για τα οποία συγκεκριμένα η πρώτη παράγωγος y' απουσιάζει.

Ο Dahlquist [126] σχετικά με τα συγκεκριμένα τύπου προβλήματα πρότεινε την μέθοδο :

$$\sum_{i=0}^{\lambda} a_i y_{n+i} = h^2 \sum_{i=0}^{\lambda'} b_i f_{n+i} \quad (8.2)$$

Η μέθοδος αυτή σχετίζεται με τα χαρακτηριστικά πολυώνυμα :

$$\rho(w) = \sum_{i=0}^{\lambda} a_i w^i \quad (8.3)$$

και

$$\sigma(w) = \sum_{i=0}^{\lambda'} b_i w^i. \quad (8.4)$$

ώστε μπορούμε να αναφερόμαστε στην μέθοδο αυτή και ως (ρ, σ) μέθοδο. Εάν $\lambda = \lambda'$ τότε η μέθοδος καλείται άμεση αλλιώς εάν είναι $\lambda' = \lambda - 1$ τότε καλείται έμμεση.

Σχετικά με την ακρίβεια , τη σταθερότητα και τη σύγκλιση των γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων ο Dahlquist έχει παρουσιάσει μια πλήρη και ολοκληρωμένη εργασία. Η τάξη της μεθόδου ορίζεται ως q , αν για κάθε συνάρτηση δοκιμής $z(x)$ έχουμε :

$$\sum_{i=0}^{\lambda} a_i z(x + ih) - h^2 \sum_{i=0}^{\lambda'} b_i z''(x + ih) = C_{q+2} h^{q+2} z^{(q+2)}(x) + O(h^{q+3}) \quad (8.5)$$

όπου C_{q+2} είναι η σταθερά σφάλματος και υπολογίζεται ως :

$$C_p = \frac{1}{p!} \sum_{j=0}^{\lambda} j^{p-2} (j^2 a_j - p(p-1) b_j) - \sum_{\lambda+1}^{\lambda'} \frac{j^{p-2}}{(p-2)!} b_j, p > 2 \quad (8.6)$$

Γνωρίζουμε πως η παραπάνω μέθοδος [1] ικανοποιεί τις ακόλουθες συνθήκες:

- $|a_0| + |b_0| \neq 0, a_\lambda = 1$
- ρ και σ δεν πρέπει να έχουν κοινούς παράγοντες
- $\rho(1) = \rho'(1) = 0$ και $\rho''(1) = 2\sigma(1)$
- είναι zero-stable μέθοδος

Επίσης αν :

$$a_i = a_{\lambda-i}, i = 0(1)\lambda, b_i = b_{\lambda-i}, i = 0(1)\lambda \quad (8.7)$$

τότε η μέθοδος είναι συμμετρική.

Οι επόμενοι δύο ορισμοί συνδέουν τις έννοιες P-stability και διάστημα περιοδικότητας, που σχετίζονται με προβλήματα της μορφής :

$$y'' + q^2 y = 0. \quad (8.8)$$

Ορισμός 1. [1] Η (ρ, σ) μέθοδος, λέμε ότι έχει διάστημα περιοδικότητας της μορφής $(0, \infty)$, εάν για όλα τα H^2 του διαστήματος, οι ρίζες της εξίσωσης :

$$\Pi(w, H^2) = \rho(w) + H^2 \sigma(w) = 0, H = qh \quad (8.9)$$

ικανοποιούν :

$$w_1 = e^{i\theta(H)}, w_2 = e^{-i\theta(H)}, |w_k| \leq 1, k > 2 \quad (8.10)$$

όπου $\theta(H)$ είναι πραγματική συνάρτηση.

Ορισμός 2. [1] Εάν η (ρ, σ) μέθοδος έχει ως διάστημα περιοδικότητας της μορφής $(0, \infty)$, τότε η μέθοδος λέγεται ότι είναι P-stable.

Οι Lambert and Watson [1] απέδειξαν πως αν η (ρ, σ) μέθοδος είναι συμμετρική τότε έχει ένα μη-μηδενιζόμενο διάστημα περιοδικότητας και σχετικά με την έννοια P-stability της μεθόδου, πως η τάξη της δεν μπορεί να είναι πάνω από δύο. Το ακόλουθο θεώρημα του Fukushima [313] δίνει την απαραίτητη συνθήκη για την οποία μια συμμετρική πολυβηματική μέθοδος έχει μη-μηδενικό διάστημα περιοδικότητας.

Θεώρημα:[313] Δεδομένης πολυβηματικής μεθόδου για την οποία ορίζεται η συνάρτηση :

$$d(\theta) = -\frac{\rho(e^{i\theta})}{\sigma(e^{i\theta})} \quad (8.11)$$

Αυτή η μέθοδος έχει ένα μη-μηδενικό διάστημα περιοδικότητας αν και μόνο αν:

- $d(\theta)$ στο διάστημα $[0, \pi]$ έχει μη μηδενικές διπλής πολλαπλότητας ρίζες ,
ή
- $d''(\theta) > 0$ για όλες τις μη μηδενικές ρίζες του $d(\theta)$ στο διάστημα $[0, \pi]$

Οι Quinlan και Tremaine [266] συνέχισαν την εργασία των Lambert και Watson ώστε να επιτύχουν υψηλότερης τάξης συμμετρικές μεθόδους για πλανητικές ολοκληρώσεις. Παρουσίασαν τα αποτελέσματά τους σχετικά με την αρκετά ικανοποιητική απόδοση των μεθόδων τους για μακροχρόνιες ολοκληρώσεις. Σημαντική είναι η παρατήρηση των Quinlan και Tremaine για την ιδιότητα που φέρουν οι πολυβηματικές συμμετρικές μέθοδοι σχετικά με την μη εμφάνιση του σφάλματος στρογγυλοποίησης η οποία αυξάνεται γραμμικά σε σχέση με το χρόνο.

Επίσης παρατήρησαν πως οι συμμετρικές πολυβηματικές μέθοδοι σχετίζονται [266] με τις συμμετρικές μεθόδους Störmer οι οποίες ενδείκνυνται για μακροχρόνιες ολοκληρώσεις. Ακόμη παρουσίασαν μια δωδέκατης τάξης συμμετρική

μέθοδο η οποία λειτουργούσε αποδοτικότερα σε σχέση με την Störmer μέθοδο δέκατης τρίτης τάξης.

Ιδιαίτερος έχουμε ασχοληθεί με την εξίσωση Schrödinger . Η εξίσωση Schrödinger είναι η :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (8.12)$$

όπου $\psi(x)$ είναι μια κυματοσυνάρτηση η οποία παριστάνει την ενέργεια ιδιοκατάστασης , μαζί με την συνθήκη κανονικοποίησης : $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x})$.

Εάν ορίσουμε ως $v(\tilde{x}) = 2mL^2V(x)/\hbar^2 = 2mL^2V(\tilde{x}L)/\hbar^2$ όπου $\epsilon = 2mL^2E/\hbar^2$ και εάν αλλάξουμε ως : $\tilde{x} \rightarrow x, \tilde{\psi} \rightarrow \psi$, θα έχουμε :

$$\psi''(x) = -(\epsilon - v(x))\psi(x) \quad (8.13)$$

Παρατηρούμε λοιπόν πως η εξίσωση (8.12) ουσιαστικά μπορεί να μετατραπεί στην εξίσωση (8.13) η οποία αντιστοιχεί σε προβλήματα της μορφής (8.1).

Σχετικά με προβλήματα της μορφής :

$$y'' = f(x, y), y(x_0) = \eta, y'(x_0) = \eta' \quad (8.14)$$

χρησιμοποιούμε μια λ -βημάτων μέθοδο της μορφής:

$$\sum_{i=0}^{\lambda} a_i z_{n+i} = h^2 \sum_{i=0}^{\lambda} b_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) \quad (8.15)$$

με $h = |x_{i+1} - x_i|$, $i = 0(1)m - 1$, και $|a_0| + |b_0| \neq 0$.

Εφαρμόζοντας την βαθμωτή εξίσωση δοκιμής : $z'' = -q^2 z$ σε μια συμμετρική 2λ -βημάτων μέθοδο, για $i = -\lambda(1)\lambda$, παίρνουμε την εξίσωση διαφορών της μορφής :

$$\sum_{i=1}^{\lambda} A_i(v)(z_{n+i} + z_{n-i}) + A_0(v)z_n = 0 \quad (8.16)$$

όπου $v = qh$, h είναι το μέγεθος του βήματος και $A_0(v)$, $A_1(v), \dots, A_\lambda(v)$ είναι πολυώνυμα ως προς v .

Ο τύπος (8.16) έχει ως χαρακτηριστική εξίσωση την :

$$\sum_{i=1}^{\lambda} A_i(v)(w^i + w^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (8.17)$$

η οποία σχετίζεται άμεσα με τον Ορισμό 1.

Οι T.E.Simos και P.S.Williams [199] το 1997 παρουσίασαν έναν άμεσο τύπο υπολογισμού του **phase-lag** για μια συμμετρική μέθοδο 4-βημάτων. Αυτός ο τύπος χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή μιας απλής μεθόδου 4-βημάτων η οποία έχει άπειρη τάξη **phase-lag**. Το Θεώρημα των T.E.Simos και P.S.Williams είναι :

Θεώρημα 1: Μια 2λ -βημάτων συμμετρική μέθοδος , με χαρακτηριστική εξίσωση (8.17) έχει **phase-lag** σταθερό θ και τάξη του **phase-lag** p τα οποία δίνονται από :

$$-\theta v^{p+2} + O(v^{p+4}) = \frac{2 \sum_{j=1}^{\lambda} A_j(v) \cos(jv) + A_0(v)}{2 \sum_{j=1}^{\lambda} j^2 A_j(v)} \quad (8.18)$$

Αυτός είναι ένας τύπος άμεσου υπολογισμού του **phase-lag** για οποιαδήποτε συμμετρική 2λ -βημάτων μέθοδο. Έτσι η νέα μας 8-βημάτων μέθοδος θα έχει τάξη του **phase-lag** p και **phase-lag** σταθερά θ η οποία δίνεται από:

$$-\theta v^{p+2} + O(v^{p+4}) = \frac{2A_4(v) \cos(4v) + 2A_3(v) \cos(3v) + 2A_2(v) \cos(2v) + 2A_1(v) \cos(v) + A_0(v)}{32A_4(v) + 18A_3(v) + 8A_2(v) + 2A_1(v)} \quad (8.19)$$

Νέος τύπος μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης

Στην υποενότητα αυτή παρουσιάζουμε το θεωρητικό υπόβαθρο στο οποίο βασιστήκαμε για την κατασκευή της νέας αυτής μεθόδου. Από τον Lambert [1] έχουμε πως για μια λ -βημάτων μέθοδο, το ζευγάρι πρόβλεψης-διόρθωσης είναι:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=0}^{\lambda} a_i^* z_{n+i} &= h \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f_{n+i} \\ \sum_{i=0}^{\lambda} a_i z_{n+i} &= h \sum_{i=0}^{\lambda} b_i f_{n+i} \end{aligned} \right\} \quad (8.20)$$

Αν θεωρήσουμε ως q^* την τάξη της μεθόδου πρόβλεψης και ως q την τάξη της μεθόδου διόρθωσης, τότε συνολικά για το ζεύγος πρόβλεψης-διόρθωσης της μεθόδου η τάξη θα είναι $q^* + r$ εάν είναι $q^* < q$ και $r \leq q - q^* - 1$.

Για το σκοπό της έρευνάς μας θεωρούμε το ζεύγος των γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων :

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=0}^{\lambda} a_i^* z_{n+i} &= h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f_{n+i} \\ \sum_{i=0}^{\lambda} a_i z_{n+i} &= h^2 \sum_{i=0}^{\lambda} b_i f_{n+i} \end{aligned} \right\} \quad (8.21)$$

όπου $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0| + |b_0| \neq 0$, $b_\lambda^* = 0$ και $b_\lambda \neq 0$.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, εάν θεωρήσουμε ως $a_\lambda^* = 1$ και $a_\lambda = 1$ τότε θα έχουμε :

$$\left. \begin{aligned} z_{n+\lambda} + \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} &= h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ z_{n+\lambda} + \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i z_{n+i} &= h^2 \left(b_\lambda f(x_{n+\lambda}, z_{n+\lambda}) + \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) \right) \end{aligned} \right\} \quad (8.22)$$

οπότε αντίστοιχα μπορούμε να γράψουμε :

$$\left. \begin{aligned} z_{n+\lambda} &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ z_{n+\lambda} &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i z_{n+i} + h^2 b_\lambda f(x_{n+\lambda}, z_{n+\lambda}) + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) \end{aligned} \right\} (8.23)$$

Γι' αυτό η αριθμητική ολοκλήρωση για δευτέρου βαθμού αρχικών τιμών προβλήματα παίρνει την μορφή :

$$\left. \begin{aligned} z_{n+\lambda}^* &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ z_{n+\lambda} &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 b_\lambda f(x_{n+\lambda}, z_{n+\lambda}^*) + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) \end{aligned} \right\} (8.24)$$

όπου $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0| + |b_0| \neq 0$ και $b_\lambda \neq 0$.

Αν έχουμε $a_i^* = a_{\lambda-i}^*$, $b_i^* = b_{\lambda-i}^*$, $a_i = a_{\lambda-i}$ και $b_i = b_{\lambda-i}$, $i = 0(1)[\frac{\lambda}{2}]$ τότε λέμε πως η μέθοδος είναι συμμετρική.

Τώρα αν θέσουμε όπου $\lambda = 8$ στον τύπο (8.24) , θα γίνει:

$$\left. \begin{aligned} z_4^* &= -(z_{-4} + a_3^*(z_3 + z_{-3}) + a_2^*(z_2 + z_{-2}) + a_1^*(z_1 + z_{-1}) + a_0^* z_0) \\ &\quad + h^2(b_3^*(f_3 + f_{-3}) + b_2^*(f_2 + f_{-2}) + b_1^*(f_1 + f_{-1}) + b_0^* f_0) \\ z_4 &= -(z_{-4} + a_3(z_3 + z_{-3}) + a_2(z_2 + z_{-2}) + a_1(z_1 + z_{-1}) + a_0 z_0) \\ &\quad + h^2(b_4(f_4 + f_{-4}) + b_3(f_3 + f_{-3}) + b_2(f_2 + f_{-2}) + \\ &\quad + b_1(f_1 + f_{-1}) + b_0 f_0) \end{aligned} \right\} (8.25)$$

η οποία είναι ο τύπος μια συμμετρικής μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης 8 βημάτων , με $z_i = z(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, z(x + ih))$, $i = -4(1)3$, $f_4 = f(x + 4h, z_4^*)$ και h να είναι το μέγεθος του βήματος.

Η παραπάνω μέθοδος αντιστοιχίζεται στην χαρακτηριστική εξίσωση :

$$\sum_{i=1}^4 A_i(v)(w^i + w^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (8.26)$$

όπου έχουμε ως $A_i(v) = a_i + (b_i - a_i^* b_4) v^2 - b_i^* b_4 v^4$, $i = 0(1)4$, $a_4 = a_4^* = 1$, και $b_4^* = 0$.

Αντικαθιστώντας ως $a_i = a_i^*$, $i = 0(1)\lambda - 1$ στη σχέση (8.24) θα έχουμε :

$$\left. \begin{aligned} z_{n+\lambda}^* &= -E + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ z_{n+\lambda} &= -E + h^2 b_\lambda f(x_{n+\lambda}, z_{n+\lambda}^*) + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ E &= \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} \end{aligned} \right\} \quad (8.27)$$

όπου είναι $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0| + |b_0| \neq 0$ και $b_\lambda \neq 0$.

Αν θέσουμε τώρα ως :

$$b_i = b_i + 0 = b_i - b_i^* + b_i^* = (b_i - b_i^*) + b_i^*,$$

στο τύπο (8.27) και για $\beta_i = b_i - b_i^*$, $i = 0(1)\lambda - 1$, τότε είναι :

$$b_i = \beta_i + b_i^*$$

οπότε ο τύπος γράφεται και ως :

$$\begin{aligned} h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) &= h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} (\beta_i + b_i^*) f(x_{n+i}, z_{n+i}) = \\ &= h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} \beta_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \end{aligned} \quad (8.28)$$

ή ισοδύναμα :

$$\left. \begin{aligned} z_{n+\lambda}^* &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ z_{n+\lambda} &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 b_\lambda f(x_{n+\lambda}, z_{n+\lambda}^*) \\ &+ h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} \beta_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \end{aligned} \right\} \quad (8.29)$$

ή αλλιώς :

$$\left. \begin{aligned} z_{n+\lambda}^* &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ qz_{n+\lambda} &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ &+ h^2 b_\lambda f(x_{n+\lambda}, z_{n+\lambda}^*) + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} \beta_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) \end{aligned} \right\} \quad (8.30)$$

όπου είναι $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0^*| + |\beta_0| \neq 0$ και $b_\lambda \neq 0$.

Εφόσον είναι $b_\lambda^* = 0$ και $b_\lambda \neq 0$ και καθώς $\beta_\lambda = b_\lambda - b_\lambda^*$, τότε θα έχουμε :

$$\beta_\lambda = b_\lambda - b_\lambda^* = b_\lambda - 0 = b_\lambda \neq 0$$

και αφού είναι :

$$\beta_i = b_i - b_i^*, i = 0(1)\lambda \quad (8.31)$$

τότε το ζευγάρι (8.30) μπορεί να πάρει μια νέα τελική μορφή ως :

$$\left. \begin{aligned} z_{n+\lambda}^* &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^* f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ z_{n+\lambda} &= z_{n+\lambda}^* + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda} \beta_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) \end{aligned} \right\} \quad (8.32)$$

όπου είναι $|a_0^*| + |b_0^*| \neq 0$, $|a_0| + |b_0| \neq 0$.

Παρατηρεί κανείς πως στο νέο αυτό ζευγάρι μεθόδων, η μέθοδος πρόβλεψης εμπεριέχεται πλήρως μέσα στην μέθοδο διόρθωσης. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο ονομάσε την νέα αυτή μέθοδο ως **Embedded Predictor-Corrector Method (EPC2M)**.

Προφανώς η μέθοδος αυτή είναι συμμετρική εάν έχουμε $a_i^* = a_{\lambda-i}^*$, $b_i^* = b_{\lambda-i}^*$ και $\beta_i = \beta_{\lambda-i}$, $i = 0(1)\lfloor \frac{\lambda}{2} \rfloor$.

Νέα μέθοδος πρόβλεψης

Για την κατασκευή της νέας άμεσης μεθόδου, που θα χρησιμοποιηθεί ως μέθοδος πρόβλεψης, αν θέσουμε όπου $a_\lambda = 1$ στον τύπο (8.15) θα έχουμε ως:

$$z_{n+\lambda} + \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i z_{n+i} = h^2 \sum_{i=0}^{\lambda} b_i f(x_{n+i}, z_{n+i}),$$

και :

$$z_{n+\lambda} = - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i z_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda} b_i f(x_{n+i}, z_{n+i}) \quad (8.33)$$

Για μια 8-βημάτων συμμετρική μέθοδο, εάν θέσουμε όπου $b_8 = 0$ στον τύπο (8.33) τότε θα έχουμε την άμεση μέθοδο :

$$z_4 = -(z_{-4} + a_3(z_3 + z_{-3}) + a_2(z_2 + z_{-2}) + a_1(z_1 + z_{-1}) + a_0 z_0) + h^2 (b_3(f_3 + f_{-3}) + b_2(f_2 + f_{-2}) + b_1(f_1 + f_{-1}) + b_0 f_0) \quad (8.34)$$

όπου είναι $z_i = z(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, z(x + ih))$, και h είναι το μήκος του βήματος.

Η χαρακτηριστική εξίσωση (8.17) τώρα γίνεται :

$$\sum_{i=1}^4 A_i(v)(w^i + w^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (8.35)$$

$$\text{με } A_i(v) = a_i + v^2 b_i, \quad i = 0(1)4, \quad a_4 = 1, \quad b_4 = 0.$$

Αν έχουμε τώρα ως :

$$a_3 = -2, \quad a_2 = 2, \quad a_1 = -1, \quad a_0 = 0,$$

$$b_1 = \frac{20483}{4032} + 4b_4 + \frac{5}{3}b_3 - \frac{2}{3}b_0, \quad b_2 = -\frac{3937}{2016} - 5b_4 - \frac{8}{3}b_3 + \frac{1}{6}b_0 \quad (8.36)$$

$$b_0 = \frac{G}{H}, \quad b_3 = \frac{I}{J}, \quad b_4 = \frac{K}{L}$$

για τον τύπο (8.34) , τότε αυτή είναι η πολυβηματική μέθοδος των **Quinlan-Tremaine** [266] 8-βημάτων, 8ηςτάξης ως προς **phase-lag** , 8ης αλγεβρικής τάξης και διάστημα περιοδικότητας να είναι το $(0, u_0^2)$, όπου $u_0^2 = 0.52$.

Κρατώντας τώρα τους ίδιους συντελεστές a_i του (8.36) , για τον προσδιορισμό των νέων συντελεστών $b_0^*, b_1^*, b_2^*, b_3^*$ λύνουμε ένα σύστημα εξισώσεων ως προς b_1^* έχοντας ελεύθερους αγνώστους τους συντελεστές b_0^*, b_2^*, b_3^* . Ο προσδιορισμός των συντελεστών αυτών θα επιτευχθεί αργότερα από την εξαφάνιση της πρώτης και της δεύτερης παραγώγου της φάσης υστέρησης που παρουσιάζουμε αργότερα.

Εξαφανίζοντας τη φάση υστέρησης από τον τύπο (8.34) και απαιτώντας επιπλέον οι συντελεστές να ικανοποιούν τις σχέσεις (8.34-8.36) έχουμε τελικά:

$$\begin{aligned} a_3^* &= -2, & a_2^* &= 2, & a_1^* &= -1, & a_0^* &= 0, \\ b_1^* &= \frac{5}{2} - b_3^* - b_2^* - \frac{1}{2}b_0^*, & b_0^* &= \frac{A}{B}, & b_2^* &= \frac{C}{D}, & b_3^* &= \frac{E}{F} \end{aligned} \quad (8.37)$$

όπου αναλυτικά είναι :

$$A = -6 + 140 \cdot \sin(v) \cdot v \cdot \cos(v)^4 + 160 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^5 \cdot v$$

$$\begin{aligned}
& -96 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^7 \cdot v + 2 \cdot v \cdot \cos(v) \cdot \sin(v) \\
& -60 \cdot v \cdot \cos(v)^3 \cdot \sin(v) - 134 \cdot v \cdot \cos(v)^2 \cdot \sin(v) \\
& + 32 \cdot \cos(v)^8 \cdot v^2 + 20 \cdot \sin(v) \cdot v - 36 \cdot \cos(v) \cdot v^2 \\
& + 88 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^2 + 24 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^2 + 15 \cdot \cos(v) \cdot v^4 \\
& + 20 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^2 + 20 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^4 + 30 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^4 \\
& + 25 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^4 - 68 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^2 + 16 \cdot \cos(v)^7 \cdot v^2 \\
& - 64 \cdot \cos(v)^6 \cdot v^2 + 18 \cdot \cos(v) - 120 \cdot \cos(v)^4 + 36 \cdot \cos(v)^5 \\
& + 192 \cdot \cos(v)^6 - 12 \cdot v^2 + 30 \cdot \cos(v)^2 - 54 \cdot \cos(v)^3 - 96 \cdot \cos(v)^8 \\
& + 10 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^4 - 32 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^6 \cdot v \\
B &= 2v^4 \cdot (\cos(v)^5 - \cos(v)^4 - 2 \cdot \cos(v)^3 + 2 \cdot \cos(v)^2 + \cos(v) - 1) \\
C &= -6 + 48 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^5 \cdot v + 240 \cdot \sin(v) \cdot v \cdot \cos(v)^4 \\
& - 48 \cdot v \cdot \cos(v)^3 \cdot \sin(v) - 126 \cdot v \cdot \cos(v)^2 \cdot \sin(v) \\
& - 6 \cdot v \cdot \cos(v) \cdot \sin(v) + 20 \cdot \sin(v) \cdot v - 40 \cdot \cos(v) \cdot v^2 \\
& + 128 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^2 + 16 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^2 + 15 \cdot \cos(v) \cdot v^4 \\
& - 8 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^2 + 30 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^4 + 15 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^4 \\
& - 136 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^2 + 18 \cdot \cos(v) - 84 \cdot \cos(v)^4 + 192 \cdot \cos(v)^5 \\
& + 48 \cdot \cos(v)^6 - 8 \cdot v^2 + 42 \cdot \cos(v)^2 - 114 \cdot \cos(v)^3 - 96 \cdot \cos(v)^7 \\
& + 48 \cdot \cos(v)^7 \cdot v^2 - 128 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^6 \cdot v \\
D &= 4 \cdot v^4 \cdot \sin(v)^4 \cdot (\cos(v) - 1) \\
E &= -48 \cdot \cos(v)^6 + 48 \cdot \cos(v)^6 \cdot v^2 - 80 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^5 \cdot v \\
& - 48 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^2 + 48 \cdot \cos(v)^5 + 80 \cdot \sin(v) \cdot v \cdot \cos(v)^4 \\
& + 72 \cdot \cos(v)^4 - 96 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^2 - 78 \cdot \cos(v)^3 + 96 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^2 \\
& + 104 \cdot v \cdot \cos(v)^3 \cdot \sin(v) - 102 \cdot v \cdot \cos(v)^2 \cdot \sin(v) \\
& + 48 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^2 - 18 \cdot \cos(v)^2 + 5 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^4 \\
& - 18 \cdot v \cdot \cos(v) \cdot \sin(v) + 30 \cdot \cos(v) - 48 \cdot \cos(v) \cdot v^2 \\
& + 10 \cdot \cos(v) \cdot v^4 - 6 + 5 \cdot v^4 + 16 \cdot \sin(v) \cdot v
\end{aligned}$$

$$F = -8 \cdot v^4 \cdot \sin(v)^4 \cdot (\cos(v) - 1)$$

Χρησιμοποιώντας τώρα το ανάπτυγμα Taylor , για μικρές τιμές του v , οι τύποι παραπάνω επιδέχονται σημαντικές διαγραφές όρων, οπότε :

$$b_0^* = -\frac{12629}{3024} + \frac{45767}{12096} v^2 - \frac{9837221}{7983360} v^4 + \frac{153204313}{653837184} v^6 - \frac{2356782689}{87178291200} v^8$$

$$+ \frac{20347993339}{9700566220800} v^{10} - \frac{8744186458121}{77410518441984000} v^{12} + \frac{133502728560739}{28100018194440192000} v^{14}$$

$$- \frac{2016098025337469}{15511210043330985984000} v^{16} + \frac{456680883838857389}{84691206836587183472640000} v^{18}$$

$$b_2^* = -\frac{3937}{2016} + \frac{45767}{40320} v^2 - \frac{8607}{39424} v^4 + \frac{51408821}{2724321600} v^6 - \frac{35318011}{34871316480} v^8$$

$$+ \frac{3348191339}{118562476032000} v^{10} - \frac{56104711163}{43667471941632000} v^{12} - \frac{1538176483573}{31222242438266880000} v^{14}$$

$$- \frac{1555777699603}{202760915599097856000} v^{16} - \frac{14727745335969683}{16606118987566114406400000} v^{18}$$

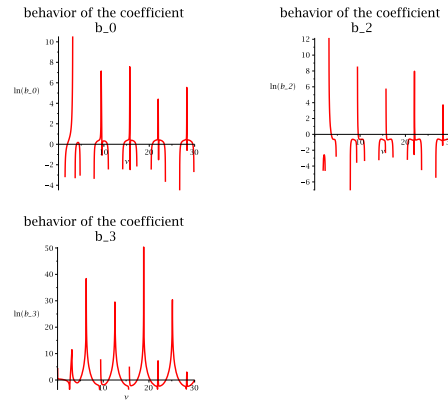
$$b_3^* = \frac{17671/12096}{-} \frac{45767}{241920} v^2 + \frac{22153}{4561920} v^4 - \frac{41092123}{130767436800} v^6 - \frac{7321421}{348713164800} v^8$$

$$- \frac{5642643317}{2134124568576000} v^{10} - \frac{210863655707}{681212562289459200} v^{12} - \frac{364884558191}{10035720783728640000} v^{14}$$

$$- \frac{264125909808473}{62044840173323943936000} v^{16} - \frac{840723413884952309}{1693824136731743669452800000} v^{18}$$

Η άμεση πολυβηματική συμμετρική μέθοδος 8-βημάτων είναι λοιπόν η (8.37), η οποία είναι 8ης αλγεβρικής τάξης με εξαφανισμένο το phase-lag , την πρώτη και δεύτερη παράγωγο του.

Η συμπεριφορά τώρα των συντελεστών b_0^* , b_2^* και b_4^* παρουσιάζεται στο Σχήμα1.



Σχήμα 8.1: Η συμπεριφορά των συντελεστών της μεθόδου πρόβλεψης για αρκετές τιμές του $\nu = qh$.

Νέα μέθοδος διόρθωσης

Για την κατασκευή της έμμεσης μεθόδου διόρθωσης, θέτουμε όπου $\lambda = 8$ στον τύπο (8.33) οπότε παίρνουμε :

$$z_4 = -z_{-4} - a_3(z_3 + z_{-3}) - a_2(z_2 + z_{-2}) - a_1(z_1 + z_{-1}) + h^2 (b_4(f_4^* + f_{-4}) + b_3(f_3 + f_{-3}) + b_2(f_2 + f_{-2}) + b_1(f_1 + f_{-1}) + b_0 f_0) \quad (8.38)$$

όπου $z_i = q(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, q(x + ih))$, $f_4^* = f(x + 4h, q_4^*)$ και h είναι το μέγεθος του βήματος.

Έτσι η χαρακτηριστική εξίσωση (8.17) γίνεται :

$$\sum_{i=1}^4 A_i(v)(w^i + w^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (8.39)$$

όπου :

$$A_i(v) = \alpha_i + v^2 \beta_i, \quad i = 0(1)4, \quad \alpha_4 = 1.$$

Κρατώντας τώρα τους ίδιους συντελεστές a_i του (8.36) , για τον προσδιορισμό των νέων συντελεστών b_0, b_1, b_2, b_3 λύνουμε ένα σύστημα εξισώσεων ως προς b_1, b_2 έχοντας ελεύθερους αγνώστους τους συντελεστές b_0, b_3, b_4 . Ο προσδιορισμός των συντελεστών αυτών θα επιτευχθεί αργότερα από την εξαφάνιση της πρώτης και της δεύτερης παραγώγου της φάσης υστέρησης που παρουσιάζουμε παρακάτω.

Εξαφανίζοντας τη φάση υστέρησης από τον τύπο (8.38) και απαιτώντας επιπλέον οι συντελεστές να ικανοποιούν τις σχέσεις (8.38-8.36) έχουμε τελικά:

$$a_3 = -2, \quad a_2 = 2, \quad a_1 = -1, \quad a_0 = 0,$$

$$b_1 = \frac{20483}{4032} + 4b_4 + \frac{5}{3}b_3 - \frac{2}{3}b_0,$$

(8.40)

$$b_2 = -\frac{3937}{2016} - 5b_4 - \frac{8}{3}b_3 + \frac{1}{6}b_0$$

$$b_0 = \frac{G}{H}, \quad b_3 = \frac{I}{J}, \quad b_4 = \frac{K}{L}$$

όπου

$$\begin{aligned} G = & 15876 - 196560 \cdot \sin(v) \cdot v \cdot \cos(v)^4 - 296352 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^5 \cdot v \\ & - 152029 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^4 - 35251 \cdot \cos(v)^6 \cdot v^4 - 212998 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^4 \\ & - 289829 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^4 + 72576 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^7 \cdot v \\ & - 24192 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^6 \cdot v + 72576 \cdot \cos(v)^7 + 217728 \cdot \cos(v)^8 \\ & + 241920 \cdot v \cdot \cos(v)^3 \cdot \sin(v) - 24948 \cdot v \cdot \cos(v) \cdot \sin(v) \\ & + 271404 \cdot v \cdot \cos(v)^2 \cdot \sin(v) - 43092 \cdot \cos(v) + 362880 \cdot \cos(v)^4 \\ & + 56700 \cdot \cos(v) \cdot v^2 + 18900 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^2 + 79380 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^2 \\ & - 31873 \cdot \cos(v) \cdot v^4 - 60480 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^2 - 91064 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^4 \\ & - 75600 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^2 - 43848 \cdot \sin(v) \cdot v - 208656 \cdot \cos(v)^5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -489888 \cdot \cos(v)^6 - 106596 \cdot \cos(v)^2 + 179172 \cdot \cos(v)^3 + 19244 \cdot v^4 \\
& -30240 \cdot \cos(v)^6 \cdot v^2 + 11340 \cdot v^2 \\
H &= 3024 \cdot v^4 \cdot (\cos(v)^6 - 2 \cdot \cos(v)^5 - \cos(v)^4 + 4 \cdot \cos(v)^3 - \cos(v)^2 \\
& -2 \cdot \cos(v) + 1) \\
I &= 18144 - 145152 \cdot \sin(v) \cdot v \cdot \cos(v)^4 + 96768 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^5 \cdot v \\
& -59158 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^4 + 17671 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^4 - 53013 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^4 \\
& -193536 \cdot v \cdot \cos(v)^3 \cdot \sin(v) + 42336 \cdot v \cdot \cos(v) \cdot \sin(v) \\
& +241920 \cdot v \cdot \cos(v)^2 \cdot \sin(v) - 90720 \cdot \cos(v) - 217728 \cdot \cos(v)^4 \\
& +117936 \cdot \cos(v) \cdot v^2 - 93744 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^2 - 63504 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^2 \\
& -49233 \cdot \cos(v) \cdot v^4 + 72576 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^2 - 56638 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^4 \\
& -24192 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^2 - 42336 \cdot \sin(v) \cdot v - 145152 \cdot \cos(v)^5 \\
& +145152 \cdot \cos(v)^6 + 54432 \cdot \cos(v)^2 + 235872 \cdot \cos(v)^3 + 18931 \cdot v^4 \\
& -9072 \cdot v^2 \\
J &= -12096 \cdot v^4 \cdot (\cos(v)^5 - 3 \cdot \cos(v)^4 + 2 \cdot \cos(v)^3 \\
& +2 \cdot \cos(v)^2 - 3 \cdot \cos(v) + 1) \\
K &= 288 \cdot \cos(v)^6 - 96 \cdot \cos(v)^6 \cdot v^2 + 288 \cdot \sin(v) \cdot \cos(v)^5 \cdot v \\
& -288 \cdot \cos(v)^5 + 192 \cdot \cos(v)^5 \cdot v^2 - 432 \cdot \cos(v)^4 + 96 \cdot \cos(v)^4 \cdot v^2 \\
& -480 \cdot \sin(v) \cdot v \cdot \cos(v)^4 + 468 \cdot \cos(v)^3 - 444 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^2 \\
& -336 \cdot v \cdot \cos(v)^3 \cdot \sin(v) - 125 \cdot \cos(v)^3 \cdot v^4 \\
& +588 \cdot v \cdot \cos(v)^2 \cdot \sin(v) + 108 \cdot \cos(v)^2 + 36 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^2 \\
& -215 \cdot \cos(v)^2 \cdot v^4 - 180 \cdot \cos(v) + 252 \cdot \cos(v) \cdot v^2 \\
& +12 \cdot v \cdot \cos(v) \cdot \sin(v) - 55 \cdot \cos(v) \cdot v^4 + 36 + 35 \cdot v^4 \\
& -36 \cdot v^2 - 72 \cdot \sin(v) \cdot v \\
L &= 96 \cdot v^4 \cdot \sin(v)^4 \cdot (\cos(v)^2 - 2 \cdot \cos(v) + 1)
\end{aligned}$$

όπου $v = qh$, q είναι η συχνότητα και h είναι το μέγεθος του βήματος.

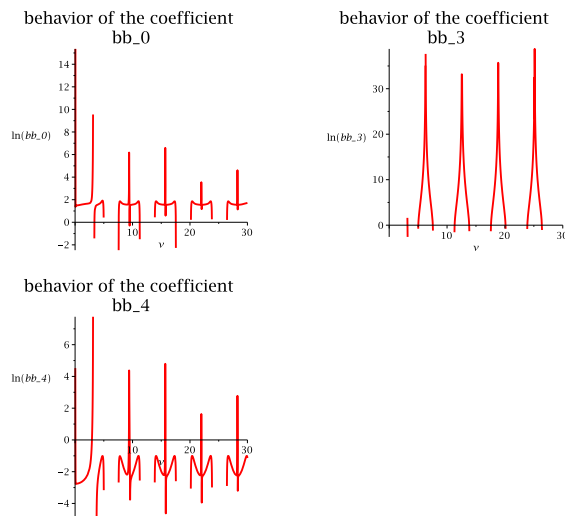
Χρησιμοποιώντας τώρα το ανάπτυγμα Taylor , για μικρές τιμές του v , οι τύποι παραπάνω επιδέχονται σημαντικές διαγραφές όρων, οπότε :

$$\begin{aligned}
 b_0 &= \frac{45767}{10368} + \frac{58061}{152064} v^2 - \frac{182872531}{2490808320} v^4 + \frac{219498427}{31384184832} v^6 \\
 &- \frac{31166250649}{106706228428800} v^8 + \frac{562198948603}{48658040163532800} v^{10} + \frac{34124493178829}{22480014555521536000} v^{12} \\
 &+ \frac{88156974516427}{1938901255416373248000} v^{14} + \frac{24877817270533589}{4839497533519267627008000} v^{16} \\
 &+ \frac{1264420372774109977}{2032588964078092403343360000} v^{18} + \frac{1935985026451356263}{26197813314784302087536640000} v^{20} \\
 &+ \frac{552400667876709828689}{63474543997162912978934169600000} v^{22} + \frac{157465715679401807715941593}{154997219495792173944999770062848 \cdot 10^6} v^{24} \\
 b_3 &= -\frac{45767}{90720} - \frac{58061}{1330560} v^2 + \frac{60053897}{43589145600} v^4 - \frac{5734501}{156920924160} v^6 \\
 &- \frac{651395527}{266765571072000} v^8 - \frac{11665883797}{42575785143091200} v^{10} - \frac{14989282592857}{562000363888803840000} v^{12} \\
 &- \frac{5795535181309}{2215887149047283712000} v^{14} - \frac{231843167482133}{891486387753549299712000} v^{16} \\
 &- \frac{531006438529013}{20325889640780924033433600} v^{18} - \frac{15707159026192169}{5954048480632795928985600000} v^{20} \\
 &- \frac{11269380349983157813217}{42210571758113337130991222784000000} v^{22} - \frac{455577298477649913331231}{1684752385823827977663040978944 \cdot 10^7} v^{24} \\
 b_4 &= \frac{45767}{725760} + \frac{58061}{10644480} v^2 + \frac{88852949}{174356582400} v^4 + \frac{81007601}{1569209241600} v^6 \\
 &+ \frac{857181503}{152437469184000} v^8 + \frac{2185407102427}{3406062811447296000} v^{10} + \frac{168261172258691}{224800145555215360000} v^{12}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{170514753691237}{19389012554163732480000} v^{14} + \frac{69983291279922121}{67752965469269746778112000} v^{16} \\
& + \frac{13136856210243949}{108694597009523657932800000} v^{18} + \frac{3685532027088797737}{261978133147843020875366400000} v^{20} \\
& + \frac{137450787313695211229171}{84421143516226674261982445568 \cdot 10^6} v^{22} + \frac{290371063645984514944193479}{154997219495792173944999770062848 \cdot 10^7} v^{24}
\end{aligned}$$

Η έμμεση πολυβηματική συμμετρική μέθοδος 8-βημάτων είναι λοιπόν η (8.40), η οποία είναι 8ης αλγεβρικής τάξης με εξαφανισμένο το phase-lag, την πρώτη και δεύτερη παράγωγό του.

Η συμπεριφορά τώρα των συντελεστών b_0^* , b_3^* και b_4^* παρουσιάζεται στο Σχήμα2.



Σχήμα 8.2: Η συμπεριφορά των συντελεστών της μεθόδου διόρθωσης για αρ-
κετές τιμές του $v = qh$.

Κατασκευή νέας EPC2M μεθόδου

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζουμε την μεθοδολογία που ακολουθήσαμε ώστε να επιτύχουμε την κατασκευή της νέας μεθόδου.

Αρχικά θεωρούμε ότι οι συντελεστές b_i^* , b_i , $i = 0(1)\lambda$ στο ζεύγος των μεθόδων (8.21), εξαρτώνται ως προς το v , δηλαδή v , ($b_i^* = b_i^*(v)$, $b_i = b_i(v)$). Έτσι ο τύπος (8.31) για κάθε β_i δίνει ως : $\beta_i = b_i - b_i^* = b_i(v) - b_i^*(v) = \beta_i(v)$, $i = 0(1)\lambda$.

Αντικαθιστώντας τους παραπάνω συντελεστές στη σχέση (8.32) παίρνουμε :

$$\left. \begin{aligned} q_{n+\lambda}^* &= - \sum_{i=0}^{\lambda-1} a_i^* z_{n+i} + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda-1} b_i^*(v) f(x_{n+i}, z_{n+i}) \\ z_{n+\lambda} &= q_{n+\lambda}^* + h^2 \sum_{i=0}^{\lambda} \beta_i(v) f(x_{n+i}, z_{n+i}) \end{aligned} \right\} \quad (8.41)$$

όπου

$$|a_0^*| + |b_0^*(v)| \neq 0, |a_0| + |\beta_0(v)| \neq 0$$

και $\beta_i(v) = b_i(v) - b_i^*(v)$, $i = 0(1)\lambda$ με $b_\lambda^*(v) = 0$.

Η συμμετρική ενσωματωμένη πρόβλεψης-διόρθωσης μέθοδος (EPMC) οκτώ βημάτων που προκύπτει από τη σχέση (8.41) για $\lambda = 8$ είναι :

$$\left. \begin{aligned} q_4^* &= -(z_{-4} + a_3^*(z_3 + z_{-3}) + a_2^*(z_2 + z_{-2}) + a_1^*(z_1 + z_{-1}) \\ &+ a_0^* z_0) + h^2 (b_3^*(v)(f_3 + f_{-3}) + b_2^*(v)(f_2 + f_{-2}) + b_1^*(v)(f_1 + f_{-1}) \\ &+ b_0^*(v)f_0) \\ z_4 &= q_4^* + h^2 (\beta_4(v)(f_4 + f_{-4}) + \beta_3(v)(f_3 + f_{-3}) \\ &+ \beta_2(v)(f_2 + f_{-2}) + \beta_1(v)(f_1 + f_{-1}) + \beta_0(v)f_0) \end{aligned} \right\} \quad (8.42)$$

όπου $z_i = q(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, q(x + ih))$, $i = -4(1)3$, και $f_4 = f(x + 4h, q_4^*)$ και το μέγεθος του βήματος είναι το h .

Η χαρακτηριστική εξίσωση (8.17) γίνεται :

$$\sum_{i=1}^4 A_i(v)(w^i + w^{-i}) + A_0(v) = 0 \quad (8.43)$$

με $A_i(v) = a_i^* + v^2(\beta_i(v) - a_i^* \beta_4(v)) - v^4 b_i^*(v) \beta_4(v)$, $i = 0(1)4$, $a_4^* = 1$, και $b_4^*(v) = 0$.

Τώρα από τους τύπους (8.37) και (8.40), μπορούμε να προσδιορίσουμε τους συντελεστές $\beta_i(v) = b_i(v) - b_i^*(v)$, $i = 0(1)4$ όπου συγκεκριμένα είναι:

$$\beta_0(v) = b_0(v) - b_0^*(v) = b_0 - b_0^*,$$

$$\beta_1(v) = b_1(v) - b_1^*(v) = \frac{10403}{4032} + 4b_4 + \frac{5}{3}b_3 - \frac{2}{3}b_0 + b_3^* + b_2^* + \frac{1}{2}b_0^*,$$

$$\beta_2(v) = b_2(v) - b_2^*(v) = b_2 - b_2^* = -\frac{3937}{2016} - 5b_4 - \frac{8}{3}b_3 + \frac{1}{6}b_0 - b_2^*, \quad (8.44)$$

$$\beta_3(v) = b_3(v) - b_3^*(v) = b_3 - b_3^*$$

$$\beta_4(v) = b_4(v) - b_4^*(v) = b_4(v) = b_4$$

Έτσι από τους τύπους (8.42), (8.37) και (8.44) εξάγεται η νέα οκτώ βημάτων συμμετρική ενσωματωμένη μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης (EPMC) :

$$\left. \begin{aligned} z_4^* &= -z_{-4} + 2(z_3 + z_{-3}) - 2(z_2 + z_{-2}) + (z_1 + z_{-1}) \\ &+ h^2 \left(b_3^*(v)(f_3 + f_{-3}) + b_2^*(v)(f_2 + f_{-2}) \right. \\ &\left. + \left(\frac{5}{2} - b_3^*(v) - b_2^*(v) - \frac{1}{2}b_0^*(v) \right)(f_1 + f_{-1}) + b_0^*(v)f_0 \right) \\ z_4 &= z_4^* + h^2 \left((b_4)(f_4^* + f_{-4}) + (b_3 - b_3^*)(f_3 + f_{-3}) \right. \\ &\left. + \left(-\frac{3937}{2016} - 5b_4 - \frac{8}{3}b_3 + \frac{1}{6}b_0 - b_2^* \right)(f_2 + f_{-2}) \right. \\ &\left. + \left(\frac{10403}{4032} + 4b_4 + \frac{5}{3}b_3 - \frac{2}{3}b_0 + b_3^* + b_2^* + \frac{1}{2}b_0^* \right)(f_1 + f_{-1}) \right. \\ &\left. + (b_0 - b_0^*)f_0 \right) \end{aligned} \right\} \quad (8.45)$$

όπου είναι $z_i = q(x + ih)$, $f_i = f(x + ih, q(x + ih))$, $f_4^* = f(x + 4h, q_4^*)$, και οι συντελεστές b_0^*, b_2^*, b_3^* καθώς επίσης και οι b_0, b_3, b_4 ορίζονται στους τύπους (8.37), (8.38), (8.40) και (8.41) αντίστοιχα.

Για να υπολογίσουμε το σφάλμα αποκοπής **Local Truncation Error (LTE)** αναπτύσσουμε τα $y_{\pm i}$, $i = 1(1)4$ και τα $f_{\pm j}$, $j = 0(1)4$ με τη σειρά Taylor και έτσι με τους συντελεστές της σχέσης (8.37) παίρνουμε την ακόλουθη επέκταση για το LTE :

$$L.T.E. = \frac{12506213339}{5794003353600} y_n^{(12)} h^{12} + O(h^{14}) \quad (8.46)$$

Τελικά καταφέραμε και επιτύχαμε την κατασκευή της νέας μεθόδου (8.45). Πρόκειται για μια πολυβηματική μέθοδο οκτώ βημάτων, συμμετρική και ενσωματωμένη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης με εξαφανισμένο **phase-lag** καθώς και τη πρώτη και δεύτερη παράγωγό του και δέκατης αλγεβρικής τάξης.

Λόγω της ανάγκης που παρουσιάστηκε για να γνωρίσουμε τα πρώτα επτά βήματα προσέγγισης, χρησιμοποιήσαμε τη μέθοδο **Runge-Kutta Fehlberg**, ώστε να δημιουργηθεί αυτή η νέα μέθοδος (8.45).

Ανάλυση νέας μεθόδου

Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενη ενότητα, οι Lambert και Watson [1] απέδειξαν πως η μέθοδος (8.2) έχει ένα μη-εξαφανιζόμενο διάστημα περιοδικότητας μόνο αν η τάξη του P-stability δεν υπερβαίνει το δύο, επίσης εάν η μέθοδος είναι συμμετρική και επιπλέον εάν η μέθοδος είναι έμμεση.

Ο Fukushima [313] έδωσε την απαραίτητη συνθήκη, Θεώρημα 1, σχετικά με το πότε μια μέθοδος θα έχει ένα μη-εξαφανιζόμενο διάστημα περιοδικότητας.

Για την ανάλυση της σταθερότητας της μεθόδου αλλά και την ανάλυση για το διάστημα περιодικότητάς της, βασιστήκαμε στο βαθμωτό μοντέλο προβλήματος:

$$z'' = -\delta^2 z \quad (8.47)$$

όπου $\delta \neq q$.

Εφαρμόζοντας την συμμετρική μέθοδο οκτώ βημάτων (8.42) στην εξίσωση (8.47), παίρνουμε την ακόλουθη διαφορική εξίσωση:

$$F_4(w, n) (z_{n+4} + z_{n-4}) + F_3(w, n) (z_{n+3} + z_{n-3}) + F_2(w, n) (z_{n+2} + z_{n-2}) + F_1(w, n) (z_{n+1} + z_{n-1}) + F_0(w, n) z_n = 0 \quad (8.48)$$

Τώρα η χαρακτηριστική εξίσωση που σχετίζεται με αυτήν είναι η :

$$F_4(w, n) (\lambda^8 + 1) + F_3(w, n) (\lambda^7 + \lambda) + F_2(w, n) (\lambda^6 + \lambda^2) + F_1(w, n) (\lambda^5 + \lambda^3) + F_0(w, n) \lambda^4 = 0 \quad (8.49)$$

όπου

$$\begin{aligned} F_4(w, n) &= 1, F_3(w, n) = a_3^* + w^2 (\beta_3 - a_3^* \beta_4) - w^4 b_3^* \beta_4, \\ F_2(w, n) &= a_2^* + w^2 (\beta_2 - a_2^* \beta_4) - w^4 b_2^* \beta_4, \\ F_1(w, n) &= a_1^* + w^2 (\beta_1 - a_1^* \beta_4) - w^4 b_1^* \beta_4, \\ F_0(w, n) &= w^2 \beta_0 - w^4 b_0^* \beta_4 \end{aligned} \quad (8.50)$$

και $w = \delta h$, $n = qh$.

Από Ορισμό 1 και Ορισμό 2 εξάγουμε την επόμενη παρατήρηση για το πότε μια (ρ, σ) μέθοδος, που σχετίζεται με τη (8.42) μέθοδο, έχει μια μη κενή περιοχή σταθερότητας.

Εάν οι ρίζες της χαρακτηριστικής εξίσωσης (8.49) ικανοποιούν :

$$|\lambda_j| \leq 1, j = 1(1)6. \quad (8.51)$$

τότε η μέθοδος (8.42) θα έχει μια μη-μηδενική περιοχή σταθερότητας.

Η παραπάνω ορισμένη περιοχή σταθερότητας επίσης καλείται και ως $w-n$ τομέας.

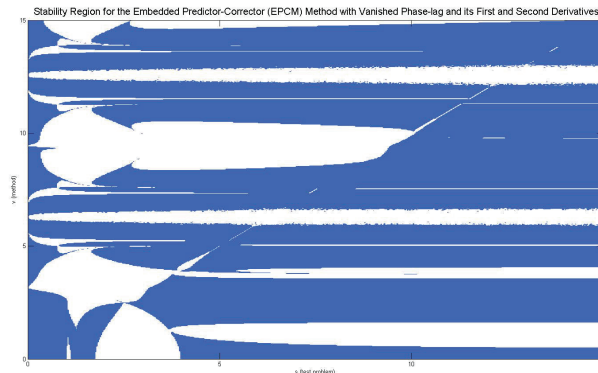
Για τον υπολογισμό και τη γραφική σχεδίαση του $s-n$ τομέα , ακολουθήσαμε τα επόμενα βήματα :

- Προσδιορισμός των επαναλήψεων για w ($1 \leq w \leq N$) και n ($1 \leq n \leq K$) αντίστοιχα, όπου οι αριθμοί N , K ορίζονται από τον χρήστη.
- Επίλυση της χαρακτηριστικής εξίσωσης (8.49) για κάθε ζευγάρι των (w, n) τα οποία προκύπτουν από την κάθε επανάληψη.
- Έλεγχος για την κάθε λύση της εξίσωσης (8.49) για το κάθε ζεύγος (w, n) που προκύπτει από την κάθε επανάληψη , για το αν ικανοποιεί τις συνθήκες (8.51).
- Σε περίπτωση ικανοποίησης των συνθηκών της (8.49), τότε το αντίστοιχο σημείο (w, n) παριστάνεται γραφικά.

Επισημαίνουμε για το Γράφημα 3 που ακολουθεί , σχετικά με τον $w-n$ τομέα πως :

η έγχρωμη περιοχή αφορά αριθμητικά σταθερό ζεύγος και πως

η λευκή περιοχή αφορά αριθμητικά μη-σταθερό ζεύγος.



Σχήμα 8.3: Ο $w - v$ τομέας της μεθόδου (8.42)

Επίσης τονίζουμε ότι : η έγχρωμη περιοχή που παρουσιάζεται παραπάνω , αποκλείοντας την περιοχή γύρω από την πρώτη διαγώνιο , θα χρησιμοποιηθεί για πραγματικά προβλήματα με $\delta \neq q$. Η περιοχή γύρω από την πρώτη διαγώνιο θα χρησιμοποιηθεί για πραγματικά προβλήματα με $\delta = q$ όπως είναι η εξίσωση Schrödinger καθώς και σχετικών προβλημάτων.

Για πραγματικά προβλήματα με $\delta = q$, για τον προσδιορισμό του διαστήματος περιοδικότητας , ακολουθήσαμε τον ακόλουθο αλγόριθμο :

1. Εξέταση όπου $\delta = q \Leftrightarrow w = n$ ώστε να καθορίσουμε τα πολυώνυμα σταθερότητας $F_j(w, n)$, $j = 0(1)4$
2. Εξερεύνηση της περιοχής γύρω από την πρώτη διαγώνιο του τομέα $w - n$.

Οπότε , το διάστημα περιοδικότητας της ενσωματωμένης μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης (8.42) είναι $(0, n_0^2)$ όπου $n_0^2 = 6.235009$.

Προβλήματα

Συγκρίνουμε τη μέθοδο (8.42) με οκτώ προβλήματα αρχικών τιμών με ταλαντωτικές λύσεις ώστε να μετρήσουμε την αποτελεσματικότητα της νέας αυτής μεθόδου. Για να εκτιμήσουμε την συχνότητα των προβλημάτων αυτών, φέρνουμε το κάθε πρόβλημα στη μορφή $y'' = My + N$ όπου M και N είναι πίνακες. Ως αρχικό σημείο εκκίνησης όπου χρησιμοποιήσαμε την διαδικασία της ολοκλήρωσης, χρησιμοποιήσαμε $x_0 \approx 0.1$.

Το τροχιακό πρόβλημα των Stiefel-Bettis

Σχετικά με το τροχιακό πρόβλημα των Stiefel-Bettis, ασχοληθήκαμε με το "σχεδόν" περιοδικό πρόβλημα :

$$z'' + z = 0.001 e^{it}, \quad z(0) = 1, \quad z'(0) = 0.9995i, \quad zq \in \mathcal{C}, \quad (8.52)$$

ή ισοδύναμα :

$$\begin{aligned} p'' + p &= 0.001 \cos(t), & p(0) &= 1, & p'(0) &= 0, \\ r'' + r &= 0.001 \sin(t), & r(0) &= 0, & r'(0) &= 0.9995 \end{aligned} \quad (8.53)$$

με θεωρητική λύση την :

$$\begin{aligned} z(t) &= p(t) + i r(t), & p, r &\in \mathcal{R} \\ p(t) &= \cos(t) + 0.0005 t \sin(t), \\ r(t) &= \sin(t) - 0.0005 t \cos(t). \end{aligned}$$

όπου αντιπροσωπεύει την κίνηση μιας διαταραγμένης κυκλικής τροχιάς στο μιγαδικό επίπεδο. Επιλύσαμε το σύστημα των εξισώσεων (8.53) για $t \in [0, 1000\pi]$.

Η εκτιμώμενη συχνότητα είναι : $w = 1$ (βλέπε [302] και [301]).

Εξίσωση Duffing

Η εξίσωση **Duffing** είναι μια μη γραμμική διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης, που χρησιμοποιείται για την μοντελοποίηση ορισμένων αποσβενόμενων και κινούμενων ταλαντωτών. Για την εξίσωση **Duffing** έχουμε :

$$\ddot{x} + \delta \dot{x} + \alpha x + \beta x^3 = \gamma \cos(\omega t) \quad (8.54)$$

Έτσι χρησιμοποιήσαμε για το πρόβλημα αυτό :

$$z'' = -z - z^3 + 0.002 \cos(1.01 t), \quad z(0) = 0.200426728067, \quad z'(0) = 0 \quad (8.55)$$

με $t \in [0, 1000\pi]$. Η θεωρητική λύση είναι η :

$$z(t) = 0.200179477536 \cos(1.01 t) + 2.46946143 \cdot 10^{-4} \cos(3.03 t) + 3.04014 \cdot 10^{-7} \cos(5.05 t) + 3.74 \cdot 10^{-10} \cos(7.07 t) + \dots$$

Η εκτιμώμενη συχνότητα είναι : $\omega = 1$ (βλέπε [301]).

Το πρόβλημα των N-σωμάτων

Το πρόβλημα των n -σωμάτων μελετά την πρόβλεψη των κινήσεων μιας ομάδας ουράνιων αντικειμένων που αλληλεπιδρούν μέσω της βαρύτητας. Η επιθυμία για την κατανόηση των κινήσεων του ήλιου, του φεγγαριού, των πλανητών και των ορατών αστεριών δικαιολογεί την επιθυμία για την επίλυση του προβλήματος των n -σωμάτων.

Η επιτάχυνση της μάζας λόγω των υπολοίπων $n-1$ σωμάτων δίνεται ως :

$$\ddot{\mathbf{q}}_i = -G \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{m_j}{r_{ji}^3} \mathbf{q}_{ji} \quad (8.56)$$

όπου G είναι η σταθερά βαρύτητας, m_j είναι η μάζα του σώματος j και \mathbf{q}_i είναι το διάνυσμα της θέσης του i -στού σώματος.

Μέχρι τώρα δεν υπάρχει αναλυτική λύση της εξίσωσης των n -σωμάτων. Η αριθμητική ολοκλήρωση είναι η πιο δημοφιλής μέθοδος προσέγγισης της λύσης στο παραπάνω πρόβλημα. Ο τύπος της επιτάχυνσης (8.56) μπορεί να ενσωματωθεί σε ένα μικρό χρονικό βήμα ώστε να επιτευχθεί ο προσδιορισμός της θέσης και της ταχύτητας σε μια καινούργια στιγμή, λαμβάνοντας υπόψη τις αρχικές συνθήκες ταχύτητας και θέσης για το κάθε σώμα.

Για να ελέγξουμε την αποτελεσματικότητα της μεθόδου, εξετάσαμε τη νέα μέθοδο στο διάστημα $t \in [0, 10^5]$. Χρησιμοποιήσαμε ως 0.00145044732989 για την συχνότητα (βλέπε [304]), όπου είναι η συχνότητα του ταχύτερου σώματος.

Το τροχιακό πρόβλημα των Franco-Palacios

Οι Franco και Palacios μελέτησαν το "σχεδόν" περιοδικό τροχιακό πρόβλημα:

$$f'' + \omega^2 f = -\varepsilon f \quad (8.57)$$

όπου $\varepsilon = \lambda^2 - \omega^2$.

Το περιοδικό τροχιακό πρόβλημα [269] μπορεί να γραφεί και ως:

$$f'' + f = \varepsilon e^{i\varphi t}, \quad f(0) = 1, \quad f'(0) = i, \quad f \in \mathcal{C}, \quad (8.58)$$

ή ισοδύναμα :

$$\begin{aligned} k'' + k &= \varepsilon \cos(\varphi t), & k(0) &= 1, & k'(0) &= 0, \\ l'' + l &= \varepsilon \sin(\varphi t), & l(0) &= 0, & l'(0) &= 1, \end{aligned} \quad (8.59)$$

όπου $\varepsilon = 0.001$ και $\varphi = 0.01$.

Η θεωρητική λύση του (8.58) είναι :

$$\begin{aligned} f(t) &= k(t) + i l(t), \quad k, l \in \mathcal{R} \\ k(t) &= \frac{1-\varepsilon-\varphi^2}{1-\varphi^2} \cos(t) + \frac{\varepsilon}{1-\varphi^2} \cos(\varphi t) \\ l(t) &= \frac{1-\varepsilon\varphi-\varphi^2}{1-\varphi^2} \sin(t) + \frac{\varepsilon}{1-\varphi^2} \sin(\varphi t) \end{aligned}$$

Η λύση αντιπροσωπεύει την κίνηση για μια διαταρασόμενη κυκλική τροχιά στο μιγαδικό επίπεδο. Μπορούμε να λύσουμε το πρόβλημα αυτό ως ένα σύστημα εξισώσεων ή ως μια ενιαία εξίσωση. Επιλύσαμε το πρόβλημα αυτό ως σύστημα των εξισώσεων (8.59) για $t \in [0, 1000\pi]$.

Η εκτιμώμενη συχνότητα είναι : $\omega = 1$ (βλέπε [302] και [301]).

Εξίσωση Schrödinger

Σημαντικό πρόβλημα στην πυρηνική φυσική είναι η κίνηση των ελεύθερων ηλεκτρονίων. Γνωρίζουμε ότι αυτά τα ηλεκτρόνια κινούνται σε καλά καθορισμένες τροχιές γύρω από τον πυρήνα και σε ένα δυναμικό πεδίο που δημιουργείται από τα θετικά φορτισμένα ιόντα καθώς και από τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια. Κάθε πιθανό πεδίο καθορίζεται από παραμέτρους όπως το πλάτος, το βάθος και την κλίση του δυναμικού.

Για την αριθμητική επίλυση της χρονικά ανεξάρτητης ακτινικής εξίσωσης **Schrödinger**, η νέα προτεινόμενη μέθοδος που αναπτύξαμε σε αυτή την εργασία είναι η πιο ακριβής μέθοδος ειδικά για μεγάλες τιμές του $|G| = |V_c - E|$.

Η χρονικά ανεξάρτητη ακτινική εξίσωση **Schrödinger** είναι της μορφής : $y'' = f(x)y(x)$. Με βάση την εργασία των **Ixaru και Rizea [20]**, η εξίσωση μπορεί να γραφθεί στη μορφή $f(x) = g(x) + D$ όπου $g(x) = V(x) - V_c = d$ και V_c είναι η σταθερά προσέγγισης του δυναμικού και $D = v^2 = V_c - E$.

Υπολογίζουμε τις παραγώγους $y^{(i)}$, $i = 2, 3, 4, \dots$ που είναι όροι των τοπικών τύπων σφάλματος αποκοπής. Οι παράγωγοι αυτοί παρουσιάζονται ως πολυώνυμα του D . Τέλος, αντικαθιστούμε τις εκφράσεις των παραγώγων από το προηγούμενο βήμα, στους τύπους σφαλμάτων τοπικής αποκοπής.

Ακολουθήσαμε την παραπάνω διαδικασία και τους τύπους:

$$y_n^{(2)} = (g(x) + d)y(x)$$

$$y_n^{(3)} = \left(\frac{d}{dx}g(x)\right)y(x) + (g(x) + d)\left(\frac{d}{dx}y(x)\right)$$

$$y_n^{(4)} = \left(\frac{d^2}{dx^2}g(x)\right) + 2\left(\frac{d}{dx}g(x)\right)\left(\frac{d}{dx}y(x)\right) + (g(x) + d)\left(\frac{d^2}{dx^2}y(x)\right) \dots$$

Σχετικά με την ενέργεια E θεωρήσαμε δύο περιπτώσεις :

1) Η ενέργεια E να είναι κοντά στο δυναμικό ώστε μόνο οι ελεύθεροι όροι των πολυωνύμων στο D να υπολογίζονται. Έτσι για αυτές τις τιμές του D , οι μέθοδοι είναι συγκρίσιμης ακρίβειας. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι οι ελεύθεροι όροι των πολυωνύμων στο D είναι οι ίδιοι με της κλασσικής μεθόδου όπως και της νέας μεθόδου που αναπτύχθηκε.

2) Να είναι $D \gg 0$ ή $D \ll$ δηλαδή να έχουμε $|D|$ έναν μεγάλο αριθμό.

Προκειμένου να εφαρμόσουμε στην ακτινική εξίσωση Schrödinger την νέα μέθοδο, απαιτείται η τιμή της παραμέτρου ν . Για κάθε πρόβλημα της ακτινικής εξίσωσης Schrödinger η παράμετρος ν δίνεται από τον τύπο :

$$\nu = \sqrt{|V(x) - E|}$$

όπου $V(x)$ είναι το δυναμικό και E είναι η ενέργεια.

Χρησιμοποιήσαμε το δυναμικό Wood – Saxon ως :

$$V(x) = \frac{m_0}{1+q} + \frac{m_1 q}{(1+q)^2}$$

με $q = \exp\left(\frac{x-x_0}{a}\right)$, $m_0 = -50$, $a = 0.6$, $x_0 = 7$ και $m_1 = -\frac{k_0}{a}$

Γνωρίζουμε πως η παράμετρος ν δεν δίνεται ως συνάρτηση του x αλλά βασίζεται σε ορισμένα κρίσιμα σημεία που έχουν καθοριστεί για το καθένα δυναμικό.

Έτσι για το δυναμικό Wood-Saxon που χρησιμοποιήθηκε, για την απόκτηση αριθμητικών αποτελεσμάτων επιλέγουμε το ν ως :

$$\nu = \begin{cases} \sqrt{-50 + E} & \text{for } x \in [0, 6.5 - 2h] \\ \sqrt{-37.5 + E} & \text{for } x = 6.5 - 2h \\ \sqrt{-25 + E} & \text{for } x = 6.5 \\ \sqrt{-12.5 + E} & \text{for } x = 6.5 + h \\ \sqrt{E} & \text{for } x \in [6.5 + 2h, 15] \end{cases}$$

Το δυναμικό Woods-Saxon είναι ένα από τα σημαντικότερα δυναμικά μικρής εμβέλειας στη φυσική. Είναι ένα δυναμικό το οποίο χρησιμοποιείται για να περιγράψει τις δυνάμεις που εφαρμόζονται στα νουκλεόνια (πρωτόνια και νετρόνια) μέσα στον ατομικό πυρήνα. Επιπλέον, το δυναμικό αυτό εφαρμόστηκε σε πολλά προβλήματα, σε πυρηνικά και σωματίδια της φυσικής, της ατομικής φυσικής, της συμπυκνωμένης ύλης και της χημικής φυσικής.

Το δυναμικό Wood-Saxon δίνεται ως εξής :

$$V(r) = \frac{-V_0}{1 + e^{\left(\frac{r-R_0}{a}\right)}} \quad (8.60)$$

όπου R_0 είναι το δυναμικό πλάτος, V_0 είναι το βάθος του δυναμικού και a είναι το πάχος της επιφάνειας. Ο τύπος του δυναμικού (8.60) είναι μια συνάρτηση της απόστασης r από το κέντρο του πυρήνα. Στις σφαιρικές συντεταγμένες η εξίσωση Schrödinger έχει τη μορφή :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(r) = E\psi(r) \quad (8.61)$$

ή το ακτινικό του τμήμα είναι :

$$R''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{V_0}{1 + qe^{2ar}}\right]R(r) = 0 \quad (8.62)$$

όπου η ακτινική κυματοσυνάρτηση είναι $\psi(r) = R(r)/r$ και εισάγωντας την πραγματική σταθερά q μπορούμε να κάνουμε τις ακόλουθες μετατροπές ως $r - R_0 \equiv r, \frac{1}{a} \equiv 2a$. Θεωρούμε πως η κυματοσυνάρτηση $\psi(r) = (\frac{1}{r})R(r)$ φράσσεται καθώς $r \rightarrow 0$. Έτσι ο τύπος (8.62) μπορεί να γραφεί ως :

$$z''(x) = \left(\frac{l(l+1)}{x^2} + V(x) - E \right) z(x) \quad (8.63)$$

όπου $W(x) = \frac{l(l+1)}{x^2} + V(x)$ είναι το αποτελεσματικό δυναμικό. Για διευκόλυνσή μας, υποθέτουμε ότι $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = 0$ και ως εκ τούτου $\lim_{x \rightarrow \infty} W(x) = 0$.

Διαχωρίζουμε το διάστημα $[0, \infty)$ σε υποδιαστήματα της μορφής $[a_i, b_i]$ έτσι ώστε $W(x)$ να είναι σταθερό καθώς \bar{W}_i και αν $E > 0$ τότε λαμβάνουμε την προσέγγιση για το πρόβλημα (8.62) :

$$z_i'' = (\bar{W} - E) z_i \quad (8.64)$$

με λύση :

$$z_i(x) = C_i e^{\sqrt{\bar{W}-E}x} + D_i e^{-\sqrt{\bar{W}-E}x}, \quad (8.65)$$

$C_i, D_i \in \mathbb{R}$.

Για τις ανάγκες της έρευνάς μας χρησιμοποιήσαμε μια άλλη μορφή του δυναμικού Wood-Saxon το οποίο είναι :

$$V(x) = \frac{k_0}{1+p} + \frac{k_1 p}{(1+p)^2}, \quad p = \exp\left(\frac{x-x_0}{a}\right), \quad (8.66)$$

και εάν είναι $l = 0$ στο διάστημα $[0, 15]$ τότε χρησιμοποιούμε την αριθμητική ολοκλήρωση για το πρόβλημα (8.63) έχοντας ως $k_0 = -50, a = 0.6, x_0 = 7$ και $k_1 = -\frac{k_0}{a}$. Καθώς το $V(x)$ διασπάται πιο γρήγορα από το $\frac{l(l+1)}{x^2}$, τότε η εξίσωση Schrödinger (8.63) μεγάλες τιμές του x γίνεται :

$$z''(x) = \left(\frac{l(l+1)}{x^2} - E \right) z(x) \quad (8.67)$$

Παρότι η εξίσωση στην ακτινική της μορφή είναι δύσκολο να λυθεί, η παραπάνω εξίσωση έχει δύο λύσεις που είναι συνδυασμός των σφαιρικών εξισώσεων Bessel και των σφαιρικών εξισώσεων Neumann, όπου είναι αντίστοιχα $q^j b_j(qx)$ και $q^j n_j(qx)$ [88].

Αν τώρα ισχύει $x \rightarrow \infty$ τότε έχουμε την ασυμπτωτική μορφή της λύσης :

$$\begin{aligned} z(x) &\approx q^j b_j(qx) - q^j n_j(qx) \\ &\approx D[\sin(qx - \pi l/2) + \tan(s_l) \cos(qx - \pi l/2)] \end{aligned} \quad (8.68)$$

με

$$\tan(s_l) = \frac{z(x_i) S(x_{i+1}) - z(x_{i+1}) S(x_i)}{z(x_{i+1}) C(x_i) - z(x_i) C(x_{i+1})} \quad (8.69)$$

όπου s_l καλείται η μετατόπιση φάσης της σκέδασης και είναι $S(x) = k^j b_j(kx)$, $C(x) = k^j n_j(kx)$ καθώς $x_i < x_{i+1}$.

Η ακρίβεια για το παραπάνω πρόβλημα είναι $\pi/2$ και ως ενεργειακές τιμές είχαμε τις τιμές $E = 341.495874$ και $E = 989.701916$.

Μη ομοιογενής εξίσωση

Μια γραμμική διαφορική εξίσωση είναι ομοιογενής εάν είναι μια ομοιογενής γραμμική εξίσωση ως προς την άγνωστη συνάρτηση και των παραγώγων αυτής. Προκειμένου να διατηρηθεί αυτή η προϋπόθεση, κάθε μη φυσικός όρος της γραμμικής διαφορικής εξίσωσης πρέπει να εξαρτάται από την άγνωστη συνάρτηση ή οποιαδήποτε παράγωγό της. Εάν η παραπάνω προϋπόθεση αποτύχει, τότε η εξίσωση ονομάζεται ανομοιογενής ή μη ομοιογενής. Μια γραμμική ανομοιογενής διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης μπορεί να πάρει τη μορφή :

$$a_2 \ddot{x}(t) + a_1 \dot{x}(t) + a_0 x(t) = y(t) \quad (8.70)$$

με γενική λύση :

$$kx_1(t) + Lx_2(t) + \textit{particular_integral} \quad (8.71)$$

όπου K και L προσδιορίζονται από τις αρχικές συνθήκες και συγκεκριμένα ολοκληρώματα που υπολογίζονται με ειδικές μεθόδους.

Δοκιμάζουμε τη μέθοδό μας στο ακόλουθο πρόβλημα :

$$z'' = -100q + 99 \sin(t), \quad z(0) = 1, \quad z'(0) = 11 \quad t \in [0, 1000\pi] \quad (8.72)$$

με θεωρητική λύση την : $z(t) = \sin(t) + \sin(10t) + \cos(10t)$.

Η εκτιμώμενη συχνότητα είναι : $w = 10$ (βλέπε [301]).

Το δύο διαστάσεων πρόβλημα Kepler

Η τροχιά Kepler είναι η κίνηση ενός σώματος σε σχέση με ένα άλλο, ως παραβολή, έλλειψη ή υπερβολή, που σχηματίζει ένα δισδιάστατο τροχιακό επίπεδο σε τρισδιάστατο χώρο. Στο δισδιάστατο πρόβλημα Kepler θεωρούμε μόνο τη σημειακή βαρυτική έλξη δύο σωμάτων και καμία άλλη δύναμη. Προσπαθούμε να προσδιορίσουμε τις διαδρομές των δύο σωμάτων που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους μόνο λόγω της βαρύτητας. Μελετήσαμε το πρόβλημα αυτό ως εξής :

$$z'' = -\frac{z}{(z^2 + q^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad q'' = -\frac{q}{(z^2 + q^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (8.73)$$

όπου $z(0) = 1 - g$, $z'(0) = 0$, $q(0) = 0$, $q'(0) = \sqrt{\frac{1+g}{1-g}}$, $t \in [0, 1000\pi]$, και g είναι η εκκεντρότητα.

Η θεωρητική λύση είναι η :

$$z(t) = \cos(s) - g, \quad q(t) = \sqrt{1 - g^2} \sin(s) \quad (8.74)$$

όπου s είναι η λύση της εξίσωσης $s - g \sin(s) - t = 0$.

Για το πρόβλημα (βλέπε [302] και [301]) χρησιμοποιήσαμε ως συχνότητα $w =$

$$\frac{1}{(z^2 + q^2)^{\frac{3}{4}}}.$$

Μη γραμμική εξίσωση

Οι μη γραμμικές διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης συνήθως είναι ιδιαίτερα δύσκολο να επιλυθούν. Για δύο όμως συγκεκριμένες περιπτώσεις οι εξισώσεις δεύτερης τάξης μπορούν να μετασχηματιστούν σε εξισώσεις πρώτης τάξης. Στη πρώτη περίπτωση λείπει η συνάρτηση z ενώ έχουμε τη δεύτερη περίπτωση όταν η ανεξάρτητη μεταβλητή t απουσιάζει.

Στο πρόβλημα αυτό εμείς έχουμε :

$$z'' = -100z + \sin(z), \quad z(0) = 0, \quad z'(0) = 1 \quad t \in [0, 20\pi]. \quad (8.75)$$

Καθώς δεν έχουμε καμία πληροφορία σχετικά με τη θεωρητική λύση , χρησιμοποιήσαμε ως $z(20\pi) = 3.92823991 \cdot 10^{-4}$. Η εκτιμώμενη συχνότητα είναι : $\omega = 10$ (βλέπε [305]).

Σύγκριση νέας μεθόδου

Μελετήσαμε την ακρίβεια της νέας μεθόδου με κριτήριο εάν η θεωρητική λύση είναι εκ των προτέρων γνωστή ή συγκριτικά με το χρόνο εκτέλεσης της επεξεργαστικής μονάδας CPU . Σχετικά με τις μεθόδους που δοκιμάσαμε , η ακρίβεια εκφράστηκε με βάση το $-\log_{10}$.

Για την επίτευξη της αριθμητικής ολοκλήρωσης χρησιμοποιήσαμε τις ακόλουθες μεθόδους :

- The 8-step symmetric method of Quinlan-Tremaine [266] of algebraic order 8: "Q-T 8step (QT8)"
- The 8-step symmetric embedded predictor corrector method of Panopoulos and Simos (phase-fitted)[307] of algebraic order 10: "EPCM 8-step PF (PS)"
- The 8-step symmetric embedded predictor corrector method of Stasinou and Simos [318] of algebraic order 10 with vanished phase-lag and its first derivative : "EPCM SS (SS)"
- The new 8-step symmetric embedded predictor corrector method (8.45) of algebraic order 10 with vanished phase lag and its first and second derivatives: "New EPCM (New)"

Ο παρακάτω Πίνακας 1 δείχνει τις συγκρίσεις μεταξύ των μεθόδων : για όλα τα προβλήματα με τα οποία ασχοληθήκαμε. Από τον πίνακα αυτόν μπορεί κάποιος εύκολα να συμπεράνει πως η νέα συμμετρική ενσωματωμένη μέθοδος πρόβλεψης διόρθωσης (New EPCM (New))(8.45) είναι πιο αποτελεσματική από όλες τις υπόλοιπες μεθόδους.

TABLE 1. Comparison of the methods: New EPCM SS, EPCM PS and QT8 for all the problems solved

Test Problem	Method	Accuracy (digits)	CPU Time	Step Length	Maximum Error
Franco - Palacios	Q-T 8step (QT8)	11,2036804359	29,8741915	0,0271875	6,256328788E-12
	EPCM 8-step PF (PS)	12,4236061034	0,5460035	1,74	3,77045617E-13
	EPCM SS (SS)	13,0588258	0,5134543	1,92	8,73322E-14
	New EPCM (New)	13,8757419	0,4612321	1,92	1,33125E-14
Inhomogeneous Equation	Q-T 8step	8,9589182982	213,5029686	0,00375	1,09921261E-09
	EPCM 8-step PF (PS)	10,8810253743	16,0369028	0,06	1,315147991E-11
	EPCM SS (SS)	11,47720663	11,5166478	0,09	3,33268E-12
	New EPCM (New)	12,03978914	11,1782145	0,09	9,12454E-13
Stiefel - Bettis	Q-T 8step	8,3722458777	14,0244899	0,06	4,243792318E-09
	EPCM 8-step PF (PS)	9,320657776	4,1652267	0,24	4,77905715E-10
	EPCM SS (SS)	10,27854075	3,3854661	0,36	5,26574E-11
	New EPCM (New)	11,05822901	3,1543254	0,36	8,74523E-12
N-body Problem tend = 10 ⁵ earth days	Q-T 8step	9,0458671875	2,028013	20	8,997727008E-10
	EPCM 8-step PF (PS)	9,5091403216	1,3104084	40	3,096418677E-10
	EPCM SS (SS)	10,31976303	1,0763452	50	4,78891E-11
	New EPCM (New)	11,10486487	1,0532174	50	7,85480E-12
Nonlinear Equation	Q-T 8step	6,8509369573	1,1388073	0,015625	1,409493387E-07
	EPCM 8-step PF (PS)	8,8850973876	0,8112052	0,03125	1,302874585E-09
	EPCM SS (SS)	10,46624507	0,7234561	0,0625	3,41787E-11
	New EPCM (New)	11,16319899	0,6043781	0,0625	6,86754E-12
Two-dimensional Kepler Problem e=0.0549	Q-T 8step	8,5940137099	60,3879871	0,016	2,546749855E-09
	EPCM 8-step PF (PS)	9,6925220388	35,6306284	0,032	2,029915507E-10
	EPCM SS (SS)	10,34363614	32,5549112	0,064	4,53277E-11
	New EPCM (New)	11,14730194	29,4233541	0,064	7,12358E-12
Duffing's Equation	Q-T 8step	10,6152367271	14,1492907	0,06	2,425287748E-11
	EPCM 8-step PF (PS)	10,4673623699	9,0168578	0,12	3,409083432E-11
	EPCM SS (SS)	10,62311092	8,1126758	0,24	2,38171E-11
	New EPCM (New)	11,12882103	7,1533276	0,48	7,43325E-12
Schrödinger's Equation E=989.701916	Q-T 8step	8,4273767085	1,7004109	0,0025	3,737862242E-09
	EPCM 8-step PF (PS)	8,5851442058	1,248008	0,005	2,599296334E-09
	EPCM SS (SS)	8,780627696	1,1921337	0,01	1,65719E-09
	New EPCM (New)	9,198969154	0,7345672	0,02	6,32457E-10

Πίνακας 8.1: Σύγκριση όλων των προβλημάτων που επιλύθηκαν με βάση το μήκος του βήματος και τον χρόνο CPU

Συγκεκριμένα στο τροχιακό πρόβλημα των Franco , Palacios , παρατηρούμε πως η νέα μας μέθοδος (8.45) έχει το μικρότερο από τα μέγιστα σφάλματα σε σχέση με τις άλλες δύο μεθόδους και μάλιστα αρκετά μικρότερο και από την μέθοδο (7.24). Στο πρόβλημα της Μη Ομοιογενής Εξίσωσης η ακρίβεια των ψηφίων είναι μεγαλύτερη με την νέα μέθοδο (New EPCM (New)) .

Το μήκος του βήματος ολοκλήρωσης της νέας μεθόδου (8.45) στο πρόβλημα των Stiefel-Bettis είναι εξαπλάσιο σε σχέση με το αντίστοιχο μήκος βήματος της πολυβηματικής γραμμικής μεθόδου των Quinlan - Tremaine . Ο χρόνος στο πρόβλημα των N-σωμάτων είναι ακόμη πιο βελτιωμένος συγκριτικά με την μέθοδο EPCM 8 -step PF (PS) .

Από τις τέσσερις μεθόδους όπου έγινε η σύγκριση , η νέα μέθοδος (8.45) στο πρόβλημα της Μη Γραμμικής Εξίσωσης έχει την μεγαλύτερη ακρίβεια ψηφίων. Το μήκος του βήματος ολοκλήρωσης της νέας μεθόδου (8.45) στην εξίσωση Schrödinger είναι οκταπλάσιο σε σχέση με το αντίστοιχο μήκος βήματος της πολυβηματικής γραμμικής μεθόδου των Quinlan - Tremaine .

Στο πρόβλημα της εξίσωσης Duffing ο χρόνος είναι σχεδόν ο μισός συγκριτικά με την μέθοδο Q-T 8step . Τέλος στο πρόβλημα των δύο διαστάσεων Kepler η νέα μέθοδος (8.45) έχει το αρκετά μικρότερο από τα μέγιστα σφάλματα σε σχέση με τις άλλες τρεις μεθόδους.

Επισημαίνουμε λοιπόν πως η νέα μέθοδος (New EPCM (New))(8.45) έχει μεγαλύτερη ακρίβεια ψηφίων , ο χρόνο του CPU είναι μικρότερος συγκριτικά με τις άλλες τρεις μεθόδους , το βήμα είναι μεγαλύτερο από τα βήματα που χρησιμοποιούν οι άλλες μέθοδοι και επίσης σε όλα τα προβλήματα το μέγιστο σφάλμα ήταν το μικρότερο σε σχέση με τις άλλες τρεις μεθόδους.

Συμπεράσματα

Στην εργασία μας αυτή , μελετήσαμε τη διαδικασία ανάπτυξης ενός νέου ζεύ-γους μεθόδων πρόβλεψης και διόρθωσης για την αριθμητική ολοκλήρωση προβλημάτων αρχικών τιμών , δεύτερης τάξης με περιοδικές ή ταλαντωτικές λύσεις. Παρουσιάσαμε επίσης την ανάλυση που κάναμε γι' αυτή τη νέα μέθοδο (8.45) σε σύγκριση με τρεις άλλες μεθόδους που εφαρμόσαμε στα οκτώ προβλήματα όπως αυτά αναφέρονται στην αντίστοιχη ενότητα.

Χαρακτηριστικό της νέας αυτής μεθόδου είναι ο τρόπος με τον οποίο η μέθοδος πρόβλεψης ενσωματώνεται πλήρως στην μέθοδο διόρθωσης , για το λόγο αυτό και η νέα αυτή μέθοδος ονομάστηκε ως ενσωματωμένη μέθοδος πρόβλεψης-διόρθωσης. Η νέα μέθοδος μπορεί να εφαρμοστεί σε προβλήματα αρχικών τιμών με ταλαντωτικές λύσεις , για τις οποίες η συχνότητα είναι γνωστή από την αρχή ή έστω μπορεί να εκτιμηθεί. Μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για την αριθμητική λύση προβλημάτων με περιοδικές ή ταλαντωτικές λύσεις όπως η εξίσωση *Schrödinger* ή και τροχιακά προβλήματα.

Μετά την ανάλυση αυτής της νέας μεθόδου , είναι εύκολο να συμπεραίνουμε πως η μέθοδος (8.45) είναι η πιο αποτελεσματική σε σχέση με τις υπόλοιπες μεθόδους με τις οποίες έγινε η σύγκριση και επίσης παρατηρεί κανείς από τον Πίνακα 5 ότι με την νέα μέθοδο έχει μειωθεί σημαντικά το υπολογιστικό κόστος.

Συμπερασματικά , αναφέρουμε ότι η νέα μέθοδος (8.45) είναι μια συμμετρική μέθοδος οκτώ βημάτων , δέκατης αλγεβρικής τάξης , με άπειρη τάξη **phase-lag**,με εξαφανισμένες την πρώτη και δεύτερη παράγωγο του **phase-lag** και η οποία έχει ως διάστημα περιοδικότητας το διάστημα $(0, 6.235009)$.

Ανοιχτά προβλήματα

Ανοιχτά προβλήματα που απαιτούν περαιτέρω ερευνητική δραστηριότητα σε σχέση με την έρευνα που έχει γίνει μέχρι σήμερα είναι :

1. Η βελτιστοποίηση των τύπων για τον υπολογισμό της φάσης υστέρησης των άμεσων αλλά και έμμεσων τύπων πρόβλεψης και διόρθωσης πολυβηματικών συμμετρικών μεθόδων καθώς και ανάπτυξη νέων τύπων και θεωρημάτων.
2. Κατασκευή υψηλής αλγεβρικής τάξης, άμεσων αλλά και έμμεσων πολυβηματικών συμμετρικών μεθόδων με την ιδιότητα του **minimal phase - lag**.
3. Ανάπτυξη υψηλής τάξης άμεσων αλλά και έμμεσων πολυβηματικών συμμετρικών μεθόδων με την ιδιότητα της προσαρμοσμένης φάσης (**phase-phitted**).

4. Κατασκευή υψηλής αλγεβρικής τάξης συμμετρικών γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων πρόβλεψης και διόρθωσης με περισσότερα από δύο στάδια με την ιδιότητα του **minimal phase - lag**.
5. Ανάπτυξη υψηλής τάξης συμμετρικών γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων πρόβλεψης και διόρθωσης με περισσότερα από δύο στάδια με την ιδιότητα της προσαρμοσμένης φάσης (**phase-phitted**).
6. Παραγωγή υψηλής τάξης εκθετικά προσαρμοσμένων συμμετρικών γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων.
7. Ανάπτυξη υψηλής τάξης τριγωνομετρικά προσαρμοσμένων συμμετρικών γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων.
8. Κατασκευή κατάλληλων γεννητόρων για την παραγωγή νέων άμεσων αλλά και έμμεσων τύπων πρόβλεψης και διόρθωσης συμμετρικών γραμμικών πολυβηματικών μεθόδων ώστε να επιτυγχάνουν το μέγιστο διάστημα περιοδικότητας με το μέγιστο βήμα ολοκλήρωσης.

Bibliography

- [1] Lambert J.D., Watson I.A., (1976), "Symmetric multistep methods for periodic initial value problems", *J.Inst.Math.Appl.*, 18:189-202.

- [2] H M ANTIA "*Numerical Methods for Scientists and Engineers*" Tata McGraw Hill Publishing Company Limited : 520-648, 1991.

- [3] Konstantinos N Anagnostopoulos , Computational Physics
<https://repository.kallipos.gr/handle/11419/999>

- [4] Brock, E.J. Murray, (1952), "The use of exponential sums in the step by step integration", *Math. Table Aids Comput.*, 6:6378.

- [5] Dennis S.C.R.,(1960),"The numerical intgration of ordinary differential equations possessing exponential type solutions",Proc.Cambridge Phil.Soc.,56:240-246.
- [6] Urabe M.,Mise S.,(1955),"A method of numerical itegration of analytic differential equations",J.Sci.Hiroshima,Unive,Ser.A,19:307-320.
- [7] Gautschi W.,(1961),"Numerical integration of ordinary differential equations based on trigonometric polynomials",Numerische Math.,3:381-397.
- [8] Lyche T.,(1972),"Chebyshevian multistep methods for ordinary differential equations",Numer.Math.,10:65-75.
- [9] Salzer H.E.,(1962),"Trigonometric interpolation and predictor corrector formulas for numerical integration",ZAMM.42:403-412.
- [10] Stiefel E.,Bettis D.G.,(1969), " Stabilization of Cowell's method " ,Numer.Math.,13:154-175.
- [11] Bettis D.G.,(1970),"Numerical itegration of products of Fourier and ordinary polynomials",Numerische Mathematik.,14:421-434.
- [12] Raptis A.D.,Allison A.C.,(1978),"Exponential fitting methdos for the numerical solution of the Schrödinger equation",Comput.Phys.C.14:1-5.
- [13] Henrici P.,(1982),"Essentials in Numerical Analysis",John Wiley
- [14] Vanden Berghe G.,De Meyer H.,Vanthournout J.,(1990), " A modified Nymerov integration method for 2nd order periodic initial value problems " ,Int.J.Comp.Math,32:233-242.
-

- [15] Ixaru I.Gr.,Rizea M.,(1908),"A Numerov like scheme for the numerical solution of the Schrödinger equation in the deep continuum spectrum of energies",Comput.Phys.Commun,19:23-27.
- [16] Raptis A.D.,(1981),"On the numerical solution of the Schrödinger equation",Comput.Phys.Commun,24:1-4.
- [17] Raptis A.D.,(1982),"Two step mehtods for the numerical solution of the Schrödinger equation",Computing,28:373-378.
- [18] Raptis A.D.,(1983),"Exponentially fitted solutions of the eigevale Schrödinger equation with automatic error control",Comput.Phys.Commun.,28:427-431.
- [19] Raptis A.D.,Cash J.R.,(1987),"Exponential and Bessel fitting methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",Comput.Phys.Commun.,44:95-13.
- [20] Ixaru L.GR.,Riza M.,(1987),"Numerov method maximally adapted to the Schrödinger equation",J.Comput.Phys.,73:306-324.
- [21] Ixaru.L.Gr.,Beceanu S.,(1987),"Coleman method maximally adapted to the Schrödinger equation",Comput.Phys.Commun.,44:11-20.
- [22] Cash J.R.,Raptis A.D.,T.E.Simos,(1990),"A sixth order exponentially fitted method for the numerical solution of the radial Schrödinger equation",J.Comput.Phys.,91:413-423.
- [23] Simos T.E.,(1990),"A four step mehtod for the numerical solution of the Schrödinger equation",J.Comp.Appl.Math.,30:251-255.
-

- [24] Simos T.E.,(1991),"Some new four step exponential fitting methods for the numerical solution of the radial Schrödinger equation",IMA J.Numer.Anal.,11:347-356.
- [25] Simos T.E.,(1992),"Exponential fitted methods for the numerical integration of the Schrödinger equation",Comput.Phys.Commun.,71:32-38.
- [26] Simos T.E.,(1996),"Exponential fitted methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",J.Comp.Math.,14:120-134.
- [27] Simos T.E.,(1993),"Error analysis of exponential fitted methods for the numerical solution of the one dimensional Schrödinger equation " Phys.Letters A,177:345-350.
- [28] Simos T.E.,(1997),"An accurate method for the numerical solution of the Schrödinger equation",Mod.Phys.Lett.A,12:1981-1900.
- [29] Simos T.E.,(1997),"An exponentially fitted method for the numerical solution of the Schrödinger equation",J.Chem.Inf.Comp.Sci.,37:343-348.
- [30] Simos T.E.,(1997),"A simple accurate method for the numerical solution of the Schrödinger equation",Helv.Phys.Acta,70:781-792.
- [31] Simos T.E.,(1995) , " A family of the four step exponentially fitted predictor corrector methods for the numerical integration of the Schrödinger equation",J.Comp.Appl.Math.,58:337-344.
- [32] Simos T.E.,(1998),"An accurate exponentially fitted four step method for the numerical solution of the radial Schrödinger equation" Mol.Simulation,20:285-301.
-

- [33] Simos T.E.,(1998),"An eighth order exponentially fitted method for the numerical integration of the Schrödinger equation" *Comput.Chem.*,22:467-489.
- [34] Simos T.E.,(1998),"An accurate exponentially fitted explicit four step method for the numerical solution of the radial Schrödinger equation" *Int.J.Mod.Phys.A*,13:2613-2626.
- [35] Simos T.E.,(1999),"explicit exponentially fitted methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Appl.Math.Comp.*,98:199-288.
- [36] Simos T.E.,(1998),"An eighth order exponentially fitted method for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Int.J.Mod.Phys.C*,9:271-288.
- [37] Simos T.E.,(1998),"New embedded explicit methods with minimal phase lag for the numerical integration of the Schrödinger equation" *Comput.Chem.*,22:433-440.
- [38] Simos T.E.,(2000),"Chemical Modeling Applications and Theory", Vol.1,p.38,Hinchliffe,Specialist Periodical Reports,The Royal Society of Chemistry,Cambridge.
- [39] Simos T.E.,Mitsou G.V.,(1994),"A family of four step exponential fitted methods for the numerical integration of the radial Schrödinger equation",*Comput.Math.Appl.*,28:41-50.
- [40] Thomas R.M.,Simos T.E.,Mitsou G.V.,(1996),"A family of Numerov type exponentially fitted predictor corrector methods for the numerical integration of the radial Schrödinger equation",*J.Comp.Appl.Math.*,67:225-270.
-

- [41] Simos T.E.,Williams P.S.,(1997),"A family of Numerov type exponentially fitted methods for the numerical integration of the Schrödinger equation",*Comput.Chem.*,21:403-417.
- [42] Thomas R.M.,Simos T.E.,(1997),"A family of hybrid exponentially fitted predictor corrector methods for the numerical integration of the radial Schrödinger equation",*J.Comp.Appl.Math.*,87:215-226.
- [43] Ixaru L.Gr.,(1997),"Operations on oscillatory functions",*Comput.Phys.Commun.*,105:1-19.
- [44] Ixaru L.Gr.,Meyer H.De.,Vanden Berghe G.,Van Daele M.,(1997),"EXPFIT4 A FORTRAN program for the numerical solution of systems of nonlinear second order initial value problems"*Comput.Phys.Commun.*,100:71-80.
- [45] Ixaru L.Gr.,Vanden Berghe G.,De Meyer H.,Van Daele M.,(1997),"Four step exponential fitted methods for nonlinear physical problems"*Comput.Phys.Commun.*,100:56-70.
- [46] Coleman J.P.,Ixaru L.Gr.,(1996),"P stability and exponential fitting methods of $y''=f(x,y)$ ",*IMA J.Numer.Anal.*,16:179-199.
- [47] Raptis A.D.,Simos T.E.,(1991),"A four step phase fitted method of the numerical integration of second order initial value problems",*BIT*,31:160-168.
- [48] Ananthkrishnaiah U.,(1982),"Adaptive methods for periodic initial value problems of second order differential equations" *J.Comp.Appl.Math.*,8:101-104.
- [49] Tang C.,Wang WP.,Yan HQ.,et al.,(2006), " High order predictor corrector of exponential fitting for the N Body problems",*Journal of Computational Physics.*,214(2):505-520.
-

- [50] Van De Vyver H.,(2006),"A fourth order symplectic exponentially fitted integrator",*Computer Physics Communication* 174,(4):255-262.
- [51] Simos T.E.,(2005),"A P stable exponentially fitted method for the numerical integration of the Schrödinger equation",*Molecular Simulation* 31(14-15):1095-1100.
- [52] Van De Vyver H.,(2005),"Stability and phase lag analysis of explicit Runge Kutta methods with variable coefficients for oscillatory problems",*Computer Physics Communication* 173(3):115-130.
- [53] Tocino A.,Vigo-Aguaiar J.,(2005),"symplectic conditions for exponential fitting Runge Kutta Nystrom methods",*Mathematical and Computer Modelling* 42(7-8):873-876.
- [54] Anastassi ZA.,Simos T.E.,(2005),"A new trigonometrically fitted fifth order Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Mathematical and Computer Modeling* 42(7-8):877-886.
- [55] Psihoyios G.,Simos T.E.,(2005),"A new trigonometrically fitted sixth algebraic order P-C algorithm for the numerical solution of the radial Schrödinger equation",*Mathematical and Computer Modeling* 42(7-8):887-902.
- [56] Sakas D.P.,Simos T.E.,(2005),"A fifth algebraic order trigonometrically fitted modified Runge Kutta Zonneveld method of the numerical solution of orbital problems",*Mathematical and Computer Modeling* 42(7-8):903-920.
- [57] Tang C.,Zhang F.,Yan HQ.,et al.,(2006), " High order predictor corrector of exponential fitting for the N Body problems",*Journal of Computational Physics*,214(2):505-520.
-

- [58] Simos T.E.,(2005),"A family of fifth algebraic order trigonometrically fitted Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Computational Materials Science* 34(4):342-354.
- [59] Van De Vyver H.,(2005),"Frequency evaluation for exponentially fitted Runge Kutta methods",*Journal of Comp.and Applied Mathematics* 184(2):442-463.
- [60] Vigo Aguiar J.,Simos T.E.,(2005),"Review of multistep methods of the numerical solution of the radial Schrödinger equation",*International Journal of Quantum Chemistry* 103(3):278-290.
- [61] Van de Vyver H.,(2005),"A symplectic exponentially fitted modified Runge Kutta Nistrom method for the numerical integration of orbital problems",*New Astronomy*,10(4):261-269.
- [62] Anastassi ZA.,Simos T.E.,(2005),"A trigonometrically fitted Runge Kutta method for the numerical solution of orbital problems",*New Astronomy*,10(4):301-309.
- [63] Van Daele M.,Vanden Berghe G.,Vande Vyver H.,(2005),"Exponentially fitted quadrature rules of Gauss type for oscillatory integrands",*Applied Numerical Mathematics*,53(2-4):509-526.
- [64] Anastassi ZA.,Simos T.E.,(2005),"Trigonometrically fitted Runge Kutta method for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Journal of Mathem.Chemistry*,37(3):281-293.
- [65] Van De Vyver H.,(2005),"Comparison of some special optimized fourth order Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Computer Physics Commun.*,166(2):109-122.
-

- [66] Jain M.K., Jain R.K., Ananthkrishnaiah U., (1979), "P-stable methods for periodic initial value problems for second order differential equations" BIT., 19:347-355.
- [67] Sommeijer B.P., Van der Houwen J., Neta B., (1986), "Symmetrical linear multistep methods for second order differential equations with periodic solutions", Appl. Numer. Math., 2:69-77.
- [68] Van der Houwen P., Sommeijer B.P., (1984), "Linear multistep methods with reduced truncation error for periodic initial value problems", IMA J. Numer. Anal., 4:479-489.
- [69] Gonzalez-Pinto S., Perez-Rodriguez S., Rojas-Bello R., (2006), "Efficient iterations for Gauss methods on second order problems", J. Comp. And Applied Mathem., 189(1-2):80-97.
- [70] Li QH., Wu XY., (2005), "A class of two step explicit methods for periodic IVPs", Applied Mathematics And Computation, 171(2):1239-1252.
- [71] Van de Vyver H., (2006), "On the generation of P stable exponentially fitted Runge Kutta Nystrom methods", Journal of Comp. And Applied Mathematics, 188(2):309-318.
- [72] Dai Ym., Wang ZC., Wu DM., (2006), "A four step trigonometric fitted P stable Obrechhoff method for periodic initial value problems" J. Comp. And Applied Mathem., 187(2):192-201.
- [73] Wang ZC., (2005), "A new trigonometrically fitting technique to construct a symmetric linear multistep method for the numerical solution of an orbital problem", New Astronomy, 11(2):90-102.
-

- [74] Neta B.,(2005),"P stable symmetric super implicit methods for periodic initial value problems",Computers & Mathematics With Applications,50 (5-6):701-705.
- [75] Wang ZC.,(2005),"P stable linear symmetric multistep methods for periodic initial value problems",Computer Physics Communications, 171(3):162-174.
- [76] Wang ZC.,Wang Y.,(2005),"A new kind of high efficient and high accurate P stable Obrechhoff three step method for periodic initial value problems",Computer Physics Communications,171(2):79-92.
- [77] Wang ZC.,Chen QM.,(2005) , " A trigonometrically fitted one step method with multi derivative for the numerical solution to the one dimensional Schrödinger equation",Comp.Phys.Commun,170(1):49-64.
- [78] Wang Zc.,Zhao DY.,Dai YM.,et al.,(2005),"An improved trigonometrically fitted P stable Obrechhoff method for periodic initial value problems",Proceedings of The Royal Society A Mathematical Physical And Engineering Sciences,461(2058):1693-1658.
- [79] Zhao DY.,Wang ZC.,Dai YM.,(2005),"Importance of the first order derivative formula in the Obrechhoff method",Computer Physics Communications,167(2):65-75.
- [80] Wang ZC.,(2005),"A new effective algorithm for the resonant state of a Schrödinger equation",Computer Physics Communications,167(1):1-6.
- [81] Franco JM.,Comez I.,(2003),"Fourth order symmetric DIRK methods for periodic stiff problems",Numerical Algorithms,32(2-4):317-336.
-

- [82] Coleman JP,(2003),"Order conditions for a class of two step methods for $y'=f(x,y)$ ",*Ima Journal Of Numerical Analysis*,23(2):197-220.
- [83] Paternoster B.,(2002),"Two step Runge Kutta Nystrom methods for $y'=f(x,y)$ and P stability",*Lecture Notes in Computer Science*,2331:459-466.
- [84] Van der Houwen PJ.,Wubs FW.,(1987),"The method of lines and exponential fitting",*Int.J.Numer.Math.Engrg.*,24:557-567.
- [85] Simos T.E.,(1999),"P stable exponentially fitted methods for the numerical integration of the Schrödinger equation",*J.Comput.Phys.*,148:135-321.
- [86] Simos T.E.,(2009),"P stability , Trigonometric fitting and the numerical solution of the radial Schrödinger equation",*Computer Physics Communications*,180(7):1072-1085.
- [87] Simos T.E.,Raptis A.D.,(1992),"A fourth order Bessel fitting method for the numerical solution of the radial Schrödinger equation"
J.Comp.Appl.Math.,43:313-322.
- [88] Simos T.E.,Williams P.S.,(1997),"Bessel and Neumann fitted methods for the numerical solution of the radial Schrödinger equation"
Comput.Chem.,21:175-179.
- [89] Simos T.E.,(1998),"explicit esith order Bessel and Neumann fitted method for the numerical solution of the Schrödinger equation"
Comput.Phys.,12:635-640.
- [90] Simos T.E.,(1999),"A sixth order Bessel and Neumann fitted method for the numerical for the numerical solution of the Schrödinger equation"
Mol.Simulation,21:191-204.
-

- [91] Simos T.E.,(1991),"A two step method with phase lag of order infinity for the numerical integration of second order periodic initial value problems",*Int.J.Comp.Math.*,39:135-140.
- [92] Simos T.E.,(1992),"Two step almost P stable complete in phase methods of the numerical integration of second order periodic initial value problems",*Int.J.Comp.Math.*,46:77-85.
- [93] Simos T.E.,(1992),"An explicit almost P stable two step method with phase lag of order infinity for the numerical integration of second order periodic initial value problems",*Appl.Math.Comput.*,49:261-268.
- [94] Simos T.E.,(1993),"A family of two step almost P stable methods with phase lag of order infinity for the numerical integration of second order periodic initial value problems",*Jpn.J.Appl.Math.*,10:289-297.
- [95] Simos T.E.,(1993),"A periodic corrector phase fitted method for $y''=f(x,y)$ ",*Math.Comp.Simulation*,35:153-159.
- [96] Simos T.E.,(1994),"An explicit four step phase fitted method of the numerical integration of second order initial value problems"
J.Comp.Appl.Math.,55:125-133.
- [97] Simos T.E.,(1995),"Predictor corrector phase fitted methods for $y''=f(x,y)$ and an application to the Schrödinger equation" *Int.J.Quantum Chem.*,53:473-483.
- [98] Simos T.E.,(1995),"Some low order two step almost P stable methods with phase lag of order infinity for the numerical integration of the radial Schrödinger equation",*Int.J.Mod.Phys.A*,10:2431-2438.
-

- [99] Hajj F.Y.,(1982),"Eigevalues of the two dimensional Schrödinger equation",J.Phys.B:At.Mol.Phys.,15:683-692.
- [100] Konguetsof A.,Avdelas G.,Simos T.E.,(1999),"A generalization of Numerov's method for the numerical solution fo the Schrödinger equation in two dimensions",International Conference on Parallel and Distributed Processing techniques and Applications,ed H.Arabnia(PDPTA'99).Las Vegas,Nevada,USA.
- [101] Kalogiratou Z.,Simos T.E.,(2000),"A P stable exponentially fitted method for the numerical integration of the Schrödinger equation" Appl.Math.Comput.,112:99-112.
- [102] Avdelas G.,Kefalidis E.,Simos T.E.,(2001),"New P stable exponentially fitted for the numerical solution of the Schrödinger equation" Comput.Mater.Sc.,21:301-391.
- [103] Simos T.E.,Williams P.S.,(2000),"A P stable hybrid exponentially fitted method for the numerical integration of the Schrödinger equation" Comput.Phys.Com.,131:109-119.
- [104] Vigo-Aguaiair J.,Simos T.E.,(2001),"A family of P stable eight algebraic order methods with exponential fitting facilities" J.Math.Chem.,29:177-189.
- [105] Simos T.E.,(2000),"Simple and accurate explicit Bessel and Neumann fitted methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",Int.J.Mod.Phys.C.,11:79-89.
- [106] Simos T.E.,(2000),"A new explicit Bessel and Nuemann fitted eighth algebraic order method for the numerical solution of the Schrödinger equation",J.Math.Chem.,27:343-356.
-

- [107] Simos T.E.,(2001), "Bessel and Nuemann Fitted Methods for the Numerical Solution of the Schrödinger equation" *Comput.Math.Appl.*,42:833-847.
- [108] Simos T.E.,(1999), "Dissipative high phase lag order Numerov type methods for the numerical solution of the Schrödinger equation" *Comput.Chem.*,23:439-446.
- [109] Simos T.E.,Williams P.S.,(2001), "New insights in the development of Numerov type methods with minimal phase lag for the numerical solution of the Schrödinger equation", *Comput.Chem.*,25:77-82.
- [110] Tsitouras Ch.,(1999), "A high order explicit Runge Kutta pair for the initial value problems with oscillating solutions" *Comput.Math.Appl.*,37:Iss.6,31-36.
- [111] Tsitouras CH.,(2001), "Dissipative high phase lag order method" *Appl.Math.Comput.*,177:35-43.
- [112] Papageorgiou C.D.,Tsitouras Ch.,Famelis I.Th.,(2001), "Explicit Numerov type methods for second order IVPs with oscillating solutions" *Int.J.Mod.Phys.C.*,12:657-666.
- [113] Konguetsof A.,Simos T.E.,(2001), "On the construction of exponentially fitted methods for the numerical solution of the Schrödinger equation", *J.Comp.Meth.Sci.Engrg.*,1:143.
- [114] Avdelas G.,Simos T.E.,(2000), "Dissipative high phase lag order Numerov type methods for the numerical solution of the Schrödinger equation", *Phys.Rev.E*,62:1375-1381.
-

- [115] Simos T.E.,Williams P.S.,(2001),"Dissipative exponentially fitted methods for the numerical solution of the Schrödinger equation" *Comput.Chem.*,25:261-273.
- [116] Simos T.E.,(2001),"A dissipative exponentially fitted method for the numerical solution of the Schrödinger equation" *J.Chem.Inf.Comp.Sci.*,41:909-917.
- [117] Huang CM.,Chang QS.,(2004),"Dissipativity of multistep Runger Kutta methods for dynamical systems with delays",*Mathematical And Computer Modelling*,40(11-12):1285-1296.
- [118] Simos T.E.,(2004),"Dissipative trigonometrically fitted methods for linear second order IVPs with oscillating solution",*Applied Mathematics Letters*,17(5):601-607.
- [119] Simos T.E.,(2004),"Dissipative trigonometrically fotted methods for the numerical solution of orbital problems",*New Astronomy*,9(1):59-68.
- [120] Vigo Aguaiar J.,Ramos H.,(2003),"Dissipative Chebyshev exmponen-tial fitted methods for numerical solution of second order differential equations",*J.Comput.Appl.Math.*,158(1):187-211.
- [121] Williams P.S.,Simos T.E.,(2003),"A new family of exponentially fitted methods",*Math.Comput.Modeling*,38(5-6):571-584.
- [122] Huang CM.,Chang QS.,Xiao AG.,(2003),"B convergence of general linear methods for stiff problems",*Applied Numerical Math.*,47(1):31-44.
- [123] Simos T.E.,Vigo-Aguaiar G.,(2003),"A dissipative exponentially fitted method for the numerical solution of the Schrödinger equation and related problems",*Computer Physics Communications*,152(3):274-294.
-

- [124] Simos T.E.,(2002),"Dissipative trigonometrically fitted methods for second order IVPs with oscillating solution",*International Journal of Modern Physics*,13(10):1333-1345.
- [125] Simos T.E.,(2002),"Chemical Modelling Applications and Theory",Vol.2 p.171,Hinchliffe,Specialist Periodical Reports,The Royal Society of Chemistry,Cambridge.
- [126] Dahlquist G.G.,(1956),"Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations",*Math.Scand.*,4:33-53.
- [127] Hairer E.,(1979),"Unconditionally stable methods for second order differential equations",*Numer.Math.*,32:373-379.
- [128] Costabile F,Costabile C.,(1982),"Two step fourth order P stable methods for second order differential equations",*BIT*,22:384-386.
- [129] Cash J.R.,(1981),"High order P stable formulas for the numerical integration of periodic initial value problems",*Numer.Math.*,37:355-370.
- [130] Cash J.R.,(1984),"Efficient P stable methods for periodic initial value problems",*BIT*,24:284-252.
- [131] Chawla M.M.,(1981),"Two step fourth order P stable methods for second order differential equations",*BIT*,21:190-193.
- [132] Chawla M.M.,(1983),"Unconditionally stable Numerov type methods for second order differential equations",*BIT*,23:541-542.
- [133] Chawla M.M.,(1984),"Numerov made explicit has better stability"
BIT,24:117-118.
-

- [134] Chawla M.M., Rao P.S., (1984), "A Numerov type method with minimal phase lag for the integration of second order periodic initial value problems", *J.Comp.Appl.Math.*, 11:277-281.
- [135] Chawla M.M., Rao P.S., (1985), "High accuracy P stable methods for $y'=f(t,y)$ ", *IMA J.Numer.Anal.*, 5:215-220.
- [136] Chawla M.M., Rao P.S., (1986), "A Numerov type method with minimal phase lag for the integration of second order periodic initial value problems II Explicit method", *J.Comp.Appl.Math.*, 15:329-337.
- [137] Chawla M.M., Rao P.S., Neta B., (1986), "Two step fourth order P stable methods with phase lag of order six for $y'=f(t,y)$ " *J.Comp.Appl.Math.*, 16:233-236.
- [138] Chawla M.M., Rao P.S., (1987), "An explicit sixth order method with phase lag of order eight for $y'=f(t,y)$ ", *J.Comp.Appl.Math.*, 16:365-368.
- [139] Voss D.A., Serbin S.M., (1988), "Two step hybrid methods for periodic initial value problems", *Comput.Math.Appl.*, 15:203-208.
- [140] Thomas R.M., (1984), "Phase properties of high order, almost P stable formulas", *BIT*, 24:225-238.
- [141] Thomas R.M., (1985), "Efficient fourth order P-stable formulae", UMIST Numerical Analysis Report No 103, University of Manchester.
- [142] Thomas R.M., (1987), "Efficient fourth order P stable formulas" *BIT*, 27:599-614.
- [143] Thomas R.M., (1988), "Efficient sixth order methods for nonlinear oscillation problems", *BIT*, 28:898-903.
-

- [144] Coleman J.P.,(1988),"Characterization of a class of P stable methods or differential equations of second order",*J.Comp.Appl.Math.*,22:137-141.
- [145] Brusa L.,Nigro L.,(1980),"A one step method for direct integration of structural dynamic equations",*Int.J.Numer.Mehtods Engrg.*,15:685-699.
- [146] Gladwell I.,Thomas R.M.,(1983),"Damping and phase analysis for some methods for solving second order initial ordinary differential equations",*Int.J.Numer.Meth.Engrg.*,19:495-503.
- [147] Van der Houwen P.J.,Sommeijer B.P.,(1987),"Predictor corrector methods for periodic second order initial value problems",*IMA J.Numer.Anal.* 7:407-422.
- [148] Franco J.M.,(2006),"A class of explicit two step hybrid methods for second order IVPs",*J.Comput.Appl.Math.*,187(1):41-57.
- [149] Sakas D.P.,Simos T.E.,(2005),"Trigonometrically fitted multiderivative methods for the numerical solution of the radial Schrödinger equation",*Math Communications In Mathematical And On Computer Chemistry*,53(2):299-320.
- [150] Van de Vyver H.,(2005), " A Runge Kutta Nystrom pair for the numerical integration of perturbed oscillators" *Computer Physics Communications*,167(2):129-142.
- [151] Kalogiratu Z.,Monovasilis T.,Simos T.E.,(2005),"Numerical solution of the two dimensional time independent Schrödinger equation with Numerov type methods",*Journal Of Mathematical Chemistry*,37(3):271-279.
-

- [152] Simos T.E.,(2004),"Exponentially fitted multiderivative methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Journal Of Mathematical Chemistry*,36(1):13-27.
- [153] Simos T.E.,(2003),"Closed Newton Cotes trigonometrically fitted formulae for long time integration", *International Journal of Modern Physics*,14(8):1061-1074.
- [154] Simos T.E.,(2004),"Multiderivative methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",*MATCH Communications In Mathematical and in Computer Chemistry*.
- [155] Berghe G.V.,Van Daele A.,Vyver H.V., (2003) , " Exponential fitted Runge Kutta methods of collocation type : fixed of variable knot points?" *Journal Of Computational And Applied Mathematics*,159(2):217-239.
- [156] Konguetsof A.,Simos T.E.,(2003),"A generator of hybrid symmetric four step methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Journal Of Computational And Applied Mathematics*,158(2):93-106.
- [157] "A family of trigonometrically fitted symmetric methods for the efficient solution of the Schrödinger equation and related problems",*Journal Of Mathematical Chemistry*,34(1-2):39-58.
- [158] Khan I.R.,Ohba R.,(2003),"Taylor series based finite difference approximations of higher degree derivatives",*Journal Of Computational And Applied Mathematics*,154(1):115-124.
- [159] Tsitouras C.,(2003),"Explicit Numerov type methods with reduced number of stages",*Computers & Mathematics With Applications*,45(1-3):37-42.
-

- [160] Coleman J.P.,(1989),"Numerical methods for $y'=f(x,y)$ via rational approximations for the cosine",*IMA J.Numer.Anal.*,9:145-165.
- [161] Meneuette M.,(1991),"Chawla Numerov method revisited"
D.Phil.Thesis,University of Oxford.
- [162] Twizell E.H.,Khaliq A.Q.,(1984),"Multiderivative methods for periodic initial value problems",*SIAM J.Numer.Anal.*,21:11-122.
- [163] Ananthakrishnaiah U.,(1987),"P stable Obrechhoff methods with minimal phase lag or periodic initial value problems",*Math.Comp.*,49:533-559.
- [164] Van der Houwen P.J.,Sommeijer B.P.,(1987),"Explicit Runge Kutta Nystrom method with reduced phase errors for computing oscillating solutions",*SIAM J.Numer.Anal.*,24:595-617.
- [165] Van der Houwen P.J.,Sommeijer B.P.,(1989),"Phase lag analysis of implicit Runge Kutta Nystrom methods",*SIAM J.Numer.Anal.*,26:214-229).
- [166] Van der Houwen P.J.,Sommeijer B.P., (1989) , " Diagonally implicit Runge Kutta Nystrom methods for oscillatory problems" *SIAM J.Numer.Anal.*,26:141-429.
- [167] Simos T.E.,Raptis A.D.,(1990),"Numerov type methods with minimal phase lag for the numerical integration of the one dimensional Schrödinger equation",*Computing*,45:175-181.
- [168] Simos T.E.,Mousadis G.,(1994),"Some new Numerov type methods with minimal phase lag for the numerical integration of the radia Schrödinger equation",*Mol.Phys.*,83:1145-1153.
-

- [169] Simos T.E.,(1997),"New Numerov type methods for somputing eigenvalues ,resonances and phase shifts of the radial Schrödinger equation",*Int.J.Quantum Chem.*,62:467-475.
- [170] Simos T.E., (1993) , " High order methods with minimal phase lag of the numerical integration of the special second order initial value problem and their application to the one dimensional Schrödinger equation",*Comput.Phys.Commun.*,74:63-66.
- [171] Simos T.E.,(1996),"Accurate computations for the elastic scattering phase shift problem",*Comput.Chem.*,21:125-128.
- [172] Simos T.E.,(1997),"New P stable high order methods with minimal phase lag for the numerical integration of the radial Schrödinger equation",*Phys.Scripta*,55:644-650.
- [173] Simos T.E.,Tsitouras Ch.,(1997),"New P stable high order methods with minimal phase lag for the numerical integration of the radial Schrödinger equation",*J.Comp.Phys.*,130:123-128.
- [174] Simos T.E.,Mousadis G.,(1995),"A two step method for the numerical solution of the radial Schrödinger equation",*Comput.Math.Appl.*,29:31-37.
- [175] Simos T.E.,Tougelidis G., (1996) , " A Numerov type method for computing eigenvalues and resonances for the radial Schrödinger equation" *Comput.Chem.*,20:397-401.
- [176] Simos T.E., (1996) , " A new Numerov type method for computing eigenvalues and resonances of the radial Schrödinger equation" *Int.J.Mod.Phys.C.*,7:33-41.
-

- [177] Allison A., Raptis A.D., Simos T.E., (1991) , " An eighth order formula for the numerical integration of the one dimensional Schrödinger equation", *J.Comput.Phys.*,97:240-248.
- [178] Jamieson M.J.,(1999),"On an eighth order formula for solving Schrödinger equation", *J.Comput.Phys.*,149:194-197.
- [179] Simos T.E.,(1997),"Eighth order methods for accurate computations for the Schrödinger equation", *Comput.Phys.Commun.*,105:127-138.
- [180] Simos T.E., (1996) , " An Eighth order method with minimal phase lag for accurate computations for the elastic scattering phase shift problem", *Int.J.Mod.Phys.*,7:825-835.
- [181] Simos T.E., (1997) , "Eighth order methods with minimal phase lag for accurate computations for the elastic scattering phase shift problem", *J.Math.Chem.*,21:359-372.
- [182] Simos T.E., (1998) , " High algebraic , high phase lag methods for accurate computations for the elastic scattering phase shift problem ", *Can.J.Phys.*,76:473-493.
- [183] Simos T.E., (1998) , " High algebraic order methods with minimal phase lag for accurate solution of the Schrödinger equation " , *Int.J.Mod.Phys.C*,9:1055-1071.
- [184] Simos T.E.,(1991),"A Numerov type method for the numerical solution of the radial Schrödinger equation", *Appl.Numer.Math.*,7:201-206.
- [185] Simos T.E.,(1992),"Explicit two step methods with minimal phase lag for the numerical integration of special second order initial value
-

- problems and their application to the one dimensional Schrödinger equation", *J.Comp.Appl.Math.*,39:89-94.
- [186] Simos T.E., (1995) , " An explicit high order predictor corrector method for periodic initial value problems " ,*Math.Models Methods Appl.Sci.*,5:159-166.
- [187] Simos T.E.,(1997),"Eighth order methods for elastic scattering phase shifts",*Int.J.Theoretical Phys.*,36:663-672.
- [188] Simos T.E.,Tougelidis G.,(1997),"An explicit eighth order method with minimal phase lag for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Comp.Math.Sc.*,8:317-326.
- [189] Simos T.E.,(1998),"Eighth order method for accurate computations for the elastic scattering phase shift problem",*Int.J.Quant.Chem.*,68:1991-200.
- [190] Simos T.E.,(1999),"Explicit eighth order methods for the numerical integration of initial value problems with periodic of oscillating solutions",*Comput.Phys.Commun.*,119:32-44.
- [191] Simos T.E.,Tougelidis G.,(1997),"An explicit eighth order method with minimal phase lag for accurate computations of eigenvalues , resonances and phase shifts",*Comput.Chem.*,21:327-334.
- [192] Tsitouras Ch.,Simos T.E.,(1998),"Explicit high order methods for the numerical integration of periodic intitial value problems" *Appl.Math.Comput.*,95:15-26.
- [193] Avdelas G.,Simos T.E.,(1996),"Embedded methods for the numerical solution of the Schrödinger equation",*Comput.Math.Appl.*,31:85-102.
-

- [194] Simos T.E.,(1993), "A new variable step method for the numerical integration of special second order initial value problems nad their application to the one dimensional Schrödinger equation" ,Appl.Math.Lett.,6:67-73.
- [195] Simos T.E.,(1993), "A variable step procedure for the numerical integration of the one dimensional Schrödinger equation" Comput.Phys.,7:460-464.
- [196] Simos T.E.,(1994), "Some new variable-step methods with minimal phase-lag for the numerical integration of special 2nd order initial value problems" ,Appl.Math.Comp.,64:65-72.
- [197] Fack V.,Vanden Berghe G,(1985), "A finite differnce approach for the calculation of perturbed oscillator energies" J.Phys,A:Math.Gen.,18:3355-3363
- [198] Fack V.,Vanden Berghe G,(1987), "(Extended) Numerov method for computing eigenvalues of specific Schrodinger equations" J.Phys.A:Math.Gen.,20:4153-4160
- [199] Simos T.E.,Williams P.S.,(1997), "A finite difference method for the numerical solution of the Scrodinger equation" J.Comp.Appl.Math.,19:189-2058
- [200] Simos T.E.,(1997), "A new finite difference cheme for the numerical solution of the Schrodinger equation" Can.J,Phys.,75:325-335
- [201] Simos T.E.,(1998), "An accurate finite difference method for the numerical solution of the Schrodinger equatioin" J.Comp.Appl.Math.,91:47-61
- [202] Simos T.E.,Williams P.S.,(1996), "Some modified Runge Kutta methods of the numerical solution of some specific Schrodinger equations and related problems" Int.J.Mod.Phys.A,11:4731-4744
-

- [203] Simos T.E.,Williams P.S.,(2000),"Exponentially fitted Runge Kutta fourth algebraic order methods for the numerical solution of the Schrodinger equation and related problems" *Int.J.Mod.Phys.C*,11:785-807
- [204] Simos T.E.,(2000),"Exponentially fitted Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation and related problems" *Comput.Mater.*,18:315-322
- [205] Simos T.E.,(2000),"An embedded Runge Kutta method with phase lag of order infinity for the numerical solution of the Schrodinger equation" *Int.J.Mod.Phys.*,11:1115-1133
- [206] Simos T.E.,Vigo Aguiar J.,(2001),"A modified Runge Kutta method with phase lag of order infinity for the numerical solution of the Schrodinger equation and related problems", *Comput.Chem.*,25:275-281
- [207] Simos T.E.,Dimas E.A.,Sideridis B.,(1994),"A Runge Kutta Nystrom method for the numerical integration of special second order periodic initial value problems" *J.Comp.Appl.Math.*,51:317-326
- [208] Van de Vyver H.,(2006),"A fourth order symplectic exponentially fitted integrator" *Comp.Phys.Com.*,174(4):255-262
- [209] Simos T.E.,(2005),"A P stable exponentially fitted method for the numerical integration of the Schrodinger equation" *Molecular Simulation*,31(14-15):1095-1100
- [210] Va de Vyver H.,(2005),"Stability and phase lag analysis of explicit Runge Kutta methods with variable coefficients of oscillatory problems" *Comp.Phys.Com.*,173(3):115-130
-

- [211] Psihoyios G., Simos T.E., (2005), "A new trigonometrically fitted sixth algebraic order P-C algorithm for the numerical solution of the radial Schrodinger equation" *Mathematical and Computer Modelling*, 42(7-8):887-902
- [212] Tang C., Zhang F., Yan H.Q., et al, (2005), "Three step predictor corrector of exponential fitting method for nonlinear Schrodinger equations" *Communications In Theoretical Physics*, 44(3):435-439
- [213] Simos T.E., (2005), "A family of fifth algebraic order trigonometrically fitted Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation" *Computational Materials Science*, 34(4):342-354
- [214] Liu X.S., Ding P.Z., (2005), "Numerical method based on Magnus expansion and a new shooting method for eigenvalues of Schrodinger equation" *International Journal of Quantum Chemistry*, 103(2):149-156
- [215] Lim T.C., (2004), "Application of Maclaurin series in relating interatomic potential functions : A review" *Journal of Mathematical Chemistry*, 103(2):147-160
- [216] Ixaru L.G., Paternoster B., (2004), "Function fitting two step BDF algorithms for ODEs" *Lecture Notes In Computer Science*, 30039:443-450
- [217] Psihoyios G., Simos T.E., (2003), "Exponentially and trigonometrically fitted explicit advanced step opint (EAS) methods for initial value problems with oscillating solutions" *International Journal of Modern Physics*, 14(2):175-184
- [218] Vigo-Aguiar J., Simos T.E., (2002), "Family of twelve steps exponential fitting symmetric multistep methods for the numerical solution of the Schrodinger equation" *Journal of Mathematical Chemistry*, 32(3):257-270
-

- [219] Wang Z.C.,(2005),"P stable linear symmetric multistep methods for periodic initial value problems" *Computer Physics Communications*,171(3):162-174
- [220] Vigo-Aguiar J.,Simos T.E.,(2005),"Review of multistep methods for the numerical solution of the radial Schrodinger equation" *International Journal of Quantum Chemistry*,103(3):278-290
- [221] Vigo-Aguiar J.,Ramos H.,(2005),"A variable step Numerov method for the numerical solution of the Schrodinger equation" *Journal Chemistry*,37(3):255-262
- [222] Sakas D.P.,Simos T.E.,(2005),"A family of multiderivative methods for the numerical solution of the Schrodinger equation" *Journal of Mathematical Chemistry*,37(3):317-331
- [223] Van de Vyver H.,(2005),"Comparison of some special optimized fourth order Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation" *Computer Physics Communications*,166(2):109-122
- [224] Sakas D.P.,Simos T.E.,(2005),"Multiderivative methods of eight algebraic order with minimal phase lag for the numerical solution of the radial Schrodinger equation" *Journal of Computational And Applied Mathematics*,175(1):161-172
- [225] Van de Vyver H.,(2006),"An embedded phase fitted modified Runge Kutta method for the numerical integration of the radial Schrodinger equation",*Physics Letters A* 352 (4-5):278-285
- [226] Van de Vyver H.,(2006),"A fourth order symplectic exponentially fitted integrator",*Computer Physics Communications*,174(4):255-262
-

- [227] Van de Vyver H.,(2005),"Modified explicit Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation",*Applied Mathematics And Computation*,171(2):1025-1036
- [228] Van de Vyver H.,(2005),"Stability and phase lag analysis of explicit Runge Kutta methods with variable coefficients for oscillatory problems",*Computer Physics Communications*,173(3):115-130
- [229] Anastassi Z.A.,Simos T.E.,(2005),"Trigonometrically fitted fifth order Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation",*Mathematical And Computer Modelling*,42(7-8):877-886
- [230] Simos T.E.,(2005),"A family of fifth algebraic order trigonometrically fitted Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation",*Computational Materials Science*,34(4):342-354
- [231] Van de Vyver H.,(2005),"An embedded 5(4) pair of modified explicit Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation",*International Journal Of Modern Physics C*,16(6):879-894
- [232] Anastassi Z.A.,Simos T.E.,(2005),"Trigonometrically fitted Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation",*Journal of Mathematical Chemistry*,37(3),:281-293
- [233] Van de Vyver H.,(2005),"Comparison of some special optimized fourt order Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrodinger equation",*Computer Physics Communications*,166(2):109-122
- [234] Anastassi Z.A.,Simos T.E.,(2004),"Special optimized Runge Kutta methods for IVPs with oscillating solutions",*International Journal Of Modern Physics C*,15(1):1-15
-

- [235] Berghe G.V.,Van Daele A.,Vyver H.V.,(2003),"Exponential fitted Runge Kutta methods of collocation type : fixed of variable knot points",Journal Of Computational And Applied Mathematics,159(2):217-239
- [236] Simos T.E.,Famelis I.T.,Tsitouras C.,(2003),"Zero dissipative , explicit Numerov type methods for second order IVPs with oscillating solutions",Numerical algorithms,34(1):27-40
- [237] Van de Vyver H.,(2006),"An embedded phase fitted modified Runge Kutta method of the numerical integration of the radial Schrodinger equation",Physics Letters A,352(4-5):278-285
- [238] Miller H.J.J.,(1971),"On the locations of zeros of certain classes of polynomials with applications to numerical analysis",J.Inst.math.Appl.,8:397-406
- [239] Marden M.,(1966),math.Surv.No3 2nd edn.Am.Math.Soc.
- [240] Hilber H.M.,Hughes T.J.R.,(1978),"Collocation,dissipation and overshoot for time integration schemes in structural dynamics",Eartquake Eng.Struct.Dynam.6:99-177
- [241] Wood W.L.,(1977),"On the Zienkiewicz four time level scheme for the numerical integration of vibration problems",Int.J,Numer.Meth.Engrg.,11:1519-1528
- [242] Smith I.M.,(1975),"Some time dependent soil sctructure interaction problems",Finite Elements in Geomechanics,chap 8,Jonh Wiley,London
- [243] Σίμος Θ.Η.,(1990),"Αριθμητική Επίλυση Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων Με Περιοδική Λύση ",Διδακτορική Διατριβή,Μετσόβειο Πολυτεχνείο

- [244] Simos T.E.,Williams P.S.,(1999),"On finite difference methods for the solution of the Schrodinger equation",Comput.Chem.,23:513-554
- [245] Avdelas G.,Konguetsof A.,Simos T.E.,(2001),"A generator of hybrid explicit methods for the numerical solution of the Schrodinger equation and related problems",Comput.Phys.Commun.,136:14-28
- [246] Avdelas G.,Konguetsof A.,Simos T.E.,(2001),"A generator and an optimized generator of high order hybrid explicit methods for the numerical solution of the Schrodinger equation,Part 1 :Development of the basic method",J.Math.Chem.,29:281-291
- [247] Avdelas G.,Simos T.E.,(1999),"Embedded eight order methods for the numerical solution of the Schrodinger equation",J.Math.Chem.,26:327-341
- [248] Blatt J.M.,(1967),"Practical points concerning the solution of Schrodinger equation",J,Comput.Phys.1:382-396
- [249] Cooley J.W.,(1961),"An improved eigenvalues corrector formula for solving Schrodinger's equation for central fields",Math.Comput.,15:363-374
- [250] Kalogiratou Z.,Simos T.E.,(2002),"Construction of trigonometrically and exponentially fitted Runge Kutta Nystrom methods for the numerical solution of the Schrodinger equation and related problems",J.Math.Chem.31:211-232
- [251] Simos T.E.,(1998),"Some embedded modified Runge Kutta methods for the numerical solution of some specific Schrodinger equations",J.Math.Chem.24:23-37
- [252] Simos T.E.,(1999),"A family of P stable exponentially fitted methods for the numerical solution of the Schrodinger equation",J,Math.Chem25:65-84
-

- [253] Simos T.E.,(2000),in : A.Hinchliffe (Ed.),"Atomic Structure Computations in Chemical Modelling : Applications and Theory",The Royal Society of Chemistry,pp:38-142
- [254] Coleman J.P.,(1992),"Numerical methods for $y''=f(x,y)$,in : D.Bainov,V.Civachen (Eds).Proceedings of the first International Colloquium on Numerical Analysis",Bulgaria,pp:27-38
- [255] Landau L.D.,Lifshitz,(1965),"Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory",F.M.,Quantum Mechanics,Pergamon,New York
- [256] Herzberg G.,(1950),"Spectra of Diatomic Molecules",Van Nostrand,Toronto
- [257] Ixaru L.Gr.,Micu M.,(1978),"Topics in Theoretical Physics",Central Institute of Physics,Bucharest
- [258] Simos T.E.,(2002),"Numerical methods for 1D,2D and 3D differential equations arising in chemical problems",Chemical Modelling:Application and Theory,Vol.2,The Royal Society of Chemistry,pp:170-270
- [259] Dormand J.R.,El-Mikkawy M.E.,Prince P.J.,(1987),"Families of Runge Kutta Nystrom formulae",IMA J,Numer Anal.7:423-430
- [260] Dormand J.R.,El-Mikkawy M.E.,Prince P.J.,(1987),"High order embedded Runge Kutta Nystrom formulae",IMA J,Numer.Anal.7:595-617
- [261] Allison A.C.,(1970),"The numerical solution of coupled differential equation arising from the Schrodinger equation",J.Comput.Phys.6:378-391
-

- [262] Berstein R.B.,Dalgarno A.,Massey H.,Percival I.C.,(1963),"Thermal scattering of atoms by homonuclear diatomic molecules",Proc.Royal Soc.London,Series A,274:427-442
- [263] Bessis N.,Bessis G.,(1980),"A note on the Schrödinger equation for the $x^2 + \lambda x^2/(1 + gx^2)$ potential",J.Math.Phys.21:2780
- [264] Stiefel E.,Bettis D.G.,(1969),"Stabilization of Cowell's method",Numer.Math.13:154
- [265] Liniger W.,Willoughby R.A.,(1970),"Efficient integration methods for stiff systems of ordinary differential equations",SIAM J.Numer.Anal.7:47
- [266] Quinlan D.G.,Tremaine S.,(1990),"Symmetric Multistep Methods for the Numerical Integration of Planetary Orbits",The Astronomical Journal,100,5:1694-1700
- [267] Henrici P.,(1962),"Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations",John Wiley and Sons,New York,USA
- [268] <http://www.burtleburtle.net/bob/math/multistep.html>
- [269] Franco J.M.,Palacios M.,(1990),"High-order P-stable multistep methods",J.Comput.Appl.Math.,30,1
- [270] Hairer E.,(2006),"Symmetric Linear Multistep Methods",BIT Numerical Mathematics 46:515-524
- [271] Anastassi Z.A.,Simos T.E.,(2006),"A Family of Exponentially Fitted Runge Kutta Methods with Exponential Order up to Three for the Numerical Solution of the Schrodinger Equation",Journal of Mathematical Chemistry,40(3):79-100
-

- [272] Simos T.E.,(2005),"P-stable Four Step Exponentially Fitted Method for the Numerical Integration of the Schrodinger Equation",CoLe,1,1:37-45
- [273] Simos T.E.,(2007),"Closed Newton Cotes Trigonometrically Fitted Formulae for Numerical Integration of the Schrodinger Equation",CoLe,1,3:45-57
- [274] Psihoyios G.,(2006),"A Block Implicit Advanced Step point (BIAS) Algorithm for Stigg Differential Systems",CoLe,1-2,2:51-58
- [275] Aceto L.,Pandolfi R.,Trigiante D.,(2007),"Stability Analyses of Linear Multistep Methods via Polynomial Type Variation",JNAIAM,2,1-2:1-9
- [276] Capper S.D.,Cash J.R.,Moore D.R.,(2006),"Lobatto Obrechhoff Formulae for 2nd Order Two Point Boundary Value Problems",JNAIAM,1,1:13-25
- [277] Capper S.D.,Moore D.R.,(2006),"On High Order MIRK Schemes and Hermite Birkhoff Interpolants",JNAIAM,1,1:27-47
- [278] Cash J.R.,Sumarti N.,Abdulla T.J.,Vieira I.,(2006),"The Derivation of Interpolants for Nonlinear Two Point Boundary Value Problems",JNAIAM,1,1:49-58
- [279] Cash J.R.,Girdlestone S.,(2006),"Variable Step Runge Kutta Nystrom Methods for the Numerical Solution of Reversible Systems",JNAIAM,1,1:59-80
- [280] Cash J.R.,Mazzia F.,(2006),"Hybrid Mesh Selection Algorithms Based on Conditioning for Two-Point Boundary Value Problems",JNAIAM,1,1:81-90
- [281] Iavernaro E.,Mazzia F.,Trigiante D.,(2006),"Stability and Conditioning in Numerical Analysis",JNAIAM,1,1:91-112
- [282] Iavernaro E.,Trigiante D.,(2006),"Discrete Conservative Vector Fields Induced by the Trapezoidal Method",JNAIAM,1,1:113-130
-

- [283] Mazzia F.,Sestini A.,Trigiante D.,(2006),"BS Linear Multistep Methods on Non uniform Meshes",JNAIAM,1,1:241-255
- [284] Vanden Berghe G.,Van Daele M.,(2006),"Exponentially fitter Stromer Verlet methods",JNAIAM,1,3:241-255
- [285] Simos T.E.,Williams P.S.,"A new Runge Kutta Nystrom method with phase lag of order infinity for the numerical solution of the Schrodinger equation",MATCH Commun.Math,Comput.Chem.,45:123-137
- [286] Pihoyios G.,Simos T.E.,(2005),"A family of fifth algebraic order Trigonometrically fitted P-C schemes for the numerical solution of the radial Schrodinger equation",MATCH Commun.Math.Comput.Chem.,53:321-344
- [287] Simos T.E.,Gutman I.,(2005),"Papers presented on the International Conference on Computational Methods in Sciences and Engineering", (Castoria,Greece,September 12-16,2003),MATCH Commun.Math.Comput.Chem.,53(2):A3-A4
- [288] Simos T.E.,(2000),"Chemical Modelling Applications and Theory",Vol1.,Specialist Periodical Reports,The Royal Society of Chemistry,Cambridge
- [289] Simos T.E., "Dissipative Trigonometrically fitted methods for second order ivps with oscillating solution",International Journal of Modern Physics C,13:1333-1345
- [290] Simos T.E.,(1990),"A 4 step Method for the Numerical Solution of the Schrodinger Equation",Journal of Computational and Applied Mathematics,30,3:251-255
-

- [291] Simos T.E.,(1991),"A Nymerov Type Method for the Numerical Solution of the Radial Schrodinger Equation",*Applied Numerical Mathematics*,7,2:201-206
- [292] Simos T.E.,(1992),"Explicit 2 step Methods with Minimal Phase Lag for the Numerical Integration of Special 2nd Order Initial Value Problems and Their Application to the One Dimensional Schrodinger Equation",*Journal of Computational and Applied Mathematics*,39,1:89-94
- [293] Anastassi Z.A.,Simos T.E.,(2008),"New Trigonometrically Fitted Six Step Symmetric Methods for the Efficient Solution of the Schrodinger Equation",*MATCH Commun.Math.Comput.Chem.*,60,3.
- [294] Panopoulos G.A.,Anastassi Z.A.,Simos T.E.,(2008),"The New Optimized Eight Step Symmetric Methods for the Efficient Solution of the Schrodinger Equation and Related Problems",*MATCH Commun.Math.Comput.Chem.*,60,3:773-785
- [295] Anastassi Z.A.,Simos T.E.,(2008),"A Six Step P stable Trigonometrically Fitted Method for the Numerical Integration of the Radial Schrodinger Equation",*MATCH Commun.Math.Comput.Chem.*,60,3.
- [296] Sideridis A.B.,Simos T.E.,(1992),"A Los Order Embedded Runge Kutta Method for Periodic Initial Value Problems",*Journal of Computational and Applied Mathematics*,44,2:235-244
- [297] Simos T.E.,(1993),"A High Order Predictor Corrector Method for Periodic IVPs",*Applied Mathematics Letters*,6,5:9-12
-

- [298] Simos T.E.,Vigo-Aguiar J.,(2003),"A dissipative exponentially fitted method for the numerical solution of the Schrodinger equation and related problems",Computer Physics Communications,152:274-294
- [299] Simos T.E.,Psihoyios G.,(2005),"Special issueb Selected Papers of the International Conference on Computational Methods in Sciences and Engineering " ,(ICCMSE 2003) Kastoria,Greece,12-16 September 2003 - Preface , J.Comput.Appl.Math.,175(1):IX-IX MAR 1
- [300] Panopoulos G.A.,Anastassi Z.A.,Simos T.E., "Two Optimized Symmetric Eight Step Implicit Methods for Initial Value Problems with Oscillating Solutions",Journal of Mathematical Chemistry,vol.46,no.2:604-620
- [301] G. A. Panopoulos, Z. A. Anastassi, T. E. Simos,(2011)"A new symmetric eight-step predictor-corrector method for the numerical solution of the radial Schrödinger equation and related orbital problems",International Journal of Modern Physics C, 22, 2:133-153
- [302] J. Vigo-Aguiar,T.E. Simos,(2001), "An Exponentially Fitted and Trigonometrically Fitted Method for the Numerical Solution of Orbital Problems",THE ASTRONOMICAL JOURNAL,122:1656-1660
- [303] E. Hairer, C. Lubich , G. Wanner,(2002),"Geometric numerical integration, Structure preserving algorithms for ordinary differential equations", Springer
- [304] G.A. Panopoulos, Z.A. Anastassi,T.E. Simos,(2013), "A new Eight-Step Symmetric Embedded Predictor-Corrector Method (EPCM) for Orbital problems and Related IVP's with Oscillatory Solutions",The Astronomical Journal, 145, 3:75
-

- [305] G. A. Panopoulos, T. E. Simos,(2013),"A new optimized symmetric 8-step semi-embedded predictor corrector method for the numerical solution of the radial Schrödinger equation and related orbital problems",Journal of Mathematical Chemistry, published online
- [306] T.E. Simos,(2004),"On the Explicit Four-Step Methods with Vanished Phase-Lag and its First Derivative", Applied Mathematics & Information Sciences, 8(2):447-458
- [307] G. A. Panopoulos,T. E. Simos,(2014)," A New Optimized Symmetric Embedded Predictor-Corrector Method (EPCM) for Initial-Value Problems with Oscillatory Solutions", Applied Mathematics & Information Sciences,8(2):703-713
- [308] Lambert J.D.,(1991),"Numerical Methods for Ordinary Differential Systems,The Initial Value Problem",Pages 104-107,John Wiley and Sons
- [309] Butcher J.C.,(2003),"Numerical Methods for Ordinary Differential Equations,The Initial Value Problem",Pages 104-107,John Wiley and Sons
- [310] Αβδελάς Γ.,Σίμος Θ.Η.,(2004),"Αριθμητική Ανάλυση",Συμμεών,Αθήνα
- [311] Παπαγεωργίου Γ.Σ.,Τσίτουρας Χ.Γ.,Φαμέλης Ι.Θ.,(2004),"Σύγχρονο Μαθηματικό Λογισμικό Matlab-Mathematica ",Συμμεών,Αθήνα
- [312] Καλογηράτου Ζ.,Μονοβασίλης Θ.,Σίμος Θ.Η,(2005),"Αριθμητική Επίλυση Διαφορικών Εξισώσεων",Καστοριά
- [313] Fukushima, T.,(1997) , "Picard Iteration method, Chebyshev Polynomial Approximation, and Global Numerical Integration of Dynamical Motions",it Astronomical Journal v.113 , p. 1909-1914
-

- [314] Μιχαήλ Ν.Βραχάτης , (2012) , "Αριθμητική Ανάλυση : Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις", Εκδόσεις Κλειδάριθμος
- [315] Bojana Rosic, (2016) , <https://www.tu-braunschweig.de/Medien-DB/iwr/lec13.pdf>, Technische Universitat Braunschweig
- [316] Tadeusz Stys , (2009) , "Lecture Notes in Numerical Methods of Differential Equations"
- [317] Rolf Jeltsch , (1978) , " Mathematics Of Computation ",Vol.32,144:1108-1114
- [318] P.I.Stasinou,T.E.Simos,(2018),"New 8-step symmetric embedded predictor – corrector (EPCM) method with vanished phase-lag and its first derivative for the numerical integration of the Schrödinger equation", Journal of Mathematical Chemistry,Vol56,pp 2741–2767
- [319] P.I.Stasinou,T.E.Simos,"New Eight Step Symmetric Embedded Predictor Corrector (EPC2M) Method with Vanished Phase lag and its First and Second Derivatives for the Numerical Integration of the Schrödinger equation",has been sent for publication
- [320] P.I.Stasinou,T.E.Simos (2016),"Symmetric embedded predictor corrector (EPCM) methods with vanished phase lag and its derivatives for the numerical solution of the Schrödinger equation", AIP Conference Proceedings,1790,150034,<https://doi.org/10.1063/1.4968773>
- [321] P.I.Stasinou,T.E.Simos (2017),"Symmetric embedded predictor–corrector (EP2CM) methods with vanished phase–lag and its derivatives for second order problems", AIP Conference Proceedings,1863, 560096,<https://doi.org/10.1063/1.4992779>
-

- [322] P.I.Stasinios,T.E.Simos (2017),"Symmetric embedded predictor–predictor–corrector (EPPCM) methods with vanished phase–lag and its derivatives for second order problems",AIP Conference Proceedings 1906, 200023,<https://doi.org/10.1063/1.5012499>
- [323] P.I.Stasinios,T.E.Simos (2018),"Symmetric embedded predictor3–Corrector (EP3CM) methods with vanished phase–lag and its derivatives",AIP Conference Proceedings 1978, 470110,<https://doi.org/10.1063/1.5044180>
- [324] P.I.Stasinios,T.E.Simos (2018),"Symmetric embedded predictor4–Corrector (EP4CM) complete in phase methods", AIP Conference Proceedings 2040, 150017,<https://doi.org/10.1063/1.5079220>
- [325] P.I.Stasinios,T.E.Simos (2019),"Symmetric embedded predictor5–Corrector (EP5CM) full in phase methods",AIP Conference Proceedings.2116,450109,<https://doi.org/10.1063/1.5114576>
-